

MÓDULO	MATERIA	CURSO	SEMESTRE	CRÉDITOS	TIPO
TECNOLOGÍA ESPECÍFICA: QUÍMICA INDUSTRIAL	TERMODINÁMICA QUÍMICA APLICADA	2º	1º	6	Obligatoria
<b>PROFESOR(ES)</b>			<b>DIRECCIÓN COMPLETA DE CONTACTO PARA TUTORÍAS (Dirección postal, teléfono, correo electrónico, etc.)</b>		
<b>Germán Luzón González</b> <b>Antonio Martínez Férez</b> <b>Francisco Ríos Ruiz</b> <b>Alicia Ronda Gálvez</b>			Germán Luzón González, Dpto. Ingeniería Química, despacho nº15, 2ª Planta, Tfno. 958248844, german@ugr.es Antonio Martínez Férez, Dpto. Ingeniería Química, despacho nº12, 1ª Planta, Tfno. 958241581, amferez@ugr.es Francisco Ríos Ruiz, Dpto. Ingeniería Química, Despacho nº 5, 2ª Planta, rios@ugr.es Alicia Ronda Gálvez, Dpto. Ingeniería Química, Laboratorio nº 6, 1ª Planta, alirg@ugr.es		
			<b>HORARIO DE TUTORÍAS</b>		
			Consultar la web del Departamento		
<b>GRADO EN EL QUE SE IMPARTE</b>			<b>OTROS GRADOS A LOS QUE SE PODRÍA OFERTAR</b>		
Grado en Ingeniería Química			Grado en Ingeniería Electrónica Industrial, Grado en Ciencias Químicas y Grado en Ciencias Físicas como curso de aplicaciones prácticas de la Termodinámica Química.		
<b>PRERREQUISITOS Y/O RECOMENDACIONES (si procede)</b>					
Es recomendable tener cursadas las asignaturas Matemáticas I y II, Física I, Química Física Capacidad para leer y comprender textos en inglés científico, Principios de la Termodinámica, propiedades físico-químicas, cálculo diferencial e integral, álgebra de matrices y cálculo numérico.					
<b>BREVE DESCRIPCIÓN DE CONTENIDOS (SEGÚN MEMORIA DE VERIFICACIÓN DEL GRADO)</b>					
Cálculo y estimación de propiedades termodinámicas de sustancias puras. Propiedades Residuales. Propiedades Molares Parciales. Disolución ideal. Propiedades de Exceso. Cálculo de coeficientes de fugacidad. Cálculo de coeficientes de actividad. Cambios de entalpía en operaciones y procesos. Cálculo de composiciones de equilibrio entre fases en los diferentes sistemas que pueden presentarse en la industria química. Cálculo de composiciones de equilibrio químico.					



## COMPETENCIAS GENERALES Y ESPECÍFICAS

### Competencias generales

- CG2: Saber aplicar los conocimientos de Ingeniería Química al mundo profesional, incluyendo la capacidad de resolución de cuestiones y problemas con iniciativa, toma de decisiones, creatividad y razonamiento crítico.
- CG3: Adquirir la capacidad de reunir e interpretar datos relevantes dentro del área de la Ingeniería Química, así como de extraer conclusiones y reflexionar críticamente sobre las mismas.
- CG4: Saber transmitir información, ideas, problemas y soluciones relacionados con la Ingeniería Química, a un público tanto especializado como no especializado.
- CG5: Haber desarrollado las habilidades de aprendizaje necesarias para emprender estudios posteriores de especialización con un alto grado de autonomía.

### Competencias Generales Instrumentales:

- CI1: Capacidad de análisis y síntesis
- CI3: Comunicación oral y escrita en la lengua propia
- CI5: Resolución de problemas

### Competencias Generales Personales:

- CP1: Trabajo en equipo
- CP3: Habilidades en las relaciones interpersonales
- CP4: Razonamiento crítico

### Competencias Generales Sistémicas:

- CS1: Capacidad de aplicar los conocimientos en la práctica
- CS2: Aprender de manera autónoma
- CS4: Habilidad para trabajar de forma autónoma

### Competencias Específicas:

- CB1: Capacidad para la resolución de problemas matemáticos que puedan plantearse en Ingeniería Química.
- CB2: Comprensión y dominio de los conceptos básicos sobre las leyes generales de la termodinámica y su aplicación para la resolución de problemas propios de la ingeniería.
- CB3: Conocimientos básicos sobre el uso y programación de los ordenadores, sistemas operativos, bases de datos y programas informáticos con aplicación en ingeniería.
- CB4: Capacidad para comprender y aplicar los principios de conocimientos básicos de la química general, química orgánica e inorgánica y sus aplicaciones en la ingeniería.
- CR1: Conocimientos de termodinámica aplicada. Principios básicos y su aplicación a la resolución de problemas de ingeniería.

