Termodinámica Avanzada

Modalidad de dictado: Curso teórico-práctico

Carácter: Obligatoria

Objetivos

La materia se enfoca fuertemente en el logro de los siguientes objetivos: (a) comprender los diagramas de fases de compuestos puros y de sistemas binarios, ternarios y multicomponente; (b) comprender la estructura de los modelos y métodos de cálculo que se utilizan para predecirlos; (c) aplicar apropiadamente programas de cómputo del equilibrio entre fases a problemas diversos. El curso se distingue del de termodinámica de grado, entre otras cosas: (i) por considerar el enfoque sistemático para el estudio del comportamiento de fases basado en los llamados mapas característicos del equilibrio entre fases, y su conexión con diagramas restringidos (isotermas, isobaras, isopletras); y, (ii) por considerar herramientas robustas para el cómputo riguroso del equilibrio entre fases, como es el test de estabilidad global basado en la función “distancia con respecto al plano tangente”. En otras palabras, en el curso se intenta que el estudiante profundice significativamente los conocimientos en termodinámica. El docente a cargo realiza su trabajo de investigación en el área de Equilibrio entre Fases, lo que permite incorporar al curso una visión actualizada sobre esta área de trabajo.

Carga horaria semanal

6 horas semanales de dictado de clases de teoría y práctica, y aproximadamente 2.5 horas de actividades autónomas por parte de los alumnos.

CARGA TEORICA: 44 horas

CARGA PRÁCTICA: 56 horas

Objetivos

Los objetivos del curso Termodinámica Avanzada son los siguientes:

- Entender cómo es posible minimizar el esfuerzo experimental, aprovechando las relaciones exactas entre propiedades