

MÓDULO	MATERIA	CURSO	SEMESTRE	CRÉDITOS	TIPO
TECNOLOGÍA ESPECÍFICA: QUÍMICA INDUSTRIAL	TERMODINÁMICA QUÍMICA APLICADA	2º	1º	6	Obligatoria
PROFESORES <sup>(1)</sup>			DIRECCIÓN COMPLETA DE CONTACTO PARA TUTORÍAS (Dirección postal, teléfono, correo electrónico, etc.)		
<ul style="list-style-type: none"> <li>• Germán Luzón González (teoría y prácticas)</li> <li>• Antonio Martínez Férez (problemas y prácticas)</li> <li>• Javier Miguel Ochando Pulido (problemas)</li> </ul>			Germán Luzón González, Dpto. Ingeniería Química, despacho nº15, 2ª Planta, Tfno. 958248844, <a href="mailto:german@ugr.es">german@ugr.es</a> . <a href="http://sl.ugr.es/german">http://sl.ugr.es/german</a> Antonio Martínez Férez, Dpto. Ingeniería Química, despacho nº12, 1ª Planta, Tfno. 958241581, <a href="mailto:amferez@ugr.es">amferez@ugr.es</a> . <a href="http://sl.ugr.es/amferez">http://sl.ugr.es/amferez</a> Javier M. Ochando Pulido, Dpto. Ingeniería Química, Laboratorio nº 7, 1ª Planta, <a href="mailto:jmochandop@ugr.es">jmochandop@ugr.es</a> . <a href="http://sl.ugr.es/jmochandop">http://sl.ugr.es/jmochandop</a>		
			HORARIO DE TUTORÍAS Y/O ENLACE A LA PÁGINA WEB DONDE PUEDAN CONSULTARSE LOS HORARIOS DE TUTORÍAS <sup>(1)</sup>		
			Miércoles de 8:30 a 12:30 horas, jueves de 11:30 a 13:30 horas (Profesor Germán Luzón González), lunes y jueves de 10 a 13 horas (Profesor Antonio Martínez Férez) y martes de 16:00 a 17:30 (Profesor Javier M. Ochando Pulido)		
GRADO EN EL QUE SE IMPARTE			OTROS GRADOS A LOS QUE SE PODRÍA OFERTAR		
Grado en Ingeniería Química			Grado en Ingeniería Electrónica Industrial, Grado en Ciencias Químicas, Grado en Biotecnología y Grado en Ciencias Físicas		

<sup>1</sup> Consulte posible actualización en Acceso Identificado > Aplicaciones > Ordenación Docente

(∞) Esta guía docente debe ser cumplimentada siguiendo la "Normativa de Evaluación y de Calificación de los estudiantes de la Universidad de Granada" (<http://secretariageneral.ugr.es/pages/normativa/fichasugr/ncg7121/>!)

<b>PRERREQUISITOS Y/O RECOMENDACIONES (si procede)</b>
<p>Es recomendable tener cursadas las asignaturas Matemáticas I y II, Física I, Química Física</p> <p>Tener conocimientos adecuados sobre:</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>• Capacidad para leer y comprender textos en inglés científico.</li> <li>• Principios de la Termodinámica, propiedades físico-químicas.</li> <li>• Cálculo diferencial e integral, álgebra de matrices y cálculo numérico.</li> </ul>
<b>BREVE DESCRIPCIÓN DE CONTENIDOS (SEGÚN MEMORIA DE VERIFICACIÓN DEL GRADO)</b>
<p>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.</p>
<b>COMPETENCIAS GENERALES Y ESPECÍFICAS</b>
<ul style="list-style-type: none"> <li>• CG01 - Poseer y comprender los conocimientos fundamentales en materias básicas y tecnológicas, que les capacite para el aprendizaje de nuevos métodos y teorías, y les dote de versatilidad para adaptarse a nuevas situaciones.</li> <li>• CG02 - 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.</li> <li>• CG03 - 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.</li> <li>• CG04 - Saber transmitir de forma oral y escrita información, ideas, problemas y soluciones relacionados con la Ingeniería Química, a un público tanto especializado como no especializado.</li> <li>• CG05 - Haber desarrollado las habilidades de aprendizaje necesarias para emprender estudios posteriores de especialización con un alto grado de autonomía.</li> <li>• CG08 - Trabajo en equipo</li> <li>• CB1 - Que los estudiantes hayan demostrado poseer y comprender conocimientos en un área de estudio que parte de la base de la educación secundaria general, y se suele encontrar a un nivel que, si bien se apoya en libros de texto avanzados, incluye también algunos aspectos que implican conocimientos procedentes de la vanguardia de su campo de estudio</li> <li>• CB2 - Que los estudiantes sepan aplicar sus conocimientos a su trabajo o vocación de una forma profesional y posean las competencias que suelen demostrarse por medio de la elaboración y defensa de argumentos y la resolución de problemas dentro de su área de estudio</li> <li>• CB3 - Que los estudiantes tengan la capacidad de reunir e interpretar datos relevantes (normalmente dentro de su área de estudio) para emitir juicios que incluyan una reflexión sobre temas relevantes de índole social, científica o ética</li> <li>• CB4 - Que los estudiantes puedan transmitir información, ideas, problemas y soluciones a un público tanto especializado como no especializado</li> <li>• CB5 - Que los estudiantes hayan desarrollado aquellas habilidades de aprendizaje necesarias para emprender estudios posteriores con un alto grado de autonomía</li> <li>• CE07 - Conocimientos de termodinámica aplicada y transmisión de calor. Principios básicos y su aplicación a la resolución de problemas de ingeniería.</li> </ul>



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

- Calcular o estimar las propiedades termodinámicas de sustancias puras y disoluciones.
- Calcular o estimar los cambios de entalpía en operaciones y procesos.
- Calcular o estimar las composiciones de equilibrio entre fases y de equilibrio químico.
- Establecer la viabilidad termodinámica de un proceso.
- Comparar y seleccionar alternativas técnicas desde el punto de vista termodinámico.
- Realizar, de forma individual o en equipo, estudios bibliográficos relacionados con la termodinámica química, sintetizar y presentar los resultados de forma oral o escrita.
- Adquirir formación y herramientas necesarias para aprender por sí mismo los métodos utilizados en el tratamiento termodinámico de los sistemas no considerados.

## 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 al gas ideal. Cálculo de las propiedades termodinámicas de sustancias puras como gas ideal. Estimación de propiedades termodinámicas.
- 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 fluidos 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 Vapor-Líquido. Aplicación a mezclas binarias. 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.

### 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.
5. 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.
- Gmehling, J., Kolbe, B., Kleiber, M. y Rarey, J. Chemical thermodynamics for process simulation, Wiley-VCH (2011), ISBN 9783527312771, BIBLIOTECA POLITÉCNICA, BPOL/536 CHE.
- Elliott, J.R., Lira, C.T. Introductory Chemical Engineering Thermodynamics, Second Edition. Prentice Hall (2012), ISBN 9780136068549, BIBLIOTECA CIENCIAS FCI/536 ELL int. Libro electrónico: <http://proquest.safaribooksonline.com/9780132788489>
- Perry, R.H. y Green, D.W.: Perry's chemical engineer's handbook, 8ª Ed. McGraw-Hill (2008), ISBN 9780071422949, BIBLIOTECA POLITÉCNICA BPOL/66 PER.

### BIBLIOGRAFÍA COMPLEMENTARIA:

- Kontogeorgis, G.M. y Folas, G.K. Thermodynamic Models for Industrial Applications, John Wiley (2010) BPOL/66.02 KON the.
- 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
- Ullmann's Encyclopedia of Industrial Chemistry, ISBN: 9783527306732, DOI: 10.1002/14356007, <http://onlinelibrary.wiley.com/book/10.1002/14356007>

## ENLACES RECOMENDADOS

Plataforma docente: <http://prado.ugr.es/moodle>

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

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

Bases de datos:

- NIST <http://webbook.nist.gov/chemistry/> Base de datos físico-químicos de sustancias puras
- KDB <http://www.thermochimie.org/kdb/> Base de datos físico-químicos de sustancias puras
- Chemeo <http://www.chemeo.com> Base de datos físico-químicos de sustancias puras

## METODOLOGÍA DOCENTE

- Lección magistral/expositiva. Competencias CE07, CG01, 30 horas presenciales.
- Resolución de problemas y estudio de casos prácticos o visitas a industrias. Competencias CG02, CG03, CG04, CG05, CG08, CB2, CB3, CB4, CB5. 13 horas presenciales
- Prácticas en ordenadores. Competencias CG02, CG03, CG04, CG05, CG08, CB2, CB3, CB4, CB5. 13 horas presenciales



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

### Convocatoria ordinaria:

- Examen de propiedades de sustancias puras (15%): cuestiones teóricas y ejercicios prácticos relacionados con el cálculo de propiedades termodinámicas de sustancias puras.
- Examen de curso (50%): cuestiones teóricas y ejercicios prácticos relacionados con el cálculo de propiedades termodinámicas, coeficientes de fugacidad, coeficientes de actividad en mezclas líquidas, composiciones de equilibrio entre fases, composiciones de equilibrio químico.
- Trabajo de estimación y cálculo de propiedades termodinámicas (10%)
- Trabajo en grupo con presentación oral (10%)
- Evaluación de prácticas y seminarios (15%).
- 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 los dos exámenes.

### Convocatoria extraordinaria:

- Examen escrito con cuestiones teóricas y ejercicios prácticos (80%)
- Evaluación de prácticas y seminarios (20%).

## DESCRIPCIÓN DE LAS PRUEBAS QUE FORMARÁN PARTE DE LA EVALUACIÓN ÚNICA FINAL ESTABLECIDA EN LA "NORMATIVA DE EVALUACIÓN Y DE CALIFICACIÓN DE LOS ESTUDIANTES DE LA UNIVERSIDAD DE GRANADA"

- Prueba teórica con cuestiones sobre propiedades termodinámicas de sustancias puras, ecuaciones de estado, coeficientes de fugacidad, coeficientes de actividad, composiciones de equilibrio entre fases y composiciones de equilibrio químico. (20%)
- Prueba práctica en la que se valorarán las competencias desarrolladas en la asignatura mediante la resolución de problemas. (40%)
- Prueba práctica de cálculo mediante ordenador de propiedades termodinámicas y composición de equilibrio entre fases utilizando Octave o Matlab. (20%)
- Prueba oral en la que se expondrá y discutirá un artículo de investigación sobre el cálculo de propiedades termodinámicas. (20%)

## 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. La adquisición adecuada de las competencias de la asignatura por los estudiantes requiere una atención intensa por parte del profesorado que solo puede realizarse en grupos relativamente pequeños en un aula de informática durante las clases prácticas, con un máximo de 15-20 estudiantes.

