

Termodinàmica Aplicada

Codi: 102442

Crèdits: 6

Titulació	Tipus	Curs	Semestre
2500897 Enginyeria Química	OB	2	1
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, Química, Aplicacions Informàtiques i Bases de l'Enginyeria Química del grau en Enginyeria Química. .

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

Enginyeria Química

- "Comprendre i aplicar els principis bàsics en què es fonamenta l'enginyeria química, i més concretament: balanços de matèria, energia i quantitat de moviment; termodinàmica, equilibri entre fases i equilibri químic; cinètica dels processos físics de transferència de matèria, d'energia i de quantitat de moviment, i cinètica de la reacció química"
- Comunicació
- Hàbits de pensament
- Hàbits de treball personal

Resultats d'aprenentatge

1. Aplicar els fonaments científics i tecnològics de termodinàmica, equilibri entre fases i equilibri químic i de la cinètica dels processos físics de transferència d'energia.
2. Comunicar eficientment, oralment i per escrit, coneixements, resultats i habilitats, tant en entorns professionals com davant de públics no experts.
3. Desenvolupar un pensament i un raonament crítics
4. Treballar de manera autònoma.

Continguts

0.- Introducció

Termodinàmica i Enginyeria Química. Conceptes bàsics i nomenclatura. Propietats termodinàmiques. Equilibri. Variables termodinàmiques. Regla de les fases de Gibbs. Comportament PVT.

1.- Primer principi de la Termodinàmica i conceptes bàsics

Primer principi. Energia interna. Funcions d'estat. Entalpia. Processos reversibles. Processos a volum i pressió constant. Calor específica. Processos isoterms, 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.

3.- Propietats volumètriques i termodinàmiques dels fluids

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

4.- Termoquímica

Efectes de calor sensible. Efectes calòrics en canvis de fase. Entalpies de formació. Entalpia de reacció.

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

Estimació de propietats volumètriques de mescles. Equacions d'estat. Equació de Gibbs-Duhem. Propietats molars parcials. Potencial químic.

6.- Equilibri entre fases

Fugacitat i coeficient de fugacitat. Activitat i coeficient d'activitat. Criteris d'equilibri. Equilibri vapor líquid (EVL). Punt de bombolla i punt de rosada. Comportament no ideal. Càlcul de coeficients de fugacitat. Models per al càlcul del coeficient d'activitat.

7.- Equilibri químic

Constant d'equilibri. Mètodes de càlcul de la constant d'equilibri. Determinació de les composicions en l'equilibri. Diagrames d'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 per al ús de simuladors: Seminaris de introducció a 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.

Nota: es reservaran 15 minuts d'una classe, dins del calendari establert pel centre/titulació, per a la complementació per part de l'alumnat de les enquestes d'avaluació de l'actuació del professorat i d'avaluació de l'assignatura/mòdul.

Activitats formatives

Títol	Hores	ECTS	Resultats d'aprenentatge
Tipus: Dirigides			
Classes de problemes	15	0,6	1, 3, 4
Classes teòriques	30	1,2	1
Seminari ús de simulador	5	0,2	1, 2, 3, 4
Tipus: Autònomes			
Estudi	35	1,4	1, 2, 3, 4
Recerca de documentació i bibliogràfica	5	0,2	3, 4
Resolució de problemes	47	1,88	1, 2, 3, 4

Avaluació

Avaluació continuada:

1ª prova parcial (PP1) (temes 1 a 5) : 40 % nota.

2ª 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'obtindrà 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 a l'examen final.

Activitats d'avaluació

Títol	Pes	Hores	ECTS	Resultats d'aprenentatge
Prova final recuperació	85%	5	0,2	1, 2, 3
Prova parcial 1	40 %	3,5	0,14	1, 2, 3
Prova parcial 2	45%	3,5	0,14	1, 2, 3
Treball amb simulador de processos	15%	1	0,04	1, 2, 3, 4

Bibliografia

Koretsky, M.D. Engineering and Chemical Thermodynamics. John Wiley and Sons Ltd. USA. 2n ed. (2012)

Smith, J.M.; Van Ness, et al H.C. Introduction to Chemical Engineering Thermodynamics. 8th ed. McGraw-Hill Education. (2018).

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).

Programari

Es donarà accés a un simulador de processos químics (HYSYS)