

<b>UNIVERSIDAD NACIONAL DEL SUR</b>				1 4	
BAHIA BLANCA		ARGENTINA			
DEPARTAMENTO DE: QUIMICA					
<b>PROGRAMA DE: FISICOQUIMICA D</b>				CODIGO: 6102	
				AREA NRO: IV	
H O R A S D E C L A S E				P R O F E S O R R E S P O N S A B L E	
T E O R I C A S		P R A C T I C A S		Dr. Pablo C. Schulz Dr. Rubén Montani	
Por semana	Por cuatrimestre	Por semana	Por cuatrimestre		
4	60	4	60		
A S I G N A T U R A S C O R R E L A T I V A S P R E C E D E N T E S					
A P R O B A D A S			C U R S A D A S		
Fisicoquímica C					
<b>DESCRIPCION</b>					
<p>La asignatura consta de dos módulos: Fuerzas Intermoleculares y Termodinámica Estadística. El módulo de Fuerzas intermoleculares, se destina a analizar los diversos tipos de fuerzas físicas entre moléculas, entre moléculas y cuerpos, y entre cuerpos. El módulo de mecánica estadística y simulación computacional, se destina a establecer y fundamentar desde los puntos de vista físico y matemático los conocimientos de termodinámica estadística.</p> <p><b>Objetivo:</b> Se trata de una materia fundamental en la cual se vinculan <u>necesariamente</u> los conceptos “macroscópicos” introducidos en las materias Fisicoquímica A y Fisicoquímica B con los conceptos microscópicos (formas atómicas y moleculares de la energía) introducidos en la materia Fisicoquímica C.</p>					
<b>PROGRAMA SINTETICO</b>					
<b>Módulo de Fuerzas intermoleculares</b>					
Energía cohesiva en un gas. Fuerzas intermoleculares. Fuerzas de van der Waals. Fuerzas entre partículas y superficies. Interacciones entre partículas. La aproximación de Derjaguin. La teoría de Lifshitz. La constante de Hamaker. Fuerzas electrostáticas entre superficies en líquidos. Teoría de Gouy- Chapman. La ecuación de Grahame. Estabilidad coloidal: teoría DLVO. Regla de Schulze – Hardy. Fuerzas no DLVO. Fuerzas de solvatación y de hidratación. Fuerzas estéricas debido a polímeros en las superficies.					
<b>Módulo de mecánica estadística y simulación computacional</b>					
Mecánica estadística, ensambles y termodinámica. Relaciones para subsistemas independientes distinguibles e indistinguibles. Gas monoatómico ideal. Gas ideal diatómico ideal. Cristales monoatómicos. Mecánica estadística clásica. Equilibrio Químico en una mezcla de gases ideales. Gases imperfectos. Fluidos clásicos. Simulación Molecular por computadora					
VIGENCIA AÑOS					

