

**J. J. Lueti **  
**CVRRICVLVM VITÆ**

**NOMBRE (transliteraci3n)**  
Juan Jos  Luetich

**T TULO**  
TERMODIN MICO QU MICO  
 rea de Qu mica F sica  
Academia de Ciencias Luventicus

**DIRECCI3N**  
Pasaje Monroe 2766, (2000) Rosario, Argentina

**TEL FONO**  
+54-341-448-7316

**FAX**  
+54-341-439-7196

**CORREO ELECTR3NICO**  
[jjluetich@luventicus.org](mailto:jjluetich@luventicus.org)

**NACIMIENTO**  
24 de enero de 1964  
Rosario, Argentina



Columbia, Carolina del Sur, febrero de 2000

## INSTRUCCIÓN

- Título de grado: Ingeniero Químico, Universidad Tecnológica Nacional, Argentina, 1995
- Título de posgrado: Doctor en Ingeniería Química, Universidad Nacional del Litoral; tesis: *Aportes a la Termodinámica de la Destilación Reactiva*, defendida (con honores) el día 6 de julio de 2001

## TEMAS DE INTERÉS

- Termodinámica de los sistemas multifásicos en equilibrio químico
- Operaciones de destilación reactiva: evoluciones por estados de no-equilibrio físico y químico
- Importancia de la incerteza de los parámetros termodinámicos en la predicción del comportamiento de equipos de destilación y absorción
- Modelización de mezclas líquidas no-ideales
- Cálculos de parámetros de interacción binarios por métodos de la Química Computacional
- El uso de métodos de la Química Electrónica Estructural para calcular propiedades termodinámicas de gases ideales
- Termodinámica y cinética de las reacciones en medios gaseosos.
- Simulaciones de sistemas físicos: Dinámica Molecular, método de Monte Carlo y autómatas celulares
- Termodinámica de las reacciones de isomerización, dimerización y polimerización
- Termodinámica química de las celdas voltaicas y de combustible

## HABILIDADES

- Programación basada en la definición de reglas con *Mathematica*
- Programación de rutinas en FORTRAN, LISP, C y Java; escritura de fragmentos en PERL
- Computación en paralelo con *Gaussian* (Centro Nacional para Aplicaciones de Supercomputación, E.U.A.), NWChem (Departamento de Energía, E.U.A.), y GAMESS, CHARMm y EGOVII (Clementina2, SeTCIP, Argentina)
- Cálculos *ab initio* con *Gaussian*, GAMESS y NWChem

- Simulaciones empleando la técnica de la Dinámica Molecular con Cerius<sup>2</sup> e HyperChem
- Simulaciones empleando el método de Monte Carlo con HyperChem
- Simulaciones de procesos de separación con HYPROTECH DISTIL (HYSYS)
- Únicos: Linux (Slackware, RedHat), BSD, Digital Unix, SCO Unix

## DISTINCIONES

- Miembro permanente de la Academia de Ciencias Luventicus, 2002.
- Pasantía como estudiante internacional en el Departamento de Ingeniería Química de la Universidad de Carolina del Sur, 2000. Temas: *Computación en paralelo de propiedades termodinámicas por métodos ab initio*, y *Simulaciones por medio de técnicas de Dinámica Molecular para calcular constantes dieléctricas*. Profesora: Dra. Perla Balbuena
- Beca para realizar estudios de posgrado del FOMEC en la UNL, 1999 a 2001. Director del Proyecto: Ing. Alberto Castro. Tema: *Destilación Reactiva*. Director: Dr. Enrique Campanella. Co-director: Dr. Ricardo Grau
- Pasantía como estudiante de posgrado en el INTEC, 1997 a 1998. Tema: *Destilación Extractiva*. Director: Dr. Enrique Campanella
- Beca para realizar estudios en el Departamento de Química Orgánica de la FRR. Tema: *Síntesis de polipéptidos y otras macromoléculas*, 1987 a 1988. Director: Académico Oscar Nemeç
- Beca para realizar estudios en el Laboratorio de Química Orgánica, FRR, UTN. Tema: *Síntesis de colorantes azoicos*, 1986 a 1987. Director: Académico Oscar Nemeç

## EXPERIENCIA LABORAL

- Fundador de la Academia de Ciencias Luventicus, 2001-2002

- Investigador Posdoctoral Externo en el INTEC, Área de Reactores Químicos, 2001
- Profesor de Nivel Medio de Física y Química, Colegio Salesiano “San José”, Rosario, 1995 a 1999
- Consultor en la Planta de Impresiones OFFSET (propiedades físicas del sistema agua+alcohol+aditivos; reología de tintas metálicas), Editorial Didascalía, Rosario, 1997 a 1998
- Profesor de Nivel de Grado de Matemática, Física y Química, Instituto “Lagrange”, Rosario, 1992 a 1999
- Profesor de Nivel Medio de Matemática, Física y Química, Centro de Estudios “Rosario”, 1983 a 1991

