

97
1985

UNIVERSIDAD DE BUENOS AIRES
Facultad de Ciencias Exactas y Naturales

DEPARTAMENTO: Química Inorgánica, Analítica y Química Física

ASIGNATURA: **Química Física III**

CARRERA: Doctorado - Post-Grado

ORIENTACION: Química Física

CARACTER: Optativo

PLAN:

DURACION DE LA MATERIA: Cuatrimestral

HORAS DE CLASE: a) Teóricas 4hs.

b) Problemas: -hs.

c) Laboratorio 6hs.

d) Totales: 10hs.

ASIGNATURAS CORRELATIVAS: Química Física II

PROGRAMA

1.- Los principios de la Termodinámica Química

Los principios y sus funciones (temperatura empírica, Trabajo, energía y calor; entalpía, Entropía y temperatura termodinámica; potencial químico y afinidad; potenciales termodinámicos). La ecuación fundamental de Gibbs; parámetros extensivos e intensivos ecuaciones de estado; ecuación de Gibbs-Duhem. Transformaciones de Legendre; funciones homogéneas de Euler. Funciones de Massieu-Planck. Sistemas abiertos. Componentes y especies. Propiedades parciales molares. Teorema de calor de Nernst.

2.- Equilibrio

Equilibrio y estado estacionario. Criterios generales de equilibrio. Distintos tipos de equilibrio (térmico, mecánico, material, químico, de membrana u ósmico, electroquímico). Equilibrio en sistemas continuos. Condiciones de estabilidad, metaestabilidad. Estabilidad y fenómenos críticos; límites de estabilidad y fases críticas.

3.- Equilibrio de Fases

Regla de las fases. Sistemas de varios componentes; condiciones de Clausura teorema de Duhem. Estados indiferentes. Estados críticos. Ecuaciones de coexistencia de fases en sistemas de un y varios componentes; teorema de Gibbs-Konovalow. Sistemas "Azeotrópicos" de Duhem. Teoremas de moderación. Diagramas de fases. Transformaciones de segundo y ordenes superiores; ecuaciones de Ehrenfest. Teoría de Tiazza para transformaciones de orden superior. Ley de estados correspondientes para sistemas monofásicos y bifásicos.

4.- Fases no gaseas

Termodinámica de fases de varios componentes. Mezclas gaseosas; fugacidad; ecuaciones de estado; segundo y tercer coeficiente del virial, funciones de potencial. Mezclas líquidas; actividad, funciones exceso, efecto de temperatura y presión; modelos para mezclas, inmiscibilidad parcial y separación de fases. Soluciones; soluciones de polímeros. Solubilidad de gases en líquidos y sólidos. Efecto de alta presión; equilibrios líquido-líquido y gas-gas.


E.O. TIMMERMAN

Aprobado por Resolución DW1653/85

5.- Estado sólido

Ecuaciones térmicas de estado. Ley de Hooke; coeficientes de elasticidad. Propiedades de simetría de sólidos. Defectos reticulares, defectos termodinámicos inherentes. Fenómenos de orden-desorden. Estructuras de espines normal e inversa. Compuestos con redes incompletas.

6.- No-estequiometría

No-estequiometría; aspectos termodinámicos y estructurales. Incorporaciones en exceso o déficit estequiométrico. Termodinámica de fases no estequiométricas. Intervalos de composición. Pilas de estado sólido. Parámetros termodinámicos de compuestos estequiométricos y no-estequiométricos. Aleaciones y compuestos intermetálicos. Cristales mixtos ideales y no-ideales. Diagramas de fases. Teoría de Lewis para el enlace metálico.

7.- No-equilibrio

Caracterización termodinámica de estados de no-equilibrio. Procesos irreversibles; flujo y producción de entropía. Función de disipación. Ecuaciones fenomenológicas; relaciones de reciprocidad de Onsager. Transformaciones de flujos y fuerzas.

8.- Procesos en sistemas; a) homogéneos y b) discontinuos

a) Procesos en sistemas homogéneos. Reacción química y afinidad. Ley general de acción de masa. Procesos de relajación. Acoplamiento entre reacciones químicas.

b) Procesos en sistemas discontinuos. Balance de masa, energía y entropía; función de disipación. Ecuaciones fenomenológicas. Efectos electro-cinéticos. Relaciones de Sazén. Efectos termomecánicos, permeación y termosmosis. Fenómenos isotérmicos en membranas; permeación y osmosis, hiperfiltración, osmosis inversa. Efecto de la carga eléctrica; potencial de membranas; fenómenos Donnan. Modelos para el transporte a través de membranas.

BIBLIOGRAFIA

- 1.- "Chemical Thermodynamics"- I. Prigogine and F. Defay, Longman, (1954)
- 2.- "Thermodynamik der Mischphasen"- R. Haase, Springer (1956)
- 3.- "Thermodynamics"- H. B. Callen, Wiley (1960)
- 4.- "Classical Thermodynamics"- A. Münster, Wiley - Interscience (1970)
- 5.- "Chemical Thermodynamics"- M. L. McGlashan, Academic Press (1979)
- 6.- "Molecular Thermodynamics of Fluid-phase Equilibria"- J. M. Prausnitz, Prentice-Hall (1969)
- 7.- "Thermodynamics", Volumen I de "Physical Chemistry, an advanced treatise", Ed. H. E.yring, D. Henderson, W. Jost, Academic Press (1971)
- 8.- "Electronic Processes in Ionic Crystals"- N. F. Mott y E. W. Gurney, Oxford (1940)
- 9.- "Ionic crystals, Lattice defects and Nonstoichiometry"- N. Greenwood, Butterworth (1968)
- 10.- "Solid state chemistry"- N. V. Hannay, Prentice-Hall (1967)
- 11.- "The Chemistry of imperfect crystals"- Vol. 1, 2, 3, V. A. Kroeger, North-Holland (1974)
- 12.- "Introduction to Thermodynamics of Irreversible Processes" I. Prigogine, Interscience (1955)
- 13.- "Termodinámica de los procesos irreversibles"- S. R. de Groot, ed. Alhambra

- (1968) (North-Holland, 1952).
- 14.-"Nonequilibrium thermodynamics"-D.D.Pitts (1962)- McGraw-Hill
 - 15.-"The thermodynamics of the steady state"-K.G.Denbigh, Matbuen, (1961)
 - 16.-"Non-equilibrium thermodynamics"-S.R.de Groot and P.Mazur Elsevier (1962)
 - 17.-"Thermodynamics of irreversible processes"-R.Haase, Academic Press (1969)
 - 18.-"Nonequilibrium thermodynamics in biophysics"-A.Katchalsky and P.Curran Harvard Univ. Press (1955)

Fecha: febrero 1985

[Handwritten signature]
Firma del Profesor:

Firma Director:

[Handwritten signature]
Dr. ROBERTO J. FERNANDEZ PRINI
Director Interino
Dto. Qc'a. Inorg. Anal. y Qc'a. Fís.

[Handwritten signature]
Aclaración firma:

Aclaración firma: