

## Teoría de Líquidos Simples

---

Número de créditos: 10

Horas a la semana: 10

Teoría: 6

Practica: 4

Requisitos: AFB-1, AFB-2, AFB-3, AFB-4, AFB-5

Clave: **AFE-18**

Asignatura: Especifica

**Descripción de la asignatura.** Las propiedades estáticas y dinámicas de los fluidos simples. Describe muchas herramientas teóricas de gran utilidad en el área de líquidos simple que también se utilizan en fluidos complejos. Esta materia permitirá al candidato comprender mucha de la literatura correspondiente y utilizar muchos de sus conceptos en su investigación de sistemas coloidales. Esta materia está ligada con la Orientación Arresto dinámico en la materia Blanda Condensada.

### Contenidos:

- Mecánica Estadística.
- Propiedades Estáticas de Líquidos.
- Teorías de Funciones de Distribución.
- Teoría de Perturbación.
- Fluidos Inhomogéneos.
- Correlaciones Dependientes de tiempo y Funciones de Respuesta.

### Índice Temático:

1. Mecánica Estadística. Evolución temporal y ecuaciones cinéticas. Promedios en el tiempo y de ensamble. Ensamblés Canónico e Isotérmico-Canónico. El ensamble Gran Canónico. Densidades de Partículas y

- Funciones de Distribución. Densidades de Partículas y el ensamble Gran Canónico. Simulación por computadora: Dinámica Molecular y Monte Carlo.
2. Propiedades Estáticas de Líquidos. Fluido en un campo externo.  
Funcionales y diferenciación Funcional. Derivadas Funcionales del Gran potencial. Teoría de Funcionales de la Densidad. Funciones de correlación Directa. Función de respuesta de la densidad. Métodos Diagramáticas. Expansiones Diagramáticas.
  3. Teorías de Funciones de Distribución. El Factor Estático de Estructura. La jerarquía YBG y la ecuación de Born-Green. Expansiones Funcionales y Ecuaciones Integrales. La Ecuación de Percus-Yevick. La Aproximación Esférica Promedio. Expansiones Diagramáticas Extensiones de Ecuaciones Integrales.
  4. Teoría de Perturbación. El Modelo van der Waals. La Expansión Lambda.  
Sistemas de Referencia de Núcleo Suave. Fluido de Lennard-Jones. Fuerzas Atractivas.
  5. Fluidos Inhomogéneos. Líquidos en Interfaces. Funcionales Aproximadas de Energía Libre. La Interface Líquido-Vapor. Teoría Fundamental de la Medida. Fluidos Confinados.
  6. Correlaciones Dependientes de tiempo y Funciones de Respuesta.  
Propiedades Generales de las Funciones de Correlación en el tiempo. Función de Auto correlación en Velocidad y Auto difusión. Movimiento Browniano y Ecuación Generalizada de Langevin. Correlaciones en el espacio y en el tiempo. Dispersión Inelástica de Neutrones. Teoría de Respuesta Lineal.

### **Bibliografía Básica:**

- Jean Pierre Hansen and I. R. MacDonald, Theory of Simple Liquids, 3rd. Edition. Academic Press, 2006.

## **Bibliografía Complementaria:**

- D. A. McQuarrie. Statistical Mechanics, University Science Books. 2000.
- David Chandler, Introduction to Modern Statistical Mechanics, 1st. edition, Oxford University Press, 1987.
- M. P. Allen, Computer Simulation of Liquids, Oxford University Press. 1989.