## OBJETIVOS (EXPRESADOS COMO RESULTADOS ESPERABLES DE LA ENSEÑANZA)

Que el estudiante sea capaz de calcular o estimar:

- Las propiedades termodinámicas de sustancias puras y disoluciones.
- Los cambios de entalpía en operaciones y procesos.
- Las composiciones de equilibrio entre fases y de equilibrio químico.

Así mismo, que sea capaz de

- Establecer la viabilidad termodinámica de un proceso.
- Comparar y seleccionar alternativas técnicas desde el punto de vista termodinámico.
- Realizar estudios bibliográficos y sintetizar resultados.
- Presentar sus trabajos por escrito.
- Trabajar en equipo.
- Presentar sus Trabajos de forma oral.

Y que adquiera la formación y herramientas necesarias para aprender por sí mismo los métodos utilizados en el tratamiento termodinámico de los sistemas no considerados en el Temario.



## TEMARIO DETALLADO DE LA ASIGNATURA

### TEMARIO TEÓRICO:

- Tema 1. Estudio termodinámico de sustancias puras. Cambio de las propiedades termodinámicas con la presión y la temperatura. Aplicación a un gas ideal. Cálculo de las propiedades termodinámicas de sustancias puras como gas ideal.
- Tema 2. Diagramas de fases de sustancias puras. Criterio de Equilibrio. Regla de las fases. Líneas de equilibrio de dos fases. Líneas de sublimación y vaporización. Descripción de los cambios de estado líquido-vapor. Ajuste de los datos de presiones de vapor.
- Tema 3. Ecuaciones de estado. Gas ideal. Factor de compresibilidad. Ecuaciones viriales de estado. Ecuaciones de estado cúbicas. Expresión única de las ecuaciones de estado cúbicas. Aplicación de las ecuaciones de estado.
- Tema 4. Propiedades residuales. Cálculo de las propiedades residuales. Cálculo de las propiedades termodinámicas de sustancias puras como fluidos reales.
- Tema 5. Propiedades termodinámicas de sistemas fluido homogéneos multicomponentes. Potencial químico. Propiedades molares parciales. Cálculo de las propiedades molares parciales. Fugacidad. Cálculo de los coeficientes de fugacidad.
- Tema 6. Mezcla de gases ideales. Disolución ideal. Propiedades de exceso. Energía de Gibbs molar parcial de exceso. Coeficientes de actividad. Actividad.
- Tema 7. Equilibrio Líquido-Vapor. Aplicación a mezclas binarias. Uso de expresiones de dos y tres parámetros para los coeficientes de actividad: Margules, van Laar, Wilson y NRTL. Aplicación a mezclas multicomponentes: método UNIFAC.
- Tema 8. Estudio estequiométrico de las reacciones químicas. Tratamiento general de la estequiometría química. Conversión del reactivo limitante y extensión de la reacción.
- Tema 9. Estudio termodinámico de las reacciones químicas. Cálculo de entalpías de reacción. Equilibrio químico en sistemas gaseosos. Cálculo de composiciones de equilibrio.
- Tema 10. Disoluciones de electrolitos. Coeficientes de actividad iónico medio y osmótico. Cálculo de coeficientes de actividad en disoluciones de electrolitos. Equilibrio químico en sistemas líquidos. Estimación de las de las composiciones de equilibrio.

### TEMARIO PRÁCTICO:

Seminarios/Talleres, Aula de Informática.

1. Cálculo propiedades como gas ideal y presiones de vapor de sustancias puras.
2. Aplicación de las Ecuaciones de Estado.
3. Cálculo de las propiedades termodinámicas de fluidos puros.
4. Equilibrio Líquido-Vapor. Aplicación a mezclas binarias.
5. Equilibrio Líquido-Vapor. Aplicación a mezclas multicomponentes.
6. Cálculo de composiciones de equilibrio químico en sistemas gaseosos.

### TRABAJOS PRÁCTICOS:

- Estudio bibliográfico de una sustancia pura (Individual, presentación por escrito).
- Análisis de un trabajo de investigación de determinación de propiedades termodinámicas (en grupo, presentación oral).

## BIBLIOGRAFÍA

### BIBLIOGRAFÍA FUNDAMENTAL:

- Smith, J.M., van Ness, H.C. y Abbott, M.M.: Introducción a la Termodinámica en Ingeniería Química, 7ª Ed. McGraw-Hill (2007) ISBN 9789701061473. BIBLIOTECA POLITÉCNICO. IQ/536 SMI int.
- Prausnitz, J.M., Lichtenthaler, R.N. y Gomes de Azevedo, E.: Termodinámica Molecular de los Equilibrios de Fases, 3ª ed., Prentice Hall (2000) BIBLIOTECA POLITÉCNICO. IQ/536 PRA ter.
- Kontogeorgis, G.M. y Folas, G.K.: Thermodynamic Models for Industrial Applications, John Wiley & Sons Ltd. (2010) BPOL/66.02 KON the.
- Perry, R.H. y Green, D.W.: Manual del Ingeniero Químico, 7ª Edición, McGraw-Hill (2001), ISBN 84-481-3008-1, BIBLIOTECA POLITÉCNICO IQ/66 PER. Vol. 1, parte 4.
- Gmehling, J., Kolbe, B., Kleiber, M. y Rarey, J. Chemical thermodynamics for process simulation, Wiley-VCH (2011), ISBN 9783527312771, BIBLIOTECA POLITÉCNICA, BPOL/536 CHE.
- Hougen, O.A., Watson, K.M. y Ragatz, R.A.: Principios de los Procesos Químicos, parte II: Termodinámica, Reverté (1982) ISBN 84-291-4052-2. BIBLIOTECA POLITÉCNICO. IQ/66.02 HOU pri.



- Costa Novella, E. y col.: Ingeniería Química, VOL. 4 y VOL. 5.1, ALHAMBRA (1988), ISBN 84-205-1704-6, (vol. 5), BIBLIOTECA FACULTAD DE CIENCIAS FCI/R 66 COS ing 4 y 5.1.

#### BIBLIOGRAFÍA COMPLEMENTARIA:

- Lide, D.R.(Editor): CRC Handbook of Chemistry and Physics, CRC Press, 83ª ed. (2002). BIBLIOTECA FACULTAD DE CIENCIAS FCI/54 CRC crc.
- Bruce E. Poling, John M. Prausnitz, John P. O'Connell: The Properties of Gases and Liquids, McGraw-Hill (2001), 5ª ed. BIBLIOTECA POLITÉCNICO. IQ/66 POL pro.
- David R. Lide and Henry V. Kehiaian: CRC Handbook of Thermophysical and Thermochemical Data, CRC Press (1994), ISBN: 0-8493-0197-1. BIBLIOTECA POLITÉCNICO. IQ/536 LID crc

#### ENLACES RECOMENDADOS

Plataforma docente <https://swad.ugr.es/?CrsCod=4856>

Biblioteca de la Universidad de Granada <http://biblioteca.ugr.es>

Octave <http://www.gnu.org/software/octave/>

Libros electrónicos de ingeniería <http://www.engineeringvillage.com/controller/servlet/Controller?CID=ebookSearch&database=131072>

Bases de datos:

NIST <http://webbook.nist.gov/chemistry/> Base de datos físico-químicos de sustancias puras

KDB <http://www.chem.org/kdb/> Base de datos físico-químicos de sustancias puras

#### METODOLOGÍA DOCENTE

- Sesiones académicas teóricas. CP4, CB2, CB4, CR1.
  - Sesiones académicas prácticas de resolución de problemas. CI5, CP4, CS1, CB1, CB2, CB4, CR1.
  - Seminarios de programación mediante MatLab/Octave. CG2, CI5, CP4, CS1, CB1, CB2, CB4, CR1.
  - Tutorías colectivas: Trabajos modelo.
  - Trabajos individuales y en subgrupos (3 estudiantes). CG2, CG3, CG4, CG5, CI1, CI3, CI5, CP1, CP3, CP4, CS4.
  - Tutorías especializadas mediante plataforma docente.
- Los Trabajos prácticos, individuales y en grupos, están diseñados para familiarizar al estudiante con los fundamentos y la aplicación del cálculo de las magnitudes termodinámicas necesarias en el desarrollo de procesos químico-industriales, al tiempo que aprenden a buscar los datos necesarios en la bibliografía actual y recursos electrónicos y se acostumbran al uso de los lenguajes de programación de alto nivel que permiten realizar estos cálculos con relativa facilidad. Además los trabajos en grupos pequeños les acostumbran a trabajar en equipo.



