

UNIVERSIDAD NACIONAL JOSÉ FAUSTINO SÁNCHEZ CARRIÓN
FACULTAD DE INGENIERÍA QUÍMICA Y METALURGICA
Escuela Académico profesional de Ingeniería Química
SÍLABO DE TERMODINÁMICA PARA INGENIEROS QUÍMICOS II

I. DATOS GENERALES:

Escuela Académico Profesional	:	INGENIERÍA QUÍMICA
Dirección de Departamento Académico	:	Ingeniería Química y Metalurgica
Ciclo Académico	:	VII
Créditos Académicos	:	3,0
Condición	:	Obligatorio
Horas Semanales	:	T= 2 P = 2 L = 0
Semestre Académico	:	2018-II
Docente	:	Dr. Carlos Miguel Chuquilin Terán
Código del Profesor	:	DNQ184

II. OBJETIVOS

El objetivo de la asignatura es alcanzar el conocimiento teórico de los principios abstractos (las leyes de la Termodinámica) a través de los conceptos fundamentales de la termodinámica de multicomponentes (potencial químico, fugacidad, actividad, etc.) y de las herramientas prácticas de uso más frecuente en la Ingeniería Química (modelos termodinámicos, ecuaciones de estado, etc.) en su aplicación mediante el análisis y el cálculo de estados de equilibrio de sistemas físicos fluidos de una o más fases para la resolución de problemas de equilibrio de fases y equilibrio químico.

III. METODOLOGÍA DE ENSEÑANZA

La metodología de desarrollo del curso se basa en el análisis fenomenológico de la manera más sencilla posible a fin de hacer más fácil la comprensión y dominio de los temas de la asignatura. Para esto los alumnos disponen de un material escrito relativo al contenido de las clases desarrolladas. Teniendo en cuenta la disponibilidad de este material las clases se desarrollan en forma de seminarios teórico-prácticos, de asistencia obligatoria y un horario complementario de consultas. Los alumnos profundizarán la comprensión de los conceptos teóricos a través de la resolución de problemas mediante el uso de Excel o de paquetes sencillos.

IV. CONTENIDO ANALITICO SEMANAL

SEMANA 1. Introducción a la Termodinámica de Sistemas de Composición Variable.

Revisión de las relaciones termodinámicas para un sistema de masa y composición constante.

Relaciones termodinámicas en sistemas de masa y composición variable. Potencial químico. Concepto físico del potencial químico. Trabajo reversible adicional y potencial químico en sistemas cerrados y abiertos.

SEMANA 2. Propiedades Molares parciales

Propiedades parciales en una base de moles y en base de masa. Relación entre la propiedad de estado extensiva y las correspondientes propiedades parciales. Interpretación física de una propiedad parcial. Cálculo de las propiedades molares parciales. Determinación gráfica de las propiedades parciales para mezclas binarias. Cambio de propiedad en el proceso de mezclado. Potencial químico como energía molar parcial de Gibbs. Relación entre el potencial químico y otras propiedades molares parciales. Efecto de la temperatura, presión y composición sobre la energía libre de Gibbs y el potencial químico. Relación de Gibbs-Duhem. Efecto de la composición sobre el potencial químico. Relaciones termodinámicas entre las propiedades molares parciales.

SEMANA 3. Mezclas de Gases Ideales

Desviación o discrepancia. Volumen molar parcial. Energía interna molar parcial. Entalpía molar parcial. Entropía molar parcial. Energía libre molar parcial de Gibbs o potencial químico. Propiedades parciales en base de masa para gases ideales.

SEMANA 4. Fugacidad y Energía Libre de Gibbs

Concepto de fugacidad. Fugacidad del componente en solución (fugacidad parcial) y potencial químico. Relación entre la fugacidad y la fugacidad parcial. Efecto de la presión y de la temperatura sobre la fugacidad. Variación de la fugacidad parcial con la composición. Cálculo del coeficiente de fugacidad a partir de ecuaciones de estado: a) de una mezcla o de un componente puro; b) de un componente en solución. Efecto de la presión y temperatura sobre la fugacidad.

SEMANA 5. Mezclas y Soluciones Ideales

Solución ideal de Lewis y Randall. Ley de Henry. Generalización de los modelos de mezclas ideales y definición del Estado Normal. Selección de las condiciones del Estado Normal. Propiedades molares parciales y cambio de propiedad en el proceso de mezclado en una mezcla ideal.

SEMANA 6. Actividad y Coeficiente de Actividad

Cálculo de propiedades termodinámicas en mezclas reales. Actividad y coeficiente de actividad. Relación entre actividades y coeficientes de actividad referidos a distintos Estados Normales y/o expresados en diferentes unidades de concentración. EN (y modelos ideales) más comunes. Selección del modelo ideal. Ley de Henry. Ley de Lewis y Randall. Relación entre los coeficientes de actividad referidos a las leyes de Henry y de Lewis y Randall. EN con presión distinta a la del sistema para sólidos y gases.

SEMANA 7. Examen parcial N° 1

SEMANA 8. Propiedades de Exceso y Coeficientes de Actividad.

Significado físico de las propiedades de exceso. Relación entre las propiedades de exceso. Relación entre el g de exceso y los coeficientes de actividad. Cálculo del g de exceso y coeficientes de actividad en mezclas binarias. Coeficientes de actividad a dilución infinita. Modelos: ecuación de Margules, Van Laar, Wilson, NRTL, UNIQUAC y otras. Modelos predictivos (UNIFAC y otras). Introducción a los criterios de

optimización. Expansión de Redlich-Kister. Consistencia termodinámica.

SEMANA 9. Ecuaciones de Estado para Mezclas.

Ecuaciones de estado para sustancias puras y para mezclas. Reglas de mezclado. Expresión general de las reglas de mezcla. Reglas de combinación. Reglas de mezclado para diferentes ecuaciones de estado. La ecuación del virial explícita en v y explícita en P . Ecuación virial truncada después del segundo término. Cálculo del coeficiente de compresibilidad dadas P , T de un sistema. Rango de aplicación de la ecuación virial. Correlaciones para el cálculo del segundo coeficiente virial B para mezclas y para componentes puros. Ecuaciones cúbicas de estado (ECE). Reglas de mezcla para ECE. Cálculo del coeficiente de fugacidad para sustancias puras y en solución: con la ecuación virial y con la ECE de Peng Robinson.

SEMANA 10. Criterios de Equilibrio

Definición del estado de equilibrio. Naturaleza del equilibrio. Ecuaciones en el equilibrio. Criterio general de equilibrio interno. Criterios restringidos de equilibrio. Equilibrio en un sistema cerrado homogéneo de composición variable.

SEMANA 11. Equilibrio de Fases en Sistemas de Multicomponentes

Deducción de las ecuaciones en el equilibrio a partir de las relaciones fundamentales. Propiedades intensivas, extensivas y específicas. Sistemas homogéneos y heterogéneos. Análisis de estados intensivos y extensivos. Regla de las fases - análisis de estados intensivos. Teorema de Duhem - análisis de estados extensivos.

SEMANA 12. Modelos Termodinámicos Para el ELV

Modelos de ecuaciones de estado y modelos de coeficientes de actividad. Compuestos livianos y pesados (relación de ELV K_i). Ecuaciones para el cálculo con el modelo de coeficientes de actividad. Ecuaciones simplificadas para el ELV. Ley de Raoult. ELV en condiciones moderadas.

SEMANA 13. ELV en Sistemas Binarios.

Representación gráfica tridimensional del ELV. Puntos de burbuja y puntos de rocío. Diagrama bidimensional P vs x, y a temperatura constante. Ley de Raoult en un sistema binario. Desviaciones de la ley de Raoult para sistemas a bajas presiones. Comportamiento azeotrópico. Diagramas a temperatura constante y a presión constante.

SEMANA 14. Esquemas de Cálculo

Modelos termodinámicos de ELV. Problemas tipo: Cálculo de Puntos de Burbuja y de Puntos de Rocío - estados intensivos. Cálculo de una Separación Flash - estados extensivos. Esquemas de cálculo en problemas de ELV. Cálculo de K_i con el modelo de ecuaciones de estado y de coeficientes de actividad. Esquemas de cálculo de ELV con lazo de iteración interno y sin lazo de iteración interno.

SEMANA 15. Análisis termodinámico de procesos

Cálculo del trabajo ideal . Trabajo perdido. Análisis termodinámico de procesos de flujo en estado uniforme.

SEMANA 16. Examen Parcial N° 2.

V. SISTEMA DE EVALUACION

La evaluación del estudiante en la asignatura es integral y permanente.

Criterios: Se consideran aspectos cognoscitivos, aptitudes, capacidad de análisis y creatividad.

Procedimientos: Evaluaciones escritas, expositivas y/o demostrativas; individuales y/o grupales.

Instrumentos: exámenes, trabajo de investigación, de ejecución; individuales y/o grupales según sea el caso.

Requisitos de Aprobación: Nota Final Aprobatoria mayor o igual a **ONCE (11)**. El criterio del medio punto o fracción superior a favor del estudiante, sólo será tomado en cuenta para obtener la Nota Final del curso. Asistencia obligatoria a clases, acumulación del 30 % de faltas se considerará **Desaprobado Por Inasistencia DPI (Nota Final CERO)**.

El **Examen Sustitutorio** será para los alumnos que tengan un promedio no menor de 07. El promedio final para dichos educandos no excederá la Nota **Doce** (Ref. Reglamento Académico).

Para el **Promedio Final**, usado escala vigesimal, se computara de acuerdo al Reglamento Académico vigente.

VI. BIBLIOGRAFIA

- Smith J.M., Van Ness H.C.(1979), Introducción a la Termodinámica en Ingeniería Química, Ed. Mc. Graw Hill, 5ta Ed.
- Balzhiser R.E., Samuels M.R. (1979), Termodinámica Química para Ingenieros, Ed. Prentice/Hall Internacional.
- Elliott, J.R., Lira C.T. (1999). Introductory Chemical Engineering Thermodynamics, Ed. Prentice Hall.
- Kyle, B.G.(1992). Chemical and Process Thermodynamics, 2nd Ed., Ed. Prentice Hall.
- Prausnitz J.M., Anderson T.F., Grens E.A., Eckert C.A., Hsieh R., O'Connell J.P.(1980). Computer Calculations for Multicomponent Vapor-Liquid and Liquid-Liquid Equilibria, Ed. Prentice Hall.
- Prausnitz J.M., Lichtenthaler R.N., Gomes de Azevedo E.(1986). Molecular Thermodynamics of Fluid Phase Equilibria, 2nd Ed., Ed. Prentice Hall.
- Sandler, S.I.(1989). Chemical and Engineering Thermodynamics, Ed. John Wiley & Sons, 2nd ed.

HUACHO, setiembre 2018

Prof. C.M. Chuquilin Terán.
