# 1. IDENTIFICACION.

Materia: TERMODINAMICA QUIMICA.

Códigos: SIRE: 6007 EIQ: IQ-5035

Prelación: IQ-5034, IQ-5014 Ubicación: Quinto Semestre

TPLU: 3-2-0-4 Condición: Obligatoria.

Departamento: Química Industrial y Aplicada

### 2. JUSTIFICACION.

La Termodinámica es una disciplina fundamental para la formación del ingeniero químico porque permite entender como ocurren los procesos y las leyes que gobiernan su comportamiento. Esta disciplina predice la factibilidad y eficiencia de las transformaciones naturales y dota al ingeniero de un conjunto de herramientas útiles para el análisis y diseño de procesos a escala macroscópica en estado estacionario.

# 3. REQUERIMIENTOS.

Para comprender la materia se requiere conocimientos generales de cálculo como ecuaciones diferenciales exactas, fundamentos de física, química y balances de materia y energía.

### 4. OBJETIVOS.

## GENERALES.

- Lograr que los estudiantes comprendan y apliquen las leyes de Termodinámica en diferentes sistemas.
- Familiarizar a los estudiantes con las aplicaciones más notables en Ingeniería Ouímica.
- Resolver problemas enfatizando la utilización de balances de masa, energía y entropía en sistemas de interés.

#### ESPECIFICOS.

- En relación al Capitulo 1 la intención es discutir los conceptos básicos de la termodinámica, diagramas tridimensionales PVT y ecuaciones de estado.
- Referente al Capitulo 2 el objetivo especifico es la presentación de la primera ley de termodinámica en conexión con balances de energía y materia. Se aplicará en

sistemas cerrados y abiertos de interés en la Ingeniería Química con sustancias ideales y reales.

- En cuanto al Capitulo 3 se dará a conocer principalmente la segunda ley de termodinámica mostrando aplicaciones de ingeniería en sustancias ideales y reales en configuraciones cerradas y abiertas. Aquí se resaltará el concepto de entropía y se enunciará la tercera y la ley cero.
- El objetivo del Capitulo 4 es discutir las relaciones matemáticas existentes entre las leyes de termodinámica mostrando la energía libre de Gibbs, Helmholtz, potencial químico, fugacidad, actividad coeficiente de fugacidad y actividad.
- En conexión con el Capitulo 5 la intención es la aplicación de las leyes, de termodinámica en procesos involucrado mezclas gaseosas y liquidas binarias.
- Respecto al Capitulo 6 el objetivo es la aplicación de las leyes de termodinámica en sistemas con reacción química enfatizando la estimación la constante de equilibrio en diferentes situaciones homogéneas y heterogéneas.

### 5. CONTENIDO PROGRAMATICO

#### CAPITULO 1. CONCEPTOS BASICOS

Enfoque Sistémico. Sistemas cerrados y abiertos. Propiedades y estados de un sistema, cambios de estado, trayectorias, procesos. Reversibilidad e irreversibilidad. Equilibrio y estabilidad. Diagramas Termodinámicos PVT. Visualización tridimensional. Sustancias ideales y reales. Ecuaciones de Estado. Gases reales. Versiones empleadas en simuladores de procesos R-K-S-.

### CAPITULO 2. PRIMERA LEY DE TERMODINAMICA

Interconversión de energía. Tipos de energía. Energía interna, potencial y cinética. Energías en transición: calor, trabajo. Estimación de la energía interna en sistemas ideales y reales. Discrepancia de energía interna. Entalpia y Discrepancia de entalpia. Formulaciones empleadas en simuladores. Balances energéticos en sistemas cerrados y abiertos. Efecto Joule Thomson. Diagramas H-P, V-T, H-T. Problemas.

#### CAPITULO 3. LA SEGUNDA LEY DE TERMODINAMICA

Postulado de Clausius Kelvin-Planck. El ciclo de Carnot. Desigualdad de Clausius. Entropía. Estimación de entropía en sustancias ideales y reales. Discrepancia de entropía. Producción de entropía interna. Balances entrópicos en sistemas cerrados y abiertos. Diagramas T-S, S-H. Aplicaciones. Tercera y Ley Cero de Termodinámica.

#### CAPITULO 4. RELACIONES ENTRE LAS LEYES TERMODINAMICAS

Energía libre de Gibbs y Helmholtz. Potencial químico, fugacidad, coeficiente de fugacidad, actividad, coeficiente de actividad. Aplicaciones en sustancias reales.

#### CAPITULO 5. TERMODINAMICA DE MEZCLAS

Estimación de propiedades de mezclas ideales y reales. Energía libre de Gibbs de mezcla. Ecuación de Gibbs-Duhem. Propiedades parciales molares. Funciones de mezcla. Funciones exceso. soluciones ideales y reales. Evaluación de coeficientes de actividad y fugacidad en mezclas gaseosas y líquidos. Modelos empleados en simuladores. Aplicación en el equilibrio líquido-vapor de sistemas binarios. Diagramas. Consistencia de datos Termodinámicos. Balances energéticos y entrópicos. Entalpía de mezclas y Diagramas

# CAPITULO 6. TERMODINAMICA DE LA REACCION QUIMICA

La reacción química. Grado de avance o extensión de reacción. Balance de masa, energía y entropía en sistemas termodinámicos abiertos o cerrados con reacción química. Factibilidad de ocurrencia en las reacciones químicas. Reacciones endotérmicas y exotérmicas. Equilibrio de reacciones químicas. Constante de equilibrio de las reacciones químicas. Efecto de la temperatura sobre la constante de equilibrio. Diagramas de conversión en el equilibrio en función de la temperatura. Equilibrio en sistemas homogéneos y heterogéneos. Aplicaciones.

### 6. METODOLOGIA.

El curso de termodinámica consiste de clases teóricas y practicas en las cuales se imparten los conocimientos y técnicas necesarias para resolver situaciones y problemas asociados con la termodinámica y la Ingeniería Química.

Para lograr que los estudiantes adquieran una percepción física de los conceptos impartidos se presenta una sesión de laboratorio demostrativa en la tercera semana del curso donde se muestran los aparatos necesarios para medir las variables PVT y experimentos sencillos. Allí se presentan manómetros, termómetros, medidas volumétricas, maquetas de diagramas tridimensionales típicos y se exhiben procesos simples en turbinas, compresores, bombas, calorímetros, reactores y otros sistemas.

Otro aspecto que se ha venido implementando es la utilización del computador para resolver problemas en termodinámica.

### 7. RECURSOS.

Tiza, marcadores, pizarrón, laboratorio y computadores.

### 8. EVALUACION.

Los estudiantes son evaluados periódicamente mediante la presentación de 4 ó 5 exámenes y la realización de tareas consistentes de problemas y otras asignaciones como montaje de experimentos sencillos, presentación de programas computacionales y proyectos particulares de interés termodinámico.

Las tareas y asignaciones especiales se evalúan y tiene el equivalente de un examen adicional. En lo posible se trata de realizar una evaluación integral y continua.

# 9. BIBLIOGRAFIA.

Smith J. M. y Van Ness H. C. "Termodinámica para Ingeniería Química". Mc. Graw Hill, New York, 1990.

Balzhiser E. R. Samuels R. Eliasser J. D. "Termodinámica". Prentice Hall, New York, 1972.

Van Wylen G. J. y Sonntag R. E. "Fundamento de Termodinámica Clásica". John Wiley New York, 1965.

Sandler S. I. "Termodinámica de la Ingeniería Química", John Wiley, New York, 1966.

Sherwood - Reid - Praussnitz. "Propiedades de Gases y Líquidos", Mc. Graw Hill, New York, 1966.

Belandria J. I. "Termodinámica: Historia Leyes y Reflexiones", Facultad de Ingeniería, U.L.A. 1996.

Holmer. "Thermodynamics" Mc. Graw Hill, 3<sup>era</sup> Edición, 1980.

## 10 VIGENCIA:

Desde: Semestre B-2001.