



DEPARTAMENTO: Químico Inorgánico, Analítico y Químico Físico

ASIGNATURA: Químico Físico (IV)

CARRERA: Doctorado - Post-grado

ORIENTACION: Qca. Física

CARACTER: Optativo

PLAN: 1960

DURACION DE LA MATERIA: Cuatrimestral

HORAS DE CLASE:
(semanales)

ASIGNATURA CORRELATIVA: Lic. en Ciencias Químicas

PROGRAMA.

A.- Fenómenos de Transporte en Sistemas Electrolíticos, en solución y en estado fundido.

Descripción fenomenológica microscópica.

Ecuaciones de balance de masa, energía, momento y entropía. Función de disipación para sistemas en solución y en estado fundido. Conductividad, números de transporte, conductividades iónicas, interdifusión, intradifusión y autodifusión. Sistemas simples y sistemas multicomponentes. Aplicabilidad de la ley de Nernst-Linstedt y de otras leyes ideales; interpretación en función de la teoría termodinámica fenomenológica. Termodifusión, difusión por presión, centrifugación, conducción térmica. Procesos de electrodos controlados por transporte; influencia del electrolito soporte y de no electrolitos.

Descripción e interpretación microscópica.

Mecánica estadística de no-equilibrio. Teorema de fluctuación-disipación. Teoría de respuesta lineal. Funciones de correlación de velocidades. Aplicación a electrolitos en solución y en estado fundido. Distintos modelos; aplicación y discusión de resultados experimentales en los distintos casos.

B.- Aplicaciones de Mecánica Estadística al estudio de Fluidos

La mecánica estadística de soluciones. Tratamiento de McMillan-Mayer. Estado tipo Henry y su interpretación mecánico-estadística. Funciones densidad y funciones de correlación. Fluidos puros, fluidos multicomponentes, ecuación de compresibilidad. Ornstein-Zernike.

Tratamiento Kirkwood-Suff de sistemas multicomponentes. Potencial de fuerza media y función de correlación. Potenciales intermoleculares: esfericalización.

Resolución de la ecuación integral diferencial de Ornstein-Zernike. Condiciones de clausura: Percus-Yevick, aproximación esférica media, cadenas hiperreticulares (HNC). Ecuaciones obtenidas para función de correlación y ecuación de estado en la aproximación de Percus-Yevick. Solución de Carnahan-Starling. Mezclas.

Métodos perturbacionales. Generalidades. Método Barker-Henderson. Método GCM. Métodos aproximados de Verlet y de Levesque. Fluidos dipolares. Método de Wertheim. Fluidos iónicos. Método de

Mayer de virial. Aproximación esférica media y comparación en densidad hiperreticulada, Asociación iónica. Soluciones concentradas



BIBLIOGRAFIA

Parte A.

- 1.- R.House - Irreversible thermodynamics - Academic Press (1969).
- 2.- T.Erdy-Coruz - Transport Phenomena in aqueous solutions - A.Hilger (1974).
- 3.- R.A.Robinson y R.H.Stokes - Electrolyte Solutions - Butterworth (1959)
- 4.- H.S.Harmed y B.B.Owen - The Physical Chemistry of Electrolyte Solutions - Reinhold (1959).
- 5.- V.Levich - Physicochemical Hydrodynamics - Prentice-Hall (1962).
- 6.- B.E.Conway - Theory and Principles of Electrode Processes - Ronald Press (1965).
- 7.- K.J.Vetter - Electrochemical Kinetics - Academic Press (1967).
- 8.- O.Kprtm - Treatise of Electrochemistry - Elsevier (1965).
- 9.- H.J.M.Henley, Ed. - Transport Phenomena in Fluids - M.Dekker (1969)
- 10.- R.Bolescu - Equilibrium and Non-Equilibrium Statistical Mechanics - J.Wiley (1975).
- 11.- P.Résibois and M. de Leener - Classical Kinetics Theory of Fluids - J.Wiley (1977).
- 12.- H.G.Hertz - Diffusion and Conductance in Ionic Liquids - Z.Phys. Chem. Suppl. H1 (1982).

Parte B.

- 1.- D.Henderson y J.Borker - What's a Liquid - Phys.Review, A4 806 (1971).
- 2.- T.Boublik, I.Nazbada y K. - Statistical Thermodynamics of Simple Liquids and their Mixtures - Elsevier (1980).
- 3.- K.Gáblins y T.Reed - Applied Statistical Mechanics - Mc.Graw(1973)
- 4.- D.Henderson, J.Borojas y L.Blum - Rev.Mex.de Física 30 139z(1984).

Fecha: Julio 1985.

Firma Profesor:

Aclaración firma:

Firma Director:

Aclaración firma:

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