

SÚMULA DA DISCIPLINA

1. Identificação

Nome disciplina: QUP 142 – Termodinâmica Estatística Avançada

Professor responsável: Hubert Stassen

Nível: Mestrado e Doutorado

Carga horária: 45

Créditos: 3

Revisado e atualizado em: Junho_2020

2. Ementa

Mecânica Estatística de Sistemas Reais, Flutuações, Dependência Temporal

3. Objetivo

Introduzir os Conceitos Físico-Químicos de Sistemas Reais e sua Dependência Temporal em Nível Microscópico

4. Conteúdo Programático

1. Mecânica Clássica: Condições Iniciais, Equações de Movimento, Equação de Liouville, Espaço de Fase
2. Revisão da Termodinâmica-Estatística de Sistemas Ideais: Ensembles Microcanônico e Canônico, Funções Termodinâmicas, Gases, Cristais
3. Líquidos e Soluções: Funções de Distribuição
4. Médias Dinâmicas: Função de Correlação Temporal, Flutuações Térmicas
5. Teorema Wiener-Khintchine: Densidade Espectral, Transformação de Fourier
6. Variáveis Dinâmicas: Densidade, Corrente, Função de Correlação de Van Hove, Vetor de Onda, Espaço Recíproco, Fator de Estrutura Dinâmico
7. Difração: Princípios Experimentais
8. Espectroscopia: Alargamento de Bandas, Momentos Espectrais
9. Fenômenos de Transporte: Exemplo Auto-Difusão, Relações de Green-Kubo
10. Equação de Langevin: Teorema de Flutuação-Dissipação, Movimento Browniano
11. Teoria de Resposta Linear: Susceptibilidade, Relaxação Dielétrica

5. Avaliação

Trabalhos e Listas de Exercícios

6. Método de Trabalho/Ensino

Estudo dirigido utilizando literatura (fornecido por mim) e polígrafo próprio

7. Bibliografia

1. H. Goldstein, Classical Mechanics, 2. Ed., Addison-Wesley, 1980.
2. D.A. McQuarrie e J.T. Simon, Physical Chemistry: A Molecular Approach, University Science Books, 1997.



Universidade Federal do Rio Grande do Sul
Instituto de Química
Programa de Pós-Graduação em Química (Conceito 7/CAPES)
Av. Bento Gonçalves, 9500 – Bairro Agronomia
Porto Alegre – RS – 91501970
☎(51) 3308 6258 – Fax (51) 3308 7198
<http://www.iq.ufrgs/ppgq> - e-mail: ppgq_iq@ufrgs.br

3. D.A. McQuarrie, Statistical Mechanics, Harper & Row, 1976.
4. C.G. Gray e K.E. Gubbins, Theory of Molecular Fluids, Vol. 1: Fundamentals, Clarendon Press, 1984.
5. U. Balucani e M. Zoppi, Dynamics of the Liquid State, Oxford University Press, 1994.
6. N.H. March e M.P. Tosi, Atomic Dynamics of Liquids, Macmillan Press, 1976.
7. P.A. Egelstaff, An Introduction to the Liquid State, 2. Ed., Clarendon Press, 1994.
8. R.G. Gordon, Adv. Magn. Resonance 3 (1968), 1 e referências citadas.
9. Polígrafo próprio (parcialmente pronto e a ser editado)