**PROGRAMA DE ACTIVIDADES**

Primer cuatrimestre	Temas del temario	Actividades presenciales, horas					Actividades no presenciales, horas				
		Sesiones teóricas	Sesiones prácticas	Exposiciones y seminarios	Exámenes	Etc.	Tutorías individuales	Tutorías colectivas	Trabajo individual del alumno	Trabajo en grupo	Etc.
Semana 1	1	2.0							4.0		
Semana 2	2	2.0	2.0						4.0		
Semana 3	3	2.0	2.0						4.0		
Semana 4	3	2.0	2.0						4.0		
Semana 5	4	2.0	2.0						4.0		
Semana 6	5	2.0	2.0						4.0		
Semana 7	5	2.0	2.0						4.0		
Semana 8	6	2.0	2.0						2.5	1.5	
Semana 9	7	2.0	2.0						2.5	1.5	
Semana 10	7	2.0	2.0						2.5	1.5	
Semana 11	8	2.0	2.0						2.5	1.5	
Semana 12	9	2.0	2.0						2.5	1.5	
Semana 13	9	2.0	2.0						2.5	1.5	
Semana 14	10	2.0	1.0						2.5	2.5	
Semana 15	10	2.0		2.0					2.5	2.5	
Semana 16									8.0		
Semana 17									8.0		
Semana 18									8.0		
Semana 19					3.0				4.0		
<b>Total horas</b>		30.0	25.0	2.0	3.0				76.0	14.0	



### **EVALUACIÓN (INSTRUMENTOS DE EVALUACIÓN, CRITERIOS DE EVALUACIÓN Y PORCENTAJE SOBRE LA CALIFICACIÓN FINAL, ETC.)**

El examen de curso (60 %), los Trabajos de prácticas (individual 15 %, en Grupo con presentación oral 15 %) y la evaluación de prácticas y seminarios (10 %) determinan la calificación por curso.

- Examen de curso, 3.5 horas, contará con cuestiones teóricas y ejercicios prácticos relacionados con el cálculo de propiedades termodinámicas de sustancias puras, coeficientes de fugacidad en mezclas gaseosas, coeficientes de actividad en mezclas líquidas, composiciones de equilibrio entre fases, composiciones de equilibrio químico.
- Dos trabajos prácticos, uno individual y otro en grupos de 3 estudiantes en los que se realizan los cálculos anteriores pero buscando los datos necesarios en la bibliografía o estimándolos, mediante la aplicación de métodos numéricos. Presentación por escrito de los mismos. Presentación oral del Trabajo en Grupo.
- Es obligatoria la asistencia al menos al 80% de las clases prácticas y a la presentación oral de Trabajos para obtener la calificación de estas actividades.
- Para superar la asignatura será necesario obtener al menos una calificación de 4 sobre 10 en el examen de curso.
- Examen extraordinario de septiembre: para los estudiantes que no han superado la asignatura permite reevaluar el examen de curso y el trabajo individual. El restante 20% de la calificación de esta convocatoria corresponderá a la calificación obtenida en el curso del trabajo en grupo, prácticas y seminarios.

Evaluación única final para aquellos estudiantes a los que se les haya concedido según la normativa de evaluación y calificación de los estudiantes de la UGR. Esta evaluación final constará de dos pruebas, una teórica y otra práctica en las que se valorarán las competencias desarrolladas en la asignatura. Los contenidos a evaluar corresponderán al temario detallado de la asignatura, tanto en la parte teórica como en la parte práctica. La parte práctica constará de dos pruebas, una escrita y otra oral.

### **INFORMACIÓN ADICIONAL**

Los cálculos prácticos de las propiedades termodinámicas de sustancias puras y disoluciones, de composiciones de equilibrio entre fases y de composiciones de equilibrio químico necesitan la utilización de métodos numéricos, cálculos iterativos y resolución de sistemas de ecuaciones no lineales, que deben realizarse mediante programas informáticos, pero una formación adecuada del alumno en su uso requiere una atención intensa por parte del Profesor que solo puede realizarse en grupos relativamente pequeños en un Aula de Informática durante las clases prácticas, máximo 10-20 alumnos.

