Universidad del Cauca

Facultad de Ciencias Naturales, Exactas y de la Educación

Departamento de Química

Tipo de actividad: Asignatura(QCA514)	Créditos: 4
Nombre: Fisicoquimica.	Intensidad Horaria: 0 Horas semanales.
Requisitos:	Correquisitos:

Introducción

Introduce al estudiante en los procedimientos de cálculo de magnitudes macroscópicas (energía interna, entropía, capacidades caloríficas, propiedades eléctricas y magnéticas, etc) de sistemas supramoleculares reales, tanto sólidos como líquidos, gases y disoluciones, utilizando información microscópica molecular de sus constituyentes y mediante métodos algebraicos basados en los formalismos de las funciones de partición y de las funciones de distribución, así como mediante métodos computacionales tipo Monte Carlo y Dinámica Molecular.

Objetivo General

Tener una idea más completa (punto de vista microscópico) de los fenómenos y leyes de la Termodinámica y la aplicación del método estadístico a la Fisicoquímica.

Proporcionar una interpretación más profunda de la termodinámica, exponiendo los métodos de cálculo de las magnitudes termodinámicas empleando constantes moleculares.

Contenido

1: Sinopsis Histórica. Breve recorrido histórico, avances más significativos.
2: Termodinámica de Equilibrio
3: Fundamentos de la Mecánica Estadística de Equilibrio 4: Estadística de Boltzmann: Gases Ideales Clásicos
5: Estadísticas de Bose-Einstein y Fermi-Dirac: Gases Ideales Cuánticos 6: Transiciones de Fase
7: Método Monte Carlo
8: Mecánica Estadística Clásica de Equilibrio 9: Fluidos Clásicos
10: Introducción a la Mecánica Estadística de No-Equilibrio

Bibliografía

1. Chandler, D.; Introduction to Modern Statistical Mechanics; Oxford University Press, Oxford, 1987.Berry, Rice, and Ross; Physical Chemistry;
2. Callen, H.B.; Thermodynamics; Wiley, New York, 1960.
3. Davis, J.C., Jr.; Advanced Physical Chemistry, Ronald Press, New York, 1965.
4. Feynman, R.P.; Statistical Mechanics; Benjamin, Reading, 1972.
5. Goodisman, J.; Statistical Mechanics for Chemists; Wiley, New York, 1997.
6. Koonin, S.E.; Computational Physics; Benjamin-Cummings, Menlo Park, 1986.
7. Kubo, R. et al.; Statistical Physics I, II; Springer-Verlag, New York, 1985.
8. Margenau H., and G.M. Murphy; The Mathematics of Physics and Chemistry, 2nd ed., Van Nostrand
9. Reinhold, New York, 1956.
10. McQuarrie, D.; Statistical Mechanics; Harper & Row; New York, 1976.
11. Steinfeld, J., J.E. Francisco, and W.L Hase; Chemical Kinetics and Dynamics; Prentice-Hall, Englewood

12. Eyring, H., J. Walter, and G.D. Kimball; Quantum Chemistry, Wiley, New York, 1944.
13. McHale, J.L.; Molecular Spectroscopy; Prentice-Hall, Upper Saddle River, New Jersey, 1999.
14. Rice, O.K.; Statistical Mechanics, Thermodynamics and Kinetics,
15. Schatz G.C., and M.A. Ratner; Quantum Mechanics in Chemistry; Prentice-Hall, Englewood Cliffs, 1993.