

INDICE

	Página
A los Lectores	iii
Prefacio	1
CAPITULO 1. INTRODUCCION	3
1. El Estado Líquido	3
2. Clases de Líquidos	6
3. Fuerzas Intermoleculares	6
4. Métodos Experimentales	10
5. Experimentos con Computadoras	11
a. El Método de Monte Carlo (MC)	12
b. El Método de la Dinámica Molecular (DM)	13
Bibliografía	15
CAPITULO 2. CONCEPTOS BASICOS Y ECUACIONES FUNDAMENTALES ...	17
1. Fórmulas de la Termodinámica	17
2. Fórmulas de la Mecánica Estadística	19
a. Relaciones Básicas en el Marco del Conjunto Canónico	19
b. Relaciones Básicas en el Marco del Conjunto Gran Canónico	22
3. Fluctuaciones	23
4. Funciones de Distribución y Relaciones Termodinámicas	26
a. Formalismo Canónico	26
b. Formalismo Gran Canónico	31
5. Las Funciones Directa y Total de Correlación. La Ecuación de Ornstein-Zernike	33
a. La Función de Correlación Total	35
b. La Función de Correlación Directa. La Ecuación de Ornstein-Zernike	36
6. Funciones de Distribución y el Factor de Estructura .	37
a. La Densidad Numérica. La Función de Correlación Total	38
b. El Factor de Estructura	38
c. Medida Experimental del Factor de Estructura	40
d. Correlaciones en la Vecindad del Punto Crítico ...	42
7. Las Funciones Termodinámicas de un Gas de Esferas Rígidas	47
8. Diagramas. Gráficos. Clasificación	48
a. Definiciones Básicas	48
Bibliografía	51

v

CAPITULO 3. LA FUNCION DE PARTICION. LA ECUACION DE ESTADO ..	53
1. La Teoría Exacta de Mayer	53
a. El Conjunto Canónico	55
b. El Conjunto Gran Canónico	58
c. Los Diagramas Irreducibles de Mayer. La Ecuación Virial	58
2. La Ecuación de van der Waals	59
3. Cálculo de Coeficientes Viriales	62
a. El Potencial de Esferas Rígidas	63
b. El Potencial de Pozo Cuadrado	67
c. El Potencial de Lennard-Jones, Otros Potenciales Realistas	68
Bibliografía	77
CAPITULO 4. ECUACIONES INTEGRALES. TEORIAS APROXIMADAS	79
1. La Teoría de Born-Green-Yvon. La Aproximación de Kirkwood	79
2. La Aproximación Hipercadena (HNC)	84
3. La Aproximación de Percus-Yevick (P-Y)	85
a. La Solución de Werthelm y Thiele para un Gas de Esferas Rígidas	85
4. La Aproximación Esférica Media (MSA)	87
a. Gas de Esferas Rígidas con Dipolos Centrales	88
Bibliografía	91
CAPITULO 5. REPRESENTACION DIAGRAMATICA. TEORIAS APROXIMADAS	93
1. Diagramas: Cadenas, Manojos y Elementales	93
2. Desarrollo en Serie de Potencias de la Densidad de las Funciones de Distribución	94
a. La Función de Correlación Total $h(r_{12})$	95
b. La Función de Correlación Directa $c(r_{12})$	97
c. El Potencial de la Fuerza Media $w(r_{12})$	97
3. Una Ecuación Exacta para la Función de Correlación Directa $c(r_{12})$	99
4. Ecuaciones Aproximadas para la Función de Correlación Directa	99
a. La Aproximación Hipercadena (HNC)	99
b. La Aproximación de Percus-Yevick (P-Y)	100
c. La Aproximación de Born-Green-Yvon (B-G-Y)	101
5. Comparación entre la Teoría Exacta y las Aproximaciones Estudiadas	103
a. La Función de Distribución Radial $g(r_{12})$	103
b. Los Coeficientes Viriales para un Gas de Esferas Rígidas	106
Bibliografía	107

	Página
CAPITULO 6. TEORIA DE PERTURBACIONES	109
1. La Ecuación de van der Waals	109
2. El Método de las Perturbaciones. La Expresión para la Energía Libre de Helmholtz	111
3. El Método de Barker y Henderson	114
4. Aplicación a un Modelo Simple de Líquidos Polares ...	117
Bibliografía	120
CAPITULO 7. COMPARACION DE LAS TEORIAS DE FLUIDOS DENSOS Y LOS EXPERIMENTOS	121
1. Fluido de Esferas Rígidas	121
2. Fluidos Reales	126
Bibliografía	132
APENDICE 1. COORDENADAS BIPOLARES	133
APENDICE 2. DIAGRAMAS ANILLO	137
BIBLIOGRAFIA.....	139
Libros Consultados	139
Publicaciones en General	140