UNIVERSIDAD DE BUENOS AIRES

FACULTAD DE CIENCIAS EXACTAS Y NATURALES

FACULTAD DE CIENCIAS EXACTAS Y NATURALES FOLIO 40

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-Einstein y de otras leyes ideales; interpretación en función de la teoría termodinámi a-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 respuesto 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 MacMillan-Mayer. Estado tipo Henry y su interpretación mecánico-estadística. Funciones densidad y fun ciones de correlación. Fluídos puros, fluidos multicomponentes, ecuación de compresibilidad. Ornstein-Zernike.
Tratamiento Kirkwood-Buff de sistemas multicomponentes.
Potencial de fuerza media y función de correlación.
Potenciales intermoleculares. Esfericalización.

Resolución de la ecuación integro diferencial de Ornstein-Zernike Condiciones de clausura: Percus-Yevick, aproximación esférica media, cadenas hiperreticulares (HRC). 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 WCA. Métodos aproximados de Veslet y de Levesque.
Fluidos dipolares. Método de Werthein. Fluidos iónicos. Método de

./.

Aprobado por Resolución CD 326/86

Mayer de virial. Aproximación esférica media y comparación en [illegible] dena hiperreticulada, Asociación iónica. Soluciones concentr[illegible]

FACULTAD DE CIENCIAS EXACTAS Y [illegible]
FOLIO
41

BIBLIOGRAFIA

Parte A.

1.- R.Haase - Irreversible thermodynamics - Academic Press (1969).

2.- T.Erdy-Gruz - 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 Electrod Process - Ronald Press (1965).

7.- K.J.Vetter - Electrochemical Kinetics - Academic Press (1967).

8.- O.Kprtüm - Treatise of Electrochemistry - Elsevier (1965).

9.- H.J.M.Henley, Ed. - Transport Phenomena in Fluids - M.Dekker (1969)

10.- R.Balescu - 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.Barker - What's a Liquid - Phys.Review, A4 806 (1971).

2.- T.Boublik, I.Nazbeda y K. - Statistical Thermodynamics of Simple Liquids and their Mixtures - Elsevier (1980).

3.- K.Gäblins y T.Reed - Applied Statistical Mechanics - Mc.Graw(1973)

4.- D.Henderson, J.Barojas y L.Blum - Rev.Mex.de Física 30 139z(1984).

Fecha: Julio 1985.-

Firma Profesor:

Aclación firma:

Firma Director:

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