

Titulació	Tipus	Curs
Enginyeria Química	OB	2

Professor/a de contacte

Nom : Gara Villalba Mendez

Correu electrònic : gara.villalba@uab.cat

Idiomes dels grups

Podeu consultar aquesta informació al [final](#) del document.

Prerequisits

Haver cursat o estar cursant 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.

Resultats d'aprenentatge

1. Desenvolupar un pensament i un raonament crítics
2. 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.
3. Treballar de manera autònoma.
4. Comunicar eficientment, oralment i per escrit, coneixements, resultats i habilitats, tant en entorns professionals com davant de públics no experts.

Continguts

0.- Introducció: Termodinàmica i Enginyeria Química. Conceptes bàsics i nomenclatura. Propietats termodinàmiques. Equilibri. Variables termodinàmiques. Regla de les fases de Gibbs. Comportament pressió/volum/temperatura.

1.- Primer principi de la Termodinàmica i conceptes bàsics: 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; La màquina tèrmica. Cicle de Carnot per un gas ideal.

Entropia. Principi de l'augment d'entropia.

3.- Propietats volumètriques i termodinàmiques dels fluids: Estimació de propietats volumètriques dels fluids purs. Comportament PVT de substàncies pures. Teoria dels estats corresponents. Propietats crítiques. Factor de compressibilitat. Equacions d'estat. Correlacions generalitzades per a líquids. Relacions entre propietats termodinàmiques. Energia de Gibbs. Propietats residuals.

4.- Termoquímica: Efectes de calor sensible. Efectes calòrics en canvis de fase. Entalpies de formació. Entalpies de reacció.

5.- Avaluació de propietats en sistemes multicomponents: Estimació de propietats volumètriques de mescles. Regles de mescla. Adaptació de les equacions d'estat. Equació de Gibbs-Duhem. Propietats molars parcials. Potencial químic.

6.- Equilibri entre fases: Variables de l'equilibri: Fugacitat i coeficient de fugacitat. Activitat i coeficient d'activitat. Criteris d'equilibri. Equilibri vapor líquid (EVL) mescles binaries i multicomponent. 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: Definició de la constant d'equilibri. Mètodes de càlcul de la constant d'equilibri. Determinació de les composicions en l'equilibri. Diagrames d'equilibri

8.- Introducció a la Termodinàmica Quàntica: Comparació entre la termodinàmica clàssica i la quàntica. Nivells d'energia a nanoescala, entrellaçament i coherència. Aplicació en enginyeria química, com ara la catàlisi d'àtom únic mitjançant efecte túnel quàntic (exemple: fixació de nitrogen) i vies de reacció no tèrmiques.

Activitats formatives i Metodologia

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

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, perquè l'alumnat completi les enquestes d'avaluació de l'actuació del professorat i d'avaluació de l'assignatura.

Avaluació

Activitats d'avaluació continuada

Títol	Pes	Hores	ECTS	Resultats d'aprenentatge
Prova final recuperació	90%	5	0,2	1, 2, 3, 4
Prova parcial 2	45%	3,5	0,14	1, 2, 3, 4
Prova parcial 1	45 %	3,5	0,14	1, 2, 3, 4
Treball amb simulador de processos	10%	1	0,04	1, 2, 3, 4

Avaluació continuada:

1ª prova parcial (temes 1 a 5) : 45% nota.

2ª prova parcial (temes 6 a 8) : 45% nota.

Treball amb simulador de processos: 10% nota.

Les proves parcial tenen una part de teoria i una part de problemes. La part de teoria es fa sense apunts ni calculadora i cal obtenir un 3/10 per superar l'examen. La part de problemes es fa amb calculadora científica i formulari, i cal obtenir un 5/10 per superar l'examen.

El treball amb simulador de processos es presentarà a mig curs, coincidint amb els seminaris on es faran activitats amb el simulador. És un treball per fer en grups de 3 alumnes.

Prova final de recuperació:

Hi haurà una prova final de recuperació, per a aquells alumnes que no hagin superat l'avaluació continuada. La prova final inclourà una avaluació de tota l'assignatura, i no es podran recuperar només les proves parcials no superades sense excepcions. La nota final s'obtindrà a partir de 90% de la prova de recuperació i el 10% del treball del simulador de processos.

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 plagiat, 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.

Matrícules 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 si no s'ha presentat a les proves parcials ni a l'examen final.

Ús d'Intel·ligència Artificial: Amb la finalitat de garantir el desenvolupament autèntic dels vostres coneixements fonamentals i habilitats de resolució de problemes, no està permès l'ús d'eines d'IA generativa (com ara ChatGPT o plataformes similars) en aquesta assignatura. Específicament, queda estrictament prohibida l'assistència per IA en els exàmens, en la resolució dels exercicis de classe i en el projecte qualificat amb el simulador de processos. Tot el treball lliurat ha de ser completament propi.

Bibliografia

[Bibliografia](#) d'aquesta assignatura disponible a les biblioteques de la UAB a data 13/05/2026.

Llibres

- Koretsky, Milo D. (2013). Engineering and chemical thermodynamics. (2nd ed.) John Wiley Kore

& Sons

[Disponible](#) en paper a la biblioteca

- Moran, Michael J. (2011). Fundamentals of engineering thermodynamics. (7th ed.) Wiley Mor

[Disponible](#) en paper a la biblioteca

- Sandler, Stanley I. (2017). Chemical, biochemical, and engineering thermodynamics. (5th San

ed.) Wiley

[Disponible](#) en paper a la biblioteca

- Smith, J. M. [i altres]. (2022). Introduction to chemical engineering thermodynamics. (9th Smit ed.) McGraw-Hill Education

[Disponible](#) en paper a la biblioteca

- Smith, J. M. [i altres]. (2022). Introduction to chemical engineering thermodynamics. (9th Smit ed.) McGraw-Hill

[Disponible](#) en línia

Programari

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

Grups i idiomes de l'assignatura

La informació proporcionada és provisional fins al 30 de novembre.
A partir d'aquesta data, podreu consultar l'idioma de cada grup a través d'aquest [enllaç](#). Per accedir a la informació, caldrà introduir el CODI de l'assignatura

Tipus de docència	Grup	Idioma	Semestre	Torn
(TE) Teoria	21	Català	primer quadrimestre	matí-mixt
(PAUL) Pràctiques d'aula	211	Català	primer quadrimestre	matí-mixt
(SEM) Seminaris	211	Català	primer quadrimestre	matí-mixt
(PAUL) Pràctiques d'aula	212	Català	primer quadrimestre	matí-mixt
(SEM) Seminaris	212	Català	primer quadrimestre	matí-mixt