UNIVERSIDAD NACIONAL DEL SUR						2 4	
BAHIA BLANCA			ARGENTINA				
DEPARTAMENTO DE: QUIMICA							
PROGRAMA DE: FISICOQUIMICA D					CODIGO: 6102		
					AREA NRO: IV		
<b>PROGRAMA ANALITICO</b>							
<b><u>I. MÓDULO DE FUERZAS INTERMOLECULARES</u></b>							
<p><b>I.1. Introducción.</b> Energía cohesiva en un gas. Interacciones gravitacionales. La distribución de Boltzmann. La ley de distribución barométrica. <math>kT</math> como “medida” de la fuerza de interacción. Clasificación de fuerzas.</p>							
<p><b>I.2. Fuerzas intermoleculares.</b> Fuerzas intermoleculares fuertes. Interacciones covalente y culómbica. Fuerzas de enlace covalente o químico. Interacciones entre cargas (interacciones culómbicas). La energía de Born de un ión. Solubilidad de iones en diferentes solventes. Interacciones involucrando moléculas polares. Autoenergía (o energía propia) de dipolo. Interacciones ion – dipolo. Iones hidratados. Interacciones dipolo-dipolo. Dipolos giratorios. Interacciones que involucran la polarización de las moléculas. Polarización de moléculas y átomos. Moléculas polares. Interacciones entre iones y moléculas sin carga eléctrica. <math>w(r)</math> para interacción ion- dipolo inducido. Interacciones dipolo - dipolo inducido. Unificación de interacciones de polarización. Efectos del solvente y “polarizabilidades en exceso”. Fuerzas de van der Waals. Fuerzas de London. Fuerzas de van der Waals entre moléculas polares. Teoría general de Fuerzas de van der Waals entre moléculas. Ecuación de McLachlan. Efecto del medio.</p>							
<p><b>I.3. Fuerzas entre partículas y superficies.</b> Contraste entre fuerzas intermoleculares, interpartículas e intersuperficies. Efectos de corto y largo alcance de una fuerza. Fuerzas de corto y largo alcance. Interacciones gravitacionales. Interacciones intermoleculares. <b>Interacciones entre partículas.</b> Potenciales de interacción entre cuerpos macroscópicos. Interacción molécula – superficie. Interacción esfera – superficie. Interacción esfera – esfera. Interacciones superficie – superficie. Resumen de fuerzas entre partículas. Interacciones entre cuerpos grandes comparados con las que hay entre moléculas. Efecto de la geometría sobre las fuerzas. La aproximación de Derjaguin. Mediciones experimentales de fuerzas intermoleculares y superficiales. Fuerzas de van der Waals entre superficies. La constante de Hamaker. La teoría de Lifshitz de fuerzas de van der Waals. Cálculo de la constante de Hamaker con la teoría de Lifshitz. Aplicaciones de la teoría del Lifshitz a interacciones en un medio. Efectos de retardación. Relaciones de combinación. <b>Fuerzas electrostáticas entre superficies en líquidos.</b> Distribución iónica Perfil de concentración de los contraiones. La presión entre dos superficies cargadas en agua. Limitaciones de la ecuación de Poisson – Boltzmann. Superficies cargadas en soluciones de electrolitos. Distribución de potenciales en una interfase plana aislada cuando hay electrolito adicionado. Teoría de Gouy- Chapman. La ecuación de Grahame. Implicaciones de la ecuación de Grahame. Efecto de sales divalentes. Interacciones electrostáticas entre superficies cargadas en presencia de electrolitos. Interacciones electrostáticas entre esferas cargadas en una solución electrolítica. Regulación de carga.</p>							
<p><b>I.4. Estabilidad coloidal: teoría DLVO.</b> Aspectos cualitativos. La concentración crítica de coagulación: regla de Schulze – Hardy. Predicción de la dependencia de la CFC con <math>z</math> de la teoría DLVO. Adsorción en la capa de Stern. <b>Fuerzas no DLVO.</b> Fuerzas de solvatación y de hidratación. Ordenamiento molecular en superficies interfases y películas delgadas. La fuerza oscilatoria de solvatación. Desviaciones de este comportamiento. Aspectos importantes de las fuerzas de solvatación. Fuerzas de solvatación en sistemas acuosos: “hidratación” repulsiva. Fuerzas de solvatación en sistemas acuosos: fuerzas “hidrofóbicas” atractivas. Fuerzas estéricas debido a polímeros en las superficies.</p>							
VIGENCIA AÑOS							

