



Planificaciones

6310 - Termodinámica Estadística

Docente responsable: RAZZITTE ADRIAN CESAR

OBJETIVOS

El objetivo de un curso de Termodinámica Estadística en las carreras de Ingeniería, en particular Ingeniería Química, es familiarizar al estudiante con el desarrollo de modelos para predecir propiedades de sistemas macroscópicos a partir del conocimiento de las propiedades atómico-moleculares de los componentes. La simulación por computadora de estos modelos y la consiguiente obtención de resultados correlacionables con sistemas reales ha permitido la aplicación al campo de la ingeniería de una ciencia otrora perteneciente al dominio estrictamente académico.

CONTENIDOS MÍNIMOS

Deducción de la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo. Deducción de la función de distribución de Boltzmann para sistemas sin y con degeneración. Concepto de función de partición, su importancia en Termodinámica Estadística. Diferencia entre función de partición canónica y función de partición molecular. Diferentes tipos de funciones de partición: su deducción. Aplicación a fluidos sin interacción y con interacción. Deducción de ecuaciones de estado a partir del uso de potenciales intermoleculares. Introducción a los métodos de simulación por computadora: Método de Monte Carlo y Dinámica Molecular. Aplicación a la simulación de fluidos. Obtención de la función de distribución radial.

PROGRAMA SINTÉTICO

Fundamentos de Mecánica Cuántica, Fundamentos de Mecánica Estadística de sistemas sin Interacción (gases ideales). Estadística de Boltzmann. Conjuntos estadísticos. Cálculo de propiedades termodinámicas. Partículas independientes localizadas y no localizadas. Potenciales y Fuerzas Intermoleculares. Sistemas con Interacción (gases reales). Función de partición de sistemas con interacción. Propiedades Termodinámicas. Ecuación Virial. Ecuaciones de Estado para fluidos. Introducción a los métodos de Simulación: Monte Carlo, Dinámica Molecular. Simulación por Computadora de modelos de fluidos que interactúan bajo diferentes potenciales (esferas duras, Lennard-Jones). Cálculo del Segundo coeficiente del virial. Función de Distribución Radial. Teorías de líquidos basadas en el modelo de esferas duras. Teorías de líquidos modernas. Propiedades de Transporte. Termodinámica estadística de Soluciones: Ecuación UNIQUAC, Método UNIFAC

PROGRAMA ANALÍTICO

(63.10) Termodinámica Estadística
Programa Analítico 2009

Unidad I

FUNDAMENTOS DE MECÁNICA CUÁNTICA

Función de onda. Ecuación de Schrödinger. Interpretación de la función de onda. Observables derivados de estados cuánticos. Fluctuaciones entre estados cuánticos. Espacio de las fases.

Unidad II

MECÁNICA ESTADÍSTICA Y TERMODINÁMICA

La distribución Estadística. Conjuntos Estadísticos y ley de distribución de Energía. Propiedades termodinámicas en el conjunto canónico. Mecánica estadística clásica. Función de partición semiclásica. Estadísticas de Fermi Dirac y Bose Einstein.

Unidad III

GAS IDEAL EN EL EQUILIBRIO

Factorización de la función de partición, diferentes contribuciones. Mezclas de gases. Equilibrio Químico.

Unidad IV

POTENCIALES INTERMOLECULARES Funciones para moléculas no polares. Tipos de potenciales de interacción. Modelos. Funciones para moléculas polares. Tipos de potencial. Modelos.

Unidad V

LA FUNCIÓN DE DISTRIBUCIÓN RADIAL PARA FLUÍDOS EN EQUILIBRIO SIMULACIÓN MONTE CARLO Y DINÁMICA MOLECULAR

Función de partición. Propiedades configuracionales y residuales Funciones de distribución configuracionales. Función de distribución radial y propiedades termodinámicas. Ecuaciones de estado. Ley de los estados correspondientes. Comparación con experimentos. Introducción al Método de Monte Carlo y Dinámica Molecular Simulación con PC.

Unidad VI**ECUACIÓN VIRIAL DE ESTADO PARA GASES**

La ecuación Virial de Estado. Desarrollos en serie para la densidad. Función de distribución radial a baja densidad. La ecuación virial en la región crítica. Mezclas diluídas de gases. Modelos. Obtención de propiedades termodinámicas a partir del segundo coeficiente del virial . Simulación con el programa EOS.

Unidad VII**CÁLCULO DE EQUILIBRIOS DE FASE**

Modelización de la función de Gibbs en exceso. Cálculo del factor γ ; a partir de consideraciones mecano-estadísticas. Ecuación UNIQUAC. Cálculo del coeficiente de fugacidad. Uso del Método UNIFAC.

Unidad VIII**SÓLIDOS**

Sólido de Einstein y Sólido de Debye. Modelo de Ising aplicado a materiales ferromagnéticos, aleaciones . Gas reticular bidimensional, isothermas de adsorción. Simulación

Unidad IX**TEORÍAS DE LÍQUIDOS BASADAS EN EL MODELO DE ESFERAS DURAS**

Propiedades termodinámicas basadas en el Modelo de Esferas Duras. Función de distribución radial para Esferas Duras. Simulación por computadora (Método de Monte Carlo para discos y esferas duras).

BIBLIOGRAFÍA

- Thomas M. Reed and Keith E.Gubbins "Applied Statistical Mechanics". McGraw-Hill (1973)
- M. Díaz Peña "Termodinámica Estadística" Ed. Alhambra (1976)
- T.R. Hill "Termodinámica Estadística" Paraninfo (1975).
- T.R. Hill "Thermodynamics of Small Systems" Dover (1990).
- D. Chandler "Introduction to Modern Statistical Mechanics" Oxford University Press (1987).
- J.M. Prausnitz, R.N. Lichtenthaler, E.G. de Azevedo "Molecular Thermodynamics of Fluid-Phase Equilibria" Prentice Hall Inc. N.J. (1999).
- R.C. Reid, J.M. Prausnitz and T.K. Sherwood "The Properties of Gases and Liquids" Mc Graw-Hill (1977).
- Donald Rapp "Statistical Mechanics" Holt Rinehart and Winston Inc.(1972).

RÉGIMEN DE CURSADA

Metodología de enseñanza

Modalidad de Evaluación Parcial

CALENDARIO DE CLASES

Semana	Temas de teoría	Resolución de problemas	Laboratorio	Otro tipo	Fecha entrega Informe TP	Bibliografía básica
<1> 09/03 al 14/03						
<2> 16/03 al 21/03						
<3> 23/03 al 28/03						
<4> 30/03 al 04/04						
<5> 06/04 al 11/04						
<6> 13/04 al 18/04						
<7> 20/04 al 25/04						
<8> 27/04 al 02/05						
<9> 04/05 al 09/05						
<10> 11/05 al 16/05						
<11> 18/05 al 23/05						
<12> 25/05 al 30/05						
<13> 01/06 al 06/06						
<14> 08/06 al 13/06						
<15> 15/06 al 20/06						
<16> 22/06 al 27/06						

CALENDARIO DE EVALUACIONES

Evaluación Parcial

Oportunidad	Semana	Fecha	Hora	Aula
1º				
2º				
3º				
4º				