

Termodinàmica Aplicada

2012/2013

Codi: 102442

Crèdits ECTS: 6

Titulació	Pla	Tipus	Curs	Semestre
2500897 Graduat en Enginyeria Química	951 Graduat en Enginyeria Química	OB	2	2

Professor de contacte

Nom: Josep López Santín

Correu electrònic: Josep.Lopez@uab.cat

Utilització d'idiomes

Llengua vehicular majoritària: català (cat)

Algun grup íntegre en anglès: No

Algun grup íntegre en català: Sí

Algun grup íntegre en espanyol: No

Prerequisits

Coneixements corresponents a les matèries de Física i Química del primer curs de grau en Enginyeria Química i de Balanços en Enginyeria Química. Haver cursat Aplicacions Informàtiques.

Objectius

Es preten presentar els principis de la Termodinàmica i la seva aplicació en Enginyeria Química. A partir de la formulació i discussió dels principis termodinàmics, aquests s'utilitzen per a la determinació de les propietats de fluids purs i mescles. Un objectiu fonamental és l'anàlisi termodinàmica dels sistemes en equilibri, tant equilibri físic entre fases, com l'equilibri químic. En tots els casos, es preten la quantificació i anàlisi de resultats per a la seva aplicació en el disseny de reactors i operacions unitàries.

Competències

- Actitud personal
- Aplicar coneixements rellevants de les ciències bàsiques, com són les matemàtiques, la química, la física i la biologia, i també principis d'economia, bioquímica, estadística i ciència de materials, per comprendre, descriure i resoldre problemes típics de l'enginyeria química.
- Hàbits de pensament
- Hàbits de treball personal

Resultats d'aprenentatge

1. Aplicar coneixements rellevants de les ciències bàsiques, com ara les matemàtiques, la física i especialment la química, que permetin comprendre, descriure i resoldre problemes típics de l'enginyeria química.
2. Desenvolupar la capacitat d'anàlisi, síntesi i prospectiva.
3. Desenvolupar la curiositat i la creativitat.
4. Gestionar el temps i els recursos disponibles. Treballar de manera organitzada.

Continguts

BLOC 1

0.- Introducció

Termodinàmica. Termodinàmica i Enginyeria Química

1.- Primer principi de la Termodinàmica i conceptes bàsics

Primer principi. Energia interna. Funcions d'estat. Entalpia. Equilibri. Regla de les fases de Gibbs. Processos reversibles. Processos a volum i pressió constant. Calor específica. Processos adiabàtics i politròpics.

2.- Segon principi de la Termodinàmica. Entropia

Segon principi. La màquina tèrmica. Cicle de Carnot per un gas ideal. Entropia. Principi de l'augment d'entropia. Tercer principi de la Termodinàmica.

BLOC 2

3.- Propietats volumètriques i termodinàmiques dels fluids

Comportament PVT de substàncies pures. Teoria dels estats corresponents. Propietats crítiques. Factor acèntric. Estimació de propietats volumètriques dels fluids purs. Equacions d'estat. Energia de Gibbs. Relacions entre propietats termodinàmiques. Propietats residuals. Sistemes bifàsics. Correlacions generalitzades.

4.- Termoquímica

Determinació de calors específiques. Mètodes de càlcul de la calor de canvi de fase. Entalpies de formació. Entalpia de reacció.

5.- Sistemes de composició variable: Estimació de propietats de mescles

Estimació de propietats volumètriques de mescles. Regles de mescla. Potencial químic. Propietats parcials. Equació de Gibbs-Duhem. Fugacitat i coeficient de fugacitat. Propietats en excés. Activitat i coeficient d'activitat.

BLOC 3

6.- Equilibri entre fases

Criteris d'equilibri. Equilibri vapor líquid: cas ideal. Comportament no ideal. Punt de bombolla i punt de rosada. Càlcul de coeficients de fugacitat. Models per al càlcul del coeficient d'activitat. Equilibri líquid-líquid. Equilibri sòlid-líquid.

