Ministerio de Cultura y Educación
Universidad Nacional de San Luis
Facultad de Ciencias Físico Matemáticas y Naturales
Departamento: Fisica
Area: Area II: Superior y Posgrado

(Programa del año 2016)
(Programa en trámite de aprobación)
(Presentado el 05/07/2017 11:17:33)

I - Oferta Académica

Materia	Carrera	Plan	Año	Período
(MATERIA OPTATIVA I) MECANICA ESTADISTICA APLICADA A LA ADSORCION CON MULTIPLE OCUPACION DE SITIOS	LIC.EN FISICA	015/0	2016	1° cuatrimestre

6

II - Equipo Docente

Docente	Función	Cargo	Dedicación
RAMIREZ, ANTONIO JOSE	Prof. Responsable	P.Tit. Exc	40 Hs
DAVILA, MARA VERONICA	Prof. Co-Responsable	JTP Exc	40 Hs

III - Características del Curso

Credito Horario Semanal				
Teórico/Práctico	**Teóricas**	**Prácticas de Aula**	**Práct. de lab/ camp/ Resid/ PIP, etc.**	**Total**
Hs	Hs	Hs	Hs	Hs

Tipificación	Periodo

Duración			
Desde	**Hasta**	**Cantidad de Semanas**	**Cantidad de Horas**

IV - Fundamentación

Se ofrece esta asignatura como materia optativa orientada a alumnos de 5o año de Licenciatura en Física, que deseen involucrarse con el estudio de la mecánica estadística aplicada a la adsorción multi-sitio. Se pretende dar las herramientas necesarias para abordar esta temática que actualmente posee muchos problemas abiertos. Por este motivo el contenido es original y actual incluyendo además de libros de texto los últimos trabajos científicos publicados en el tema.

V - Objetivos / Resultados de Aprendizaje

-Brindar una completa introducción a la mecánica estadística de adsorción de moléculas lineales.

-Preparar al alumno para buscar y estudiar publicaciones científicas.

-Comprender, en un cuerpo integrado de conocimientos, los conceptos y principios que gobiernan la adsorción de gases puros y de mezclas en sistemas de una y dos dimensiones.

-Lograr las bases suficientes para la aplicación de esos conceptos a la resolución de problemas en la temática estudiada.

-Interiorizar al alumno con problemas actualmente abiertos en este campo.

-Desarrollar las habilidades que permitan modelar analíticamente los fenómenos de adsorción de gases con múltiple ocupación de sitios.

VI - Contenidos

PARTE I: ADSORCIÓN DE GASES PUROS

Unidad 1: Adsorción de monómeros

Repaso de mecánica estadística. Adsorción de gases. Adsorbentes. Modelo de gas de red. Modelo de Langmuir. Aproximación de subestados efectivos (ESA). Modelo de B.E.T. Aproximación de Gibbs. Teoría del potencial. Aproximación de Bragg-Williams. Aproximación cuasi-química. Aproximación de campo medio detallado. Aplicación a la adsorción de gases en nanopartículas y nanotubos de carbón.

Unidad 2: Adsorción de k-meros sin interacciones laterales

Adsorción de k-meros no interactuantes en una y dos dimensiones. Modelo multisitio de Langmuir. Extensión analítica de la termodiámica exacta en una dimensión a más dimensiones. Aproximación de Flory-Huggins para adsorbatos flexibles y lineales. Aproximación de Guggenheim-Di-Marzio. Termodinámica estadística fraccionaria para la adsorción de moléculas con múltiple ocupación de sitios. Aproximación de balance de ocupación. Modelo de adsorción Semi-empírica. Comparación entre teoría y simulación de Monte Carlo. Adsorción sobre superficies heterogéneas. Adsorción en multicapas. Aplicaciones.

Unidad 3: Adsorción de k-meros con interacciones laterales Aproximación de campo medio. Aproximación cuasi-química.Comparación entre teoría y simulación de Monte Carlo. Comparación entre teoría y datos experimentales.

Unidad 4: Comportamiento crítico

Transiciones de fase de primero y segundo orden. Transición de fase isotrópico-nemática. Diagramas de fase. Estudio del comportamiento crítico de sistemas con interacciones laterales atractivas. Estudio del comportamiento crítico de sistemas con interacciones laterales repulsivas.

PARTE III: ADSORCIÓN DE MEZCLAS DE GASES

Unidad 5: Adsorción de mezclas sin interacciones laterales

Mecánica estadística exacta para la adsorción de mezclas en una dimensión. Teoría de soluciones adsorbidas ideales (IAST). Otros modelos. Extensión analítica para la adsorción de mezclas de k-meros. Aproximación de Di-Marzio. Nuevas aproximaciones para la adsorción multi-componente.

Unidad 6: Adsorción de mezclas con interacciones laterales

Aproximación de campo medio. Aproximación cuasi-química.

VII - Plan de Trabajos Prácticos

Se propone para cada tema una guía de problemas los cuales requieren la elaboración de conclusiones y resolución por parte de los alumnos.

PARTE I: ADSORCIÓN DE GASES PUROS

Unidad 1: Adsorción de monómeros

Unidad 2: Adsorción de k-meros sin interacciones laterales

Unidad 3: Adsorción de k-meros con interacciones laterales

Unidad 4: Comportamiento crítico

PARTE III: ADSORCIÓN DE MEZCLAS DE GASES

Unidad 5: Adsorción de mezclas sin interacciones laterales

Unidad 6: Adsorción de mezclas con interacciones laterales

VIII - Regimen de Aprobación

Es necesario aprobar dos exámenes parciales. Cada parcial podrá ser recuperado en caso de no ser aprobado en primera instancia. Habrá un recuperatorio extra para aquellos alumnos que hayan aprobado, en cualquier instancia, uno de los parciales.

