

**Termodinàmica Aplicada**

Codi: 102442  
Crèdits: 6

Titulació	Tipus	Curs	Semestre
2500897 Enginyeria Química	OB	2	2

**Professor/a de contacte**

Nom: Gloria González Anadón  
Correu electrònic: Gloria.Gonzalez@uab.cat

**Utilització d'idiomes a l'assignatura**

Llengua vehicular majoritària: català (cat)  
Grup íntegre en anglès: No  
Grup íntegre en català: Sí  
Grup íntegre en espanyol: No

**Prerequisits**

Haver cursat les matèries de Física i Química del primer curs de grau en Enginyeria Química i Balanços en Enginyeria Química. Haver cursat o estar cursant Aplicacions Informàtiques.

**Objectius**

Es presenten 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 en sistemes amb reacció química. En ambdós casos, es tracta de la quantificació i anàlisi de l'equilibri per a la seva aplicació futura 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. Definicions i nomenclatura.

### 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.

## **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.

Utilització de simulador de processos per estimar propietats i resoldre problemes d'equilibri entre fases de sistemes multicomponents.

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

### Activitats formatives

Títol	Hores	ECTS	Resultats d'aprenentatge
<b>Tipus: Dirigides</b>			
Classes de problemes	15	0,6	1, 2, 4
Classes teòriques	30	1,2	1, 2, 3, 4
Seminaris ús de simulador	5	0,2	2
<b>Tipus: Autònomes</b>			
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<sup>a</sup> prova parcial (PP1) (temes 1 a 5) : 40 % nota.

2<sup>a</sup> prova parcial (PP2) (temes 6 i 7) : 45 % nota.

Treball amb simulador de processos (TR): 15% nota.

Cal obtenir un 3/10 a la part teòrica de cada prova parcial i 3/10 a cada prova parcial per superar l'assignatura per curs.

#### Prova final de recuperació:

Hi haurà una prova final (PF) de recuperació, per a aquells alumnes que no hagin superat l'avaluació continuada (nota < 5).

La prova final inclourà una avaluació de tota l'assignatura, i no es podran recuperar només les proves parcials no superades.

La nota final s'obindrà a partir de 85% de la prova de recuperació i el 15% del treball del simulador de processos.

Les proves parcials i final contindran una part teòrica i una part de problemes.

#### Aspectes generals:

Sense perjudici d'altres mesures disciplinàries que s'estimin oportunes, es qualificaran amb un zero les irregularitats comeses per l'estudiant que puguin conduir a una variació de la qualificació d'un acte d'avaluació. Per tant, la còpia, el plagi, l'engany, deixar copiar, etc. en qualsevol de les activitats d'avaluació implicarà suspendre-la amb un zero.

La data de revisió d'exàmens es farà pública en el moment de publicar les qualificacions a través de la plataforma virtual docent. En aquest context, es podran fer reclamacions sobre la nota de l'activitat, que seran avaluades pel professorat responsable de l'assignatura. Si l'estudiant no es presenta a aquesta revisió, no es revisarà posteriorment aquesta activitat.

Matricules d'honor. Atorgar una qualificació de matrícula d'honor és decisió del professorat responsable de l'assignatura. La normativa de la UAB indica que les MH només es podran concedir a estudiants que hagin obtingut una qualificació final igual o superior a 9.00. Es pot atorgar fins a un 5% de MH del total d'estudiants matriculats.

Un estudiant es considerarà no avaluable (NA) si no s'ha presentat a les proves parcials ni final.

## Activitats d'avaluació

Títol	Pes	Hores	ECTS	Resultats d'aprenentatge
Prova final recuperació	90%	5	0,2	1, 2, 3, 4
Prova parcial 1	40 %	3,5	0,14	1, 2, 3, 4
Prova parcial 2	45%	3,5	0,14	1, 2, 3, 4
Treball amb simulador de processos	15%	1	0,04	1, 2

## Bibliografia

Koretsky, M.D. Engineering and Chemical Thermodynamics. John Wiley and Sons Ltd. USA. (2007)

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

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

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