7.- Equilibri químic

Constant d'equilibri. Mètodes de càlcul de la constant d'equilibri. Determinació de les composicions en l'equilibri. Operació isoterma i adiabàtica.

Metodologia

Activitats dirigides:

Classes teòriques: Classes magistrals sobre els conceptes del temari.

Classes de problemes: Resolució de problemes corresponents a la matèria. Discussió amb els alumnes sobre les estratègies de solució i la seva execució.

Seminaris ús de simulador: Seminari de presentació de la utilització de simuladors de processos en l'estimació de propietats termodinàmiques i composicions d'equilibri.

Activitats autònomes:

Estudi: Estudi individual. Preparació d'esquemes i resums.

Resolució de problemes: Treball autònom de resolució de problemes. Per un costat com a complement del propi estudi de l'assignatura i, per altra, com a treball previ a les classes de problemes.

Recerca de documentació i bibliografia: Consulta de les fons bibliogràfiques i documentals essencials per al curs.

Activitats formatives

Títol	Hores	ECTS	Resultats d'aprenentatge
Tipus: Dirigides			
Classes de problemes	14	0,56	1, 2, 4
Classes teòriques	29	1,16	1, 2, 3, 4
Seminari ús de simulador	2	0,08	2
Tipus: Autònomes			
Estudi	35	1,4	1, 2, 3, 4
Recerca de documentació i bibliogràfica	5	0,2	1, 2, 3
Resolució de problemes	47	1,88	1, 2, 4

Avaluació

Avaluació continuada:

1^a prova parcial (PP1) (temes 1 a 3) : 20 % nota.

2^a prova parcial (PP2) (temes 4 a 6) : 30 % nota.

Prova final (PF) (temes 1 a 7) : 40% nota

Problemes a entregar al llarg del curs (Prob): 10% nota.

Prova final:

Hi haurà una prova final (PF) de tota l'assignatura, que inclourà l'avaluació del tema 7. Els alumnes s'han de presentar obligatòriament a la prova final.

La prova final permetrà la recuperació de les proves parcials suspeses de forma que es tindrà en compte la nota més alta de les següents opcions:

$(PP1 \cdot 0.2 + PP2 \cdot 0.3 + PS \cdot 0.4 + Prob \cdot 0.1)$ o

$(PS \cdot 0.9 + Prob \cdot 0.1)$

Les proves parcials i final contindran una part teòrica i una part de problemes. Per superar una prova caldrà haver obtingut un mínim de 3,5/10 a la part teòrica.

Els alumnes repetidors podran escollir l'avaluació continuada o la realització només de la prova final.

La data de revisió d'exàmens es farà pública en el moment de publicar les qualificacions a través del campus virtual.

Activitats d'avaluació

Títol	Pes	Hores	ECTS	Resultats d'aprenentatge
Entrega de problemes o treballs	10%	6	0,24	1, 2
Prova final	40% (90%)	5	0,2	1, 2, 3, 4
Prova parcial 1	20 %	3,5	0,14	1, 2, 3, 4
Prova parcial 2	30%	3,5	0,14	1, 2, 3, 4

Bibliografia

Smith, J.M.; Van Ness, H.C. Introduction to Chemical Engineering Thermodynamics. 7th ed. McGraw-Hill Education. (2005).

Sandler, S.I. Chemical and Engineering Thermodynamics. 4th ed. Wiley, John Wiley and Sons Ltd. USA. (2007).

Moran, M.J.; Shapiro, H.N. Fundamentals of Engineering Thermodynamics. 6th ed. John Wiley and Sons Ltd. USA. (2007).

Koretsky M.D. Engineerign and Chemical Thermodynamics. John Wiley and Sons Ltd. USA (2004)

Kyle, B. Chemical and Process Thermodynamics. 3rd ed. Ed. Prentice Hall PTR.USA. (2000).