

1. Asignatura	Bases físicas y químicas de la Mecánica Estadística				
Carácter:	obligatoria	ECTS	5	Temporal:	C1
Lenguas impartición	Castellano				
2. Resultados de aprendizaje:					
1. Comprender la descripción estadística de un sistema macroscópico a partir de consideraciones de su estructura microscópica constituida por partículas individuales sometidas a las leyes de la Mecánica Clásica.					
2. Entender la compatibilidad de esta descripción estadística con la formulación de la Termodinámica.					
3. Comprender la diferencia entre los posibles colectivos estadísticos para describir un sistema macroscópico dependiendo de las variables determinadas.					
4. Aplicar una descripción estadística formal a la descripción de la estructura y propiedades de un fluido clásico.					
5. Conocer la descripción que aplica en el marco de la Mecánica Estadística a un sistema fuera del equilibrio.					
6. Derivar de las condiciones de no equilibrio de un fluido la descripción estadística de propiedades de correlación temporal.					
3. Contenidos					
<u>3.1. Descriptores</u>					
Descripción de sistemas físicos utilizando estadística matemática. Relación de la descripción estadística con la Termodinámica clásica. Fuerzas intermoleculares. Descripción de distintos colectivos según las variables termodinámicas de interés. Fluidos clásicos. Sistemas fuera del equilibrio.					
<u>3.2. Temario</u>					
Tema 1. Introducción. Límite de validez de la aproximación clásica. Macro y microestados. Método de Gibbs. Densidad de probabilidad en el espacio de fases. Ecuación de Liouville. Postulados básicos. Equilibrio Estadístico.					
Tema 2. Fuerzas intermoleculares y modelos de potencial. Introducción a las fuerzas intermoleculares. Interacciones atractivas. Interacciones carga-carga y dipolo-dipolo. Dipolos inducidos. Momentos eléctricos de orden superior. Puentes de hidrógeno. Interacciones repulsivas. Modelos de potencial. Aproximación de interacciones por pares. Modelos sencillos: esfera dura, pozo cuadrado, Lennard-Jones, Mie, Yukawa, etc.					
Tema 3. Colectivo microcanónico. Volumen de fases. Sistemas normales. Definición estadística de entropía. Entropía y probabilidad. Gas monoatómico ideal. Paradoja de Gibbs. Definición correcta de entropía.					
Tema 4. Colectivo canónico. Densidad de probabilidad. Fluctuaciones de energía. Equivalencia con el colectivo microcanónico. Función de partición. Conexión con la Termodinámica. Teorema de equipartición de la energía.					
Tema 5. Colectivo gran canónico. Densidad de probabilidad. Función de partición generalizada. Conexión con la Termodinámica. Fluctuaciones de densidad. Equivalencia con el colectivo canónico.					
Tema 6. Fluidos clásicos. Promedios en el espacio de fases. Funciones de distribución. Cálculo e propiedades termodinámicas a partir de $g(r)$. Solvatación y equilibrio químico en líquidos. Líquidos moleculares.					
Tema 7. Sistemas fuera del equilibrio. Sistemas cerca del equilibrio. Funciones de correlación temporal. Difusión. Propiedades de transporte: viscosidad y conductividad térmica. Conductividad eléctrica. Funciones de respuesta. Teorema de fluctuación-Disipación. Movimiento Browniano.					
<u>3.3. Bibliografía</u>					
1. D. Chandler, <i>Introduction to Modern Statistical Mechanics</i> , Oxford University Press (New York, 1987).					
2. J. de la Rubia, J. Brey, <i>Mecánica Estadística. Cuadernos UNED</i> (Madrid, 2001).					
3. K. Huang, <i>Introduction to Statistical Physics</i> (Taylor and Francis, New York, 2001).					
4. R. Kubo, <i>Statistical Mechanics</i> . North-Holland (Amsterdam, 1974).					
5. L. D. Landau, E. M. Lifshitz, <i>Física Estadística. Vol. 5. Curso de física teórica</i> (Reverté. Barcelona, 1988).					
6. D. A. McQuarrie, <i>Statistical Mechanics</i> (Univ. Sci. Books, 2000).					
7. F. W. Sears, G. L. Salinger, <i>Termodinámica, teoría cinética y Mecánica Estadística</i> (Reverté, Barcelona, 1980).					

8. R. C. Tolman, <i>Principles of Statistical Mechanics</i> (Oxford, 1938).		
9. R. Zwanzig, <i>NonEquilibrium Statistical Mechanics</i> (Oxford, 2001).		
4. Observaciones:		
5. Competencias:		
5.1. Básicas y generales	Generales	CG1, CG2, CG3, CG4
	Básicas	CB6, CB7, CB8, CB9, CB10
5.2. Transversales	CT2, CT3, CT4, CT5, CT6	
5.3. Específicas	CE6, CE7, CE11	
6. Actividades formativas		
Actividades formativas	Horas	Presencialidad (%)
AF1-Actividades dirigidas (clases expositivas, clases de problemas y talleres de programación)	35	100
AF2. Actividades supervisadas (tutorías individuales y colectivas y trabajos tutelados)	30	50
AF3. Actividades autónomas (realización de problemas, programas y estudio personal)	60	0
Total	125	-
7. Metodologías docentes		
Tipo de metodología	Denominación	
MD1. Clases expositivas mediante <i>Adobe Connect</i> . MD2. Clases de problemas utilizando <i>Adobe Connect</i> . MD4. Tutorías individuales y/o colectivas programadas. MD5. Trabajos tutelados (proyectos, programas, etc.). MD6. Realización de problemas propuestos. MD8. Estudio personal (lectura de bibliografía recomendada, realización de cuestionarios, tests y exámenes preparatorios vía el <i>Moodle</i> del Campus Virtual, uso y estudio de códigos computacionales de la biblioteca de la Red Española de Simulación Molecular, etc.)		
8. Sistemas de evaluación	Pond. Mínima	Pond. Máxima
Participación activa en el desarrollo de la materia mediante teledocencia (<i>Adobe Connect</i>) y Campus Virtual (<i>Moodle</i>) (uso del chat, foros, e-mail, etc.)	0	0.2
Realización de problemas y/o programas computacionales, por escrito, sobre los contenidos de la asignatura	0.2	0.4
Pruebas escritas de evaluación mediante el uso del Campus Virtual (<i>Moodle</i>)	0.3	0.5
Resolución de cuestionarios y tests de evaluación a través del Campus Virtual (<i>Moodle</i>)	0.1	0.3