



FACULTAD DE CIENCIAS EXACTAS, FÍSICAS y NATURALES



Universidad
Nacional
de Córdoba

Asignatura: **Termodinámica Química**

Código: 10-09504

RTF

10

Semestre: Cuarto

Carga Horaria

96

Bloque: Tecnologías Básicas

Horas de Práctica

30

Departamento: Química Industrial y Aplicada

Correlativas:

Análisis Matemático 2

Fundamentos de los Procesos Químicos

Contenido Sintético:

- Conceptos básicos y primera ley de la termodinámica
- Propiedades volumétricas de fluidos puros
- Segunda ley de la termodinámica. Ciclo de potencia y refrigeración
- Propiedades termodinámicas de los fluidos
- Termodinámica de soluciones
- Equilibrio líquido-vapor (ELV) y equilibrio líquido-líquido (ELL)
- Principios del modelado y cálculo de equilibrio de fases
- Psicrometría

Competencias Genéricas:

CG 1. Competencia para identificar, formular y resolver problemas de ingeniería.

CG 4. Competencia para utilizar de manera efectiva las técnicas y herramientas de aplicación en ingeniería.

CG 10. Competencia para actuar con espíritu emprendedor.

Aprobado por HCD: 856-HCD-2023

RES: Fecha: 2/11/2023

Competencias Específicas:

CE1.1 Identificar , formular y resolver problemas relacionados a productos, procesos, sistemas, instalaciones y elementos complementarios correspondientes a la modificación física, energética, fisicoquímica, química o biotecnológica de la materia y al control y transformación de emisiones energéticas, de efluentes líquidos, de residuos sólidos y de emisiones gaseosas incorporando estrategias de abordaje, utilizando diseños experimentales cuando sean pertinentes, interpretando físicamente los mismos, definiendo el modelo más adecuado y empleando métodos apropiados para establecer relaciones y síntesis.

CE1.2 Diseñar , calcular y proyectar productos, procesos, sistemas, instalaciones y elementos complementarios correspondientes a la modificación física, energética, fisicoquímica, química o biotecnológica de la materia y al control y transformación de emisiones energéticas, de efluentes líquidos, de residuos sólidos y de emisiones gaseosas aplicando estrategias conceptuales y metodológicas asociadas a los principios de cálculo, diseño y simulación para valorar y optimizar , con ética, sentido crítico e innovador , responsabilidad profesional y compromiso social.

Presentación

Termodinámica Química es una actividad curricular que pertenece al segundo año (cuarto semestre) de la carrera de Ingeniería Química. A través del cursado de la asignatura el alumno comprenderá y asimilará contenidos de naturaleza predominantemente básica, particularmente asociados a los intercambios energéticos que acompañan a los procesos físicos y químicos, las propiedades volumétricas de los fluidos y el cambio sobre las mismas producidas por cambios impuestos por el entorno, el principio de funcionamiento de las máquinas térmicas y los procesos de producción de energía tradicionales, las propiedades de soluciones y los principios del equilibrio entre fases.

Estos contenidos son de gran importancia para abordar materias más avanzadas de la carrera, como Química-Física, Fenómenos de Transporte, Balances de Materia y Energía, Operaciones Unitarias I y II, Ingeniería de las Reacciones Químicas.

Particularmente, las unidades relativas al Equilibrio de Fases y Termodinámica de Soluciones, representan la diferencia más importante respecto a los programas usuales de Termodinámica para otras Ingenierías, debido a que abordan los distintos tipos de equilibrio de fases: líquido-vapor, líquido-líquido, etc. ya que en estos se basan las operaciones o procesos de separación, fundamentales para las industrias petroquímicas y químicas en general, como así también para comprender los procesos de contaminación y/o remediación ambiental.

Contenidos

Unidad 1. Conceptos básicos y primera ley de la termodinámica.

Consideraciones generales. Energía, trabajo, calor y temperatura. Unidades. Experimentos de Joule. Energía interna. La primera ley de la termodinámica. Estado termodinámico y funciones de estado. Equilibrio termodinámico. Procesos reversibles e irreversibles. Funciones de estado. Entalpía. Capacidad calorífica: su dependencia con la temperatura. Calores latentes. Experimento de Joule-Thomson. Aplicación de la primera ley a sistemas abiertos.

Unidad 2. Propiedades volumétricas de fluidos puros.

Diagramas PVT de sustancias puras. Diagramas PT y PV. Ecuaciones de estado viriales. El gas ideal como límite. Cálculo de procesos para gases ideales: procesos isotérmico, isobárico, isocórico, adiabático y politrópico. Ecuaciones de estado cúbicas: generalidades, relación entre parámetros y constantes críticas, estados correspondientes y factor acéntrico, raíces de vapor y líquido. Diagrama de Andrews y parámetros de las ecuaciones de estado. Correlaciones generalizadas para gases. Correlaciones generalizadas para líquidos

Unidad 3. Segunda ley de la termodinámica.

Planteamientos de la segunda ley. Máquinas térmicas. Escalas de temperatura termodinámica. Entropía. Cambios de entropía de un gas ideal. Cálculos de la variación de entropía en distintos procesos. Balance de entropía en sistemas abiertos. Cálculo del trabajo ideal. Trabajo perdido. La tercera ley de la termodinámica. Entropía desde el punto de vista microscópico. Algunos ciclos de potencia y refrigeración.

Unidad 4. Propiedades termodinámicas de los fluidos.

Energías de Gibbs y de Helmholtz. Relaciones entre propiedades termodinámicas. Evaluación de propiedades en fases homogéneas. Propiedades residuales. Las propiedades residuales a partir de ecuaciones de estado. Sistemas de dos fases. Ecuación de Clausius-Clapeyron. Diagramas termodinámicos. Tablas de propiedades termodinámicas. Correlaciones generalizadas de Lee-Kesler.

Unidad 5. Equilibrios líquido-vapor (ELV) y líquido-líquido (ELL).

Naturaleza del equilibrio de fases. Regla de las fases y Teorema de Duhem. Comportamiento cualitativo del ELV (tipo I). Diagramas Pxy, Txy y envolventes de fases. Puntos críticos. Azeotropía. Equilibrio líquido-líquido. Comportamiento de fases de tipo II. Ley de Raoult y su empleo para el cálculo de puntos de burbuja y rocío. Cálculo de vaporización instantánea. Ley de Henry. Ley de Raoult modificada.

Unidad 6. Termodinámica de soluciones.

El potencial químico y el equilibrio de fases. Propiedades molares parciales. Mezclas de gases ideales. Fugacidad y coeficientes de fugacidad de especies puras y en solución. Propiedades residuales en mezclas. Correlaciones generalizadas para el coeficiente de fugacidad. Solución ideal. Propiedades de exceso. Coeficientes de actividad. Propiedades de fase líquida a partir de los datos de equilibrio vapor/líquido. Propiedades de mezclado.

Unidad 7. Principios del modelado y cálculo de equilibrio de fases.

Formulación gamma-phi del EVL. Formulación gamma-gamma del ELL. Formulación phi-phi. Planteo de ecuaciones para el cálculo de equilibrios LV, LL, LLV. Fugacidad de fases fluidas a partir de ecuaciones de estado. Distintos tipos de ecuaciones de estado. Reglas de mezclado y reglas de combinación.

Unidad 8. Psicrometría

Definición de psicrometría y principal aplicación. Aire seco y atmosférico. Propiedades de una mezcla aire-vapor. Temperatura de bulbo seco y húmedo. Temperatura de saturación adiabática. Carta Psicométrica. Operaciones Aire-Agua.

Metodología de enseñanza

La carga horaria de la materia se distribuye entre tres tipos de clases:

Teóricas: el desarrollo teórico de los conceptos de la materia será realizado en dos modalidades: se proveerán videos a través del aula virtual de la materia y en una clase semanal se realizará un resumen y discusión de los mismos, a través de preguntas orientadoras, clases invertidas, debate y/o estudio de casos.

Resolución de problemas:

Con la asistencia y orientación de un Profesor, los alumnos abordan situaciones problemáticas, diseñando estrategias para su resolución y aplicando criterios para interpretar los resultados por él obtenidos, todo lo cual contribuye a una mejor comprensión de los conceptos y a desarrollar procedimientos. Además, se analizan e interpretan diagramas y ecuaciones abordadas en clases teóricas. La actividad será presencial.

Laboratorio

Con los trabajos experimentales de laboratorio, guiado por el Profesor Asistente a cargo, el alumno desarrolla habilidades específicas para el manejo de instrumental, armado de dispositivos e implementación de técnicas, a la vez que relaciona los conocimientos teóricos con el marco experimental.

Evaluación

La evaluación de la materia durante el cursado está integrada por dos (2) exámenes parciales con una (1) instancia de recuperación y un coloquio final integrador, además de la aprobación de los laboratorios.

Las evaluaciones parciales estarán integradas por contenidos teóricos y situaciones problemáticas. La calificación es integral y debe alcanzarse un mínimo de 60% para la aprobación.

Las evaluaciones parciales (2 más una instancia de recuperatorio) tienen carácter teórico-práctico, donde se evalúan desarrollos teóricos (con respuestas a Múltiple Opción, Respuesta Corta, Respuesta Extendida, Verdadero o Falso con justificación breve, etc.), tanto como resolución de ejercicios en proporciones iguales, del tipo a los desarrollados durante el cursado. Para consignar los resultados en las evaluaciones parciales se empleará porcentaje (%) en escala de 0 a 100, exigiéndose para la aprobación de cada examen un valor no inferior al 60%. Se consideran los siguientes aspectos:

En cuanto a los aspectos teóricos de los parciales se evaluará:

- Claridad conceptual: las respuestas a cada pregunta deben formularse de manera comprensible y sin suscitar dudas o ambigüedades.
- Pertinencia a la respuesta: responder de manera completa de acuerdo a lo que se solicita en cada una de las consignas.

- Capacidad de ejemplificación, en aquellos casos en que la consigna lo permita.

En cuanto a los aspectos prácticos de los parciales:

- Aplicación de procedimientos de resolución adecuados al problema planteado.
- Habilidad para elaborar conclusiones en forma sintética, criteriosa y creativa

Las actividades realizadas en el **laboratorio** se evaluarán mediante la presentación de informes y evaluaciones cortas escritas al inicio de cada práctico. Los **informes de laboratorio** desarrollados en grupo de 3-4 alumnos serán evaluados mediante la presentación de un informe escrito con presentación e interpretación de resultados, gráficos, conclusiones, observaciones generales etc. Asimismo, el docente a cargo evaluará el desempeño en las actividades del laboratorio y la participación activa en el desarrollo del mismo. Las evaluaciones escritas constarán de 1 o preguntas breves relacionadas a conceptos involucrados en el el trabajo práctico de la clase anterior. La valoración de estas actividades contribuye en un 10% de la nota final.

El coloquio integrador, al cual acceden aquellos alumnos en condición de promocionar la materia, consiste en una evaluación oral integral de todos los contenidos de la materia. En el mismo se hace hincapié en aquella parte de la materia donde el alumno mostró un desempeño menos satisfactorio (basado en las notas de los exámenes parciales), a los fines de corroborar que los mismos hayan sido fortalecidos. El desempeño en esta instancia de evaluación es considerado al momento de efectuar la calificación final del alumno respecto a la asignatura. Para esta instancia se podrá solicitar al estudiante la resolución de una situación problemática más compleja que las resueltas en las clases prácticas y evaluaciones parciales, relacionadas a casos reales de aplicación. Para ello se les brindará con anterioridad el problema y se los guiará en la resolución. Durante la evaluación oral, se deberán explicar los fundamentos y conceptos utilizados para el abordaje del problema y la resolución del mismo. Los profesores podrán hacer preguntas relacionadas a la temática expuesta y/o otros temas de la asignatura para comprobar la adquisición de los mismos.

La nota final de aprobación de la materia se establecerá de acuerdo a criterio integral combinando para ellos las calificaciones obtenidas en los puntos anteriores.

Condiciones de aprobación

1. Condiciones de Regularidad:

Para permanecer en la condición de alumno regular (una vez terminado el cursado) se requiere tener aprobado uno de los dos exámenes parciales con el 60% como mínimo. El 60% de la asistencia en clases teóricas, el 80% en la asistencia de clases prácticas y haber aprobado los trabajos de laboratorio.

La **aprobación de los laboratorios** en su conjunto implicará:

- a- Haber participado del 80 % de las fechas establecidas para los prácticos.
- b- Haber presentado y aprobado el 100 % de los informes de laboratorio.
- c- Tener la carpeta de trabajos prácticos completa y ordenada.
- d- Haber aprobado el 60 % de las evaluaciones escritas que se toman de manera previa a los prácticos.

El alumno tiene la posibilidad de recuperar el examen parcial desaprobado; en caso de no aprobar en esta instancia el alumno mantiene su condición de alumno regular.

El alumno regular debe rendir la TOTALIDAD de la materia en forma escrita, más el Examen Oral.

La regularidad tendrá una validez de 2 años, a partir de la fecha de finalización del semestre de cursado, de acuerdo con el Régimen de Alumnos. Cuando un alumno no haya aprobado ninguno de los 2 exámenes parciales queda en condición de libre.

Es un requisito indispensable para poder presentarse a examen haber aprobado los laboratorios, según lo antes dispuesto y la presentación de la libreta de trabajos prácticos firmada por el Profesor Asistente.

2. Condiciones de Aprobación:

La promoción sin examen final exige aprobar los dos exámenes parciales con el 60% como mínimo más un coloquio oral. El 60% de la asistencia en clases teóricas y el 80% en la asistencia de clases prácticas y aprobar los trabajos de laboratorio como ya se indicó.

En caso de que el alumno hubiera desaprobado ambos exámenes parciales en primera instancia, tiene la posibilidad de recuperar uno a elección, con el fin de alcanzar la regularidad.

El alumno que después de cursada la materia aprobó los dos parciales (con o sin recuperatorio) deberá presentarse y aprobar el coloquio final en la fecha indicada para completar la promoción de la materia. Si no lo hace, perderá la promoción de la asignatura.

Actividades prácticas y de laboratorio

Mediante la realización de los trabajos experimentales de laboratorio, guiado por el Profesor Asistente a cargo, el alumno desarrolla habilidades específicas para el manejo de instrumental, armado de dispositivos e implementación de técnicas, a la vez que relaciona los conocimientos teóricos con el marco experimental.

Los trabajos prácticos a desarrollar son:

- 1- Aplicación de las mediciones de temperatura y de presión: leyes de los gases ideales.
- 2- Equivalencia calor-trabajo.
- 3- Determinación experimental de capacidades caloríficas.
- 4- Determinación del C_p y C_v del aire a partir del coeficiente adiabático.
- 5- Determinación de la masa molecular relativa de sustancias gaseosas.
- 6- Determinación de la presión de vapor y de la entalpía de vaporización de un líquido.
- 7- Determinación de propiedades molares parciales.

Desagregado de competencias y resultados de aprendizaje

Competencia genérica	El estudiante...
CG 1. Competencia para identificar, formular y resolver problemas de ingeniería.	<ul style="list-style-type: none"> • Analiza situaciones donde se produzcan intercambios de energía entre el sistema y el entorno. • Selecciona las ecuaciones para el cálculo de trabajo, calor, propiedades volumétricas de los fluidos, composiciones y coeficientes de partición. • Analiza diferentes escenarios de equilibrio entre fases (líquido-líquido; sólido-líquido, etc) para un compuesto puro o entre dos o más sustancias.
CG 4. Competencia para utilizar de manera efectiva las técnicas y herramientas de aplicación en ingeniería.	<ul style="list-style-type: none"> • Evalúa las diferentes alternativas de cálculo de intercambios de energía, propiedades volumétricas y equilibrio entre fases. • Analiza la información disponible y selecciona la herramienta más adecuada. • Interpreta los resultados que se obtienen de la aplicación de las diferentes metodologías de cálculo.
CG 10. Competencia para para actuar con espíritu emprendedor.	<ul style="list-style-type: none"> • Utiliza las diferentes herramientas brindadas por la asignatura (resolución de situaciones problemáticas,

	<p>trabajo en equipo, discusión de resultados) para desarrollar procesos de creación de ideas y soluciones valiosas y toma decisiones, de manera razonada, y reflexiona sobre el proceso realizado y el resultado obtenido, para llevar a término el proceso de creación y mejoras de procesos que involucran intercambio de energía y/o equilibrio entre fases.</p>
--	--

Competencias específicas	El estudiante...
<p>CE1.1.1 Conocer, interpretar, modelar y representar el comportamiento de sistemas fisicoquímicos a través de las variables para resolver situaciones problemáticas con sentido crítico y responsabilidad.</p>	<ul style="list-style-type: none"> • Analiza situaciones donde se produzcan intercambios de energía entre el sistema y el entorno • Evalúa y calcula los intercambios de energía, propiedades volumétricas y escenarios de equilibrios entre fases de un sistema frente a cambios en el entorno. • Interpreta los resultados obtenidos.
<p>CE1.1.4 Formular, nombrar, cuantificar y representar estructuras químicas y sus propiedades.</p>	<ul style="list-style-type: none"> • Relaciona la estructura química de las sustancias con sus propiedades termodinámicas (temperaturas y presión de cambio de fase, miscibilidad, etc)
<p>CE1.1.6 Interpretar los modelos computacionales descritos a través de un lenguaje de programación.</p>	<ul style="list-style-type: none"> • Utiliza herramientas computacionales y de programación para resolver problemas que involucran equipos específicos, o ciclos de potencia y el equilibrio entre fases en los mismos tanto para

	sustancias puras como para mezclas.
CE1.2.1 Utilizar técnicas e instrumental de laboratorio pertinentes para identificar sustancias y evaluar cambios cuali y cuantitativos de la materia y la energía respetando los procedimientos operativos y reestablecidos, normas de seguridad y disposición de residuos, contemplando el uso eficiente de recursos y energía.	<ul style="list-style-type: none"> • Aplica instrumental de laboratorio para determinar propiedades termodinámicas medibles (temperatura, presión, volumen). • Relaciona las magnitudes medibles con flujos de energía, propiedades volumétricas, propiedades de mezcla y otras propiedades termodinámicas. • Utiliza los elementos de protección personal y realiza las actividades propuestas en el marco de normas de seguridad en el laboratorio.

Bibliografía

- Smith, Van Ness y Abbot. Introducción a la Termodinámica en Ingeniería Química. 7ma edición en castellano. Mc Graw-Hill. 2007.
- Elliott y Lira. Introductory Chemical Engineering Thermodynamics. 2nd Edition. Pearson, 2012.
- Poling, Prausnitz y O'Connell The properties of gases and liquids. McGraw-Hill, 2001.
- Deiters y Kraska. High-Pressure Fluid Phase Equilibria. Phenomenology and Computation. Elsevier, 2012.