<b>UNIVERSIDAD NACIONAL DEL SUR</b>						3 4
BAHIA BLANCA		ARGENTINA				
DEPARTAMENTO DE: QUIMICA						
<b>PROGRAMA DE: FISICOQUIMICA D</b>				CODIGO: 6102		
				AREA NRO: IV		
<b><u>II.- MECANICA ESTADISTICA Y SIMULACION COMPUTACIONAL</u></b>						
<b><i>II.1. Mecánica estadística, ensambles y termodinámica:</i></b>						
Ensamblés y postulados. Ensamblés canónico, microcanónico y gran canónico. Método de la distribución mas probable. Fluctuaciones. Equivalencia termodinámica de los ensambles. Segunda y tercera leyes de la Termodinámica.						
<b><i>II.2. Gas monoatómico ideal.</i></b>						
Niveles de energía y la función de partición traslacional canónica. Funciones termodinámicas.						
<b><i>II. 3. Gas ideal diatómico.</i></b>						
Aproximación del rotor rígido-oscilador armónico. La función de partición vibracional. La función de partición rotacional de una molécula heteronuclear. Funciones termodinámicas.						
<b><i>II.4. Relaciones para subsistemas independientes distinguibles e indistinguibles.</i></b>						
Moléculas o subsistemas independientes y distinguibles. Distribución de energía entre moléculas independientes.						
<b><i>II.5. Mecánica estadística clásica.</i></b>						
La función de partición clásica. El concepto de espacio de fase. Ejemplos introductorios en una dos y tres dimensiones del límite clásico a partir de la expresión mecano-cuántica de la función de partición. Distribución de Maxwell-Boltzmann. Equipartición de la energía.						
<b><i>II. 6. Equilibrio Químico en una mezcla de gases ideales.</i></b>						
Equilibrio químico en términos de la función de partición. Ejemplos de equilibrio químico. Tablas termodinámicas.						
<b><i>II.7. Cristales monoatómicos.</i></b>						
Tratamiento general de las vibraciones moleculares en un cristal monoatómico. Función de partición. Modelo de Einstein. Modelo de Debye. Defectos puntuales en cristales.						
<b><i>II.8. Gases imperfectos.</i></b>						
Función de partición configuracional. Segundo coeficiente de virial. Potencial cuadrado para la descripción del sistema. Ecuación de estado de Van der Waals.						
<b><i>II.9. Fluidos clásicos.</i></b>						
Propiedades comparativas de los líquidos frente a los sólidos y gases de densidad moderada. Función de Distribución de a Pares (FDP). Cálculo de magnitudes termodinámicas a partir de la FDP.						
<b><i>II.10. Simulación Molecular por computadora.</i></b>						
Métodos determinísticos y estocásticos. Descripción detallada de los métodos de Dinámica Molecular y Monte Carlo (Algoritmo de Metrópolis). Detalles técnicos: condiciones iniciales, criterio de corte para el potencial de interacción, condiciones periódicas de contorno, imagen mínima. Tratamiento de fuerzas de largo alcance. Estabilización. Cálculo de propiedades estáticas: función de distribución de a pares. Cálculo de propiedades dinámicas: recorrido cuadrático medio, coeficiente de difusión. Organización de un programa de simulación. Introducción a métodos combinados: Monte Carlo cinético y Dinámica Browniana.						
VIGENCIA	AÑOS					

**UNIVERSIDAD NACIONAL DEL SUR**4  
4

BAHIA BLANCA

ARGENTINA

DEPARTAMENTO DE: QUIMICA

**PROGRAMA DE: FISICOQUIMICA D**

CODIGO: 6102

AREA NRO: IV

PROGRAMA DE TRABAJOS PRACTICOS: Consta de aproximadamente 60 problemas contenidos en una guía de problemas impresa por la cátedra.

METODOLOGÍA DE LA ENSEÑANZA:

Clases explicativas a cargo del profesor. Clases de problemas interactivas con docentes auxiliares. (JTP)

FORMA DE EVALUACIÓN:Cursado: Dos parciales escritos de teoría y problemas durante el cuatrimestre.Aprobado: El alumno podrá optar entre 3 exámenes de promoción (únicamente durante el cursado de la materia) ó los dos parciales de cursado citados, con un examen final.

En todos los casos se trata de exámenes escritos de teoría y problemas.

**BIBLIOGRAFIA BASICA****I. MÓDULO DE FUERZAS INTERMOLECULARES**Israelachvili, J.N., *Intermolecular and Surface Forces*, Academic Press, London (1985)Díaz Peña, M, *Fuerzas Intermoleculares*, Monografía nº 19, OEA, Washington DC, (1979)P.C. Schulz, *Fuerzas intermoleculares*, apunte de cátedra (2010)**II.- MECANICA ESTADISTICA Y SIMULACION COMPUTACIONAL**T.L. Hill, "*An Introduction to Statistical Mechanics*", Addison-Wesley Publishing Company. 1960.D.Chandler, "*Introduction to Modern Statistical Mechanics*", Oxford University Press. New York. 1987.D.McQuarrie, "*Statistical Mechanics*", Harper & Row. New York .1976.M.P.Allen and D.J.Tildesley, "*Computer simulations of liquids*", Oxford Science Publications. Oxford. 1987.

AÑO	PROFESOR RESPONSABLE (firma aclarada)	AÑO	(firma aclarada)
<b>V I S A D O</b>			
COORDINADOR AREA		SECRETARIO ACADEMICO	DIRECTOR DE DEPARTAMENTO
		Dr. Mariano Garrido	Dra. Adriana G. Lista
FECHA:	FECHA:	FECHA:	Marzo 2017