MECÁNICA ESTADÍSTICA DE LOS MATERIALES

8 CREDITOS

OBJETIVOS

El objetivo del curso es ofrecer a los alumnos, que ya cuentan con una buena base de termodinámica clásica de sistemas en equilibrio, la oportunidad de profundizar sus conocimientos tomando en cuenta el carácter microscópico de la materia. Especial cuidado se da a una presentación del formalismo de la termodinámica considerando las ideas originales de Gibbs de ensembles y con base en el esquema postulatorio de Tisza. Igualmente, se ha considerado el objetivo de comprender aquellos temas que la termodinámica clásica no logra explicar de manera completa. Asimismo, se busca aplicar las herramientas de sistemas constituidos por partículas microscópicas a sistemas de relevancia a las ciencias de materiales, por encima de aquellas otras aplicaciones de las ciencias físicas básicas. Es recomendable que el alumno cuente con los conocimientos del curso de Termodinámica de los Materiales.

1. Formulación axiomática de la termodinámica de Tisza
(Callen Cap. 12, Plischke & Bergersen Cap. 1; Chaikin & Lubensky Cap. 3) (12 horas)
   1.1. Descripción de sistemas termodinámicos en términos de variables extensivas
   1.2. La importancia de estados microscópicos en la descripción de los estados de equilibrio termodinámico
   1.3. Los postulados de Tisza para la termodinámica clásica
   1.4. La equivalencia de principios extremales para la entropía y la energía
   1.5. Las variables extensivas, la ecuación de Euler y la relación Gibbs-Duhem
   1.6. Las trasformaciones de Legendre, los potenciales termodinámicos y las funciones de trabajo máximo.
   1.7. Las relaciones de Maxwell, funciones de respuesta y los diagramas mnónicos de Born
   1.8. Criterios de estabilidad termodinámica, reglas de coexistencia de fases y de Gibbs
   1.9. Puntos críticos, parámetros de orden, modelo de Landau, exponentes universales

2. Fundamentos de Mecánica Estadística (24 horas)
   2.1 El ensemble microcanónico
   (Callen Cap. 15, Plischke & Bergersen Cap. 2)
      2.1.1. Los posibles estados de un sistema termodinámico cerrado
      2.1.2. Conocimiento y probabilidad

2.1.3. Distribuciones de probabilidad, valores promedio y sus momentos
2.1.4. Los postulados para la termoestadística de Tisza
2.1.5. Estadística de grandes números y sistemas multidimensionales
2.1.6. La entropía como función de los estados accesibles a un sistema cerrado
2.1.7. El modelo de un sólido cristalino de Einstein y su capacidad calorífica a bajas temperaturas
2.1.8. Un sistema clásico de dos estados y sin interacción. El caso de polarización magnética
2.1.9. Los elastómeros y el modelo de Kuhn

2.2. El ensemble canónico: sistemas a temperatura constante.
(Callen Cap. 16; Plischke & Bergersen Cap. 1)
2.2.1. La distribución canónica y la función canónica de partición de un gas simple
2.2.2. La aditividad de las energías y la factorización de la función de partición
2.2.3. Termoestadística de pequeños ensembles, la densidad de estados orbitales
2.2.4. Modelo para un sólido cristalino de Debye
2.2.5. Radiación de cuerpo negro y ley de Stefan-Boltzmann
2.2.6. La densidad clásica de estados y gas ideal clásico

2.3. Entropía y desorden. Formulaciones canónicas generales y sistemas cuantizados
(Callen Cap. 17, 18; Plischke & Bergersen Cap. 2)
2.3.1. Distribuciones de máximo desorden
2.3.2. Sistemas abiertos: El ensemble gran canónico
2.3.3. Fermiones y bosones. Estadística cuántica y matriz de densidad
2.3.4. Estadística de fermiones sin interacción
2.3.5. Estadística de bosones sin interacción
2.3.6. Distribuciones de máxima entropía en sistemas fermiónicos
2.3.7. Estadística de defectos en un sólido de Schottky
2.3.8. Fluidos fermiónicos: Proto-gas –con spin– y gas ideal de Fermi
2.3.9. Energías de Fermi y capacidad calorífica de fermiones a bajas temperaturas
2.3.10. Criterio cuántico y límite clásico
2.3.11. Régimen cuántico fuerte: el caso de gases de electrones en metales
2.3.12. Fluido ideal de Bose y radiación de cuerpo negro
2.3.13. Condensación de Bose, energía y capacidad calorífica

2.4. Fluctuaciones y teoría de campo promedio
(Callen Cap. 19, 20; Plischke & Bergersen Cap. 3)
2.4.1. Funciones de distribución para fluctuaciones
2.4.2. Los momentos y funciones de correlación de las fluctuaciones de energía
2.4.3. Teoría de campo promedio, propiedades variacionales y métodos perturbativos

3. Aplicaciones de mecánica estadística a los materiales

(Callen Cap. 19, 20; Plischke & Bergersen Cap. 3, 4; Domb Caps. 1-4; Chaikin & Lubensky Cap. 4) (28 horas)

3.1. Campo promedio y teoría de Landau de transiciones críticas
3.2. Modelo general de Ising. Modelos uni- y bidimensionales
    3.2.1. Soluciones exactas para cadenas y redes 2D
3.3. Redes cristalinas de sistemas magnéticos
3.4. Aproximaciones de Braggs-Williams y de Bethe
3.5. Transiciones de orden-desorden
    3.5.1. En sistemas metálicos binarios
    3.5.2. En cristales líquidos: transición isotrópica-nemática
3.6. Modelo de campo promedio para un gas de Van der Waals
    3.6.1. Propiedades del punto crítico clásicas

BIBLIOGRAFÍA

1. Callen H. B., *Thermodynamics*, Wiley, New York, 1985.
2. Plischke M. & Bergersen B., *Equilibrium Statistical Physics*, 3ra. Edición, World Scientific Publ. Co., Singapore, Singapore (2006).
3. Chaikin P.M. & Lubensky T. C., *Principles of Condensed Matter Physics*, Cambridge Univ. Press, Cambridge, UK .2000.
4. Domb C., *The Critical Point*, Taylor & Francis, London, UK, 1996.

BIBLIOGRAFÍA COMPLEMEMENTARIA

1. Carrington G., *Basic Thermodynamics*; Oxford University Press, Oxford (1994)
2. Pahtria,R. K. *Statistical Mechanics* 2a. Edición, Butterworth-Heinemann, Oxford, (1996).
3. Hoffmann L. H. & Schreiber M., Eds., *Computational Statistical Physics*, Springer Verlag, Berlin, Ger., 2002.
4. Bowley R. and Sánchez M., *Introductory Statistical Mechanics*, Clarendon Press, Oxford, 1999.
5. Reed R. D. and Roy R. R., *Statistical Physics for Students of Science and Engineering* Dover, New York, 1995.