

DEPARTAMENTO: Química Inorgánica, Analítica y Química Física

ASIGNATURA: Química Física (IV)

CARRERA: Licenciatura en Ciencias Químicas

ORIENTACION: Química Física

PLAN: 1960

CARACTER: Optativo

DURACION DE LA MATERIA: Cuatrimestral

HORAS DE CLASE: a) Teóricas                      hs.    b) Problemas                      hs.  
(Semanales)                      b) Laboratorio                      has.    d) Seminarios                      hs.    e) Totales                      hs.

ASIGNATURAS CORRELATIVAS: Química Física II - T.P. Termodinámica Estadística

PROGRAMAA - 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. Sistemas simples y sistemas multicomponentes. Aplicabilidad de la ley de Nernst-Einstein 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 Fluido

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

Tratamiento Kirkwood-Buff de sistemas multicomponentes.

Potencial de fuerza medio y función de correlación.

Potenciales intermoleculares. Esfericalización.

Resolución de la ecuación integro diferencial de Ornstein-Zernike.

Condiciones de clausura: Percus-Yevick, aproximación esférica media, cadena 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 WCA. 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 cadena hiperreticulada. Asociación iónica. Soluciones concentradas.

## BIBLIOGRAFIA

### PARTE A.

- 1.- R.Haase - Irreversible thermodynamics - Academic Press (1969).
- 2.- T.Erdy-Geruz - Transport Phenomena in aqueous solutions - A.Hilger (1974).
- 3.- R.A.Robinson y R.H.Stokes - Electrolyte Solutions - Butterworth (1959).
- 4.- H.S.Horned 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.Kortüm - Treatise of Electrochemistry - Elsevier (1965).
- 9.- H.J.M.Hanley, 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.Baker - 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.Gubins 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: MAYO 1986.

firma Profesor:

Firma Director:

aclaración firma:

*Dr. E.O.Timmermann*

Dr. ROBERTO J. FERNANDEZ PRINI  
aclaración firma: Director Interino  
Dto. Q'ca. Inorg. Anal. y Q'ca. Fis