Se obtiene la aprobación de la materia de forma promocional por medio de un coloquio.

IX - Bibliografía Básica

[1] G. Zgrablich. Elementos de mecánica estadística. Universidad Autónoma Metropolitana. 2009
[2] T. L. Hill. An introduction to statistical thermodynamics. Addison-Wesley, Reading, MA, 1960.
[3] Gas Separation by adsorption processes. Ralph T. Yang. Imperial College Press. Londres, 2008.
[4] Quasi-chemical approximation for polyatomics: statistical thermodynamics of adsorption, M. Dávila, F. Romá, J. L. Riccardo, A. J. Ramirez-Pastor, Surface Science, 600 (2006) 2011–2025.
[5] Adsorption of polyatomics: theoretical approaches in model systems and applications. José L. Riccardo, Federico J. Romá, and Antonio J. Ramirez-Pastor, Int. J. Mod. Phys. B 20, 4709 (2006).
[6] Adsorption in one-dimensional channels arranged in a triangular structure: Theory and Monte Carlo simulations. M. Dávila, P.M. Pasinetti, F. Nieto, A.J. Ramirez-Pastor, Physica A 385 (2007) 221–232.
[7] Critical behavior of long linear k-mers on honeycomb lattices. Matoz-Fernandez, D.A., Linares, D.H., Ramirez-Pastor, A.J. Physica A: Statistical Mechanics and its applications 387 (26) 6513 - 6525 (2008).
[8] Fractional statistical theory and use of quasi-chemical approximation for adsorption of interacting k-mers. M. Dávila, J.L. Riccardo, A.J. Ramirez-Pastor, Surface Science 603 683–689. (2009)
[9] Exact statistical thermodynamics of alkane binary mixtures in zeolites: New interpretation of the adsorption preference reversal phenomenon from multisite-occupancy theory. M. Dávila, J.L. Riccardo, A.J. Ramirez-Pastor, Chemical Physics Letters 477 402–405. (2009)
[10] Critical behavior of attractive rigid rods on two-dimensional lattices. P. Longone, D. H. Linares, and A. J. Ramirez-Pastor. The Journal of Chemical Physics 132, 184701 (2010).

[11] New isotherm for multisite occupancy adsorption of long, straight rigid rods. Matoz-Fernandez, D.A., Linares, D.H., Ramirez-Pastor, A.J. Langmuir 27 (6) 2456 – 2463. (2011)
[12] Isotropic-nematic phase diagram for interacting rigid rods on two-dimensional lattices. P. Longone, M. Dávila, and A. J. Ramirez-Pastor, Physical Review E 85, 011136 (2012).
[13] Statistical thermodynamics of long straight rigid rods on triangular lattices: Nematic order and adsorption thermodynamic functions. Matoz-Fernandez, D.A., Linares, D.H., Ramirez-Pastor, A.J. Langmuir 28 (35) 12788 - 12795 (2012).
[14] First-order phase transitions in repulsive rigid k-mers on two-dimensional lattices. Pasinetti, P.M., Romá, F., Ramirez-Pastor, A.J. Journal of Chemical Physics 136 (6) (2012).
[15] Phase behavior of attractive k-mers on two-dimensional lattices: a study from quasi-chemical approximation. P.Longone, M. Dávila, J. L. Riccardo and A. J. Ramirez-Pastor, Adsorption 19, 509-519 (2013).
[16] Computer simulation and detailed mean-field approximation applied to adsorption on nanoparticles. O. A. Pinto, B. López de Mishima, M. Dávila, A. J. Ramirez-Pastor, E. P. M. Leiva, O. A. Oviedo. Physical Review E 88, 062407 (2013).

X - Bibliografia Complementaria

[1] Donald A. McQuarrie. Statistical mechanics. Harper and Row, New York,
[2] Sergio Cannas. Notas de Mecánica estadística. Universidad Nacional de Córdoba. 2013.

XI - Resumen de Objetivos

-Brindar una introducción a la mecánica estadística de adsorción de moléculas lineales.

-Preparar al alumno para buscar y estudiar publicaciones científicas.

-Comprender, en un cuerpo integrado de conocimientos, los conceptos y principios que gobiernan la adsorción de gases puros y de mezclas en sistemas de una y dos dimensiones.

-Lograr las bases suficientes para la aplicación de esos conceptos a la resolución de problemas en la temática estudiada.

-Interiorizar al alumno con problemas actualmente abiertos en este campo.

-Desarrollar las habilidades que permitan modelar analíticamente los fenómenos de adsorción de gases con múltiple ocupación de sitios.

XII - Resumen del Programa

PARTE I: ADSORCIÓN DE GASES PUROS

Unidad 1: Adsorción de monómeros

Unidad 2: Adsorción de k-meros sin interacciones laterales

Unidad 3: Adsorción de k-meros con interacciones laterales

Unidad 4: Comportamiento crítico

PARTE III: ADSORCIÓN DE MEZCLAS DE GASES

Unidad 5: Adsorción de mezclas sin interacciones laterales

Unidad 6: Adsorción de mezclas con interacciones laterales

XIII - Imprevistos

XIV - Otros

ELEVACIÓN y APROBACIÓN DE ESTE PROGRAMA	
	Profesor Responsable
Firma:	
Aclaración:	
Fecha:	