## CURSOS DE POSGRADO

- Termodinámica
- Termodinámica Estadística
- Termodinámica de la Separación de Mezclas de Líquidos No-Ideales
- Análisis de Reacciones y Reactores
- Cinética Química
- Transferencia de Energía
- Transferencia de Materia
- Mecánica de los Fluidos
- Análisis Numérico de Ecuaciones con Derivadas Parciales

## SEMINARIOS

- Análisis de Reacciones y Reactores, INTEC, 1998. *El impacto del cambio en los coeficientes de transferencia de masa sobre el tamaño calculado de los equipos de absorción*. Árbitros: Dr. Orlando Alfano y Dr. Ricardo Grau
- Termodinámica, INTEC, 1999. *Energía libre y energía ligada*. Árbitro: Dr. E.

Campanella

- Cinética Química, FIQ, 1999. *Polimerización en la llama de benceno: Distribución de masas moleculares*. Árbitro: Dr. Eduardo Miró
- Análisis numérico de EDPs, FIQ, 1999. *Un método para resolver ecuaciones hiperbólicas usando Mathematica*. Árbitro: Dr. Carlos Neumann

## ENCUENTROS

- I Reunión Anual de los Miembros de la Academia Luventicus, 2002. *Introducción a la Termodinámica del no-equilibrio*.
- Tercer Encuentro Nacional de Jóvenes Investigadores, UNL, 1999. *Las variables de composición de los sistemas (multifásicos) reaccionantes*
- Quinta Reunión del Comité Argentino de Diagramas de Fases, Buenos Aires, 2000. *Las variables de composición transformadas y la descripción del equilibrio de fases en sistemas reaccionantes*, colaborador: Dr. E. Campanella
- XII Congreso Argentino de Química Física, Neuquén, 2001. *El uso de métodos ab initio para predecir el equilibrio líquido-vapor de sistemas reaccionantes*, colaborador: Dr. E. Campanella y Dra. P. Balbuena

## ARTÍCULOS

- I. The Gibbs energy form of the Fundamental Equation for multi-phase multi-reaction systems within the physical approach. *Trans. Luv. Acad.*, **1**, 1-23, 2002 (<ftp.luventicus.org/papers/02TLA001i.pdf>)
- II. Linear combinations, Lagrange multipliers, and Legendre transforms—a look at three methods to write the Gibbs energy of reactive mixtures. *Trans. Luv. Acad.*, **1**, 25-39, 2002 (<ftp.luventicus.org/papers/02TLA001ii.pdf>)
- III. Three fundamental theorems on Chemical Thermodynamics. *Trans. Luv. Acad.*, **1**, 41-55, 2002 (<ftp.luventicus.org/papers/02TLA001iii.pdf>)

- IV. Microscopic reversibility and the information contained in the composition vector. *Trans. Luv. Acad.*, **1**, 57-75, 2002 (<ftp.luventicus.org/papers/02TLA001iv.pdf>)
- La elección de las variables de composición en los sistemas multifásicos reaccionantes (revisión)
- Cálculos ab initio de constantes de equilibrio para reacciones de esterificación en fase gaseosa, colaboradora: Dra. P. Balbuena
- La energía libre estándar de reacciones de esterificación calculadas por métodos de la Química Electrónica Estructural e integración de volumen: I. Discusión general alrededor del caso del acetato de etilo, II. La familia de los acetatos de alquilo, III. Cinética en la fase no-condensada, IV. Fases del líquido y del vapor: Dos sistemas abiertos acoplados
- Cinética y termodinámica de la combustión del benceno en fase gaseosa
- Equilibrio termodinámico de la esterificación del ácido acético con etanol en fase líquida comprimida, colaborador: Dr. R. Grau
- Un modelo para el ELV en sistemas reactivos
- Comparación entre la termodinámica de la destilación reactiva y la termodinámica de la absorción con reacción química
- Definición termodinámica de azeótropo reactivo (revisión)
- Constantes de equilibrio y curvas de residuos.
- Una definición alternativa de fugacidad (artículo de valor pedagógico)
- Un sistema en cortocircuito químico (artículo de divulgación)
- Las órbitas de los planetas y las constantes de equilibrio químico. Un viaje a algunas ideas de Adrien-Marie Legendre (artículo de divulgación)

## OTROS INTERESES

- Música: Ejecución de piano (música del período neo-romántico). Composición de música para piano solo y conjuntos de cuerdas

- Antropología: Estudio de las lenguas, instituciones y mitología de los pueblos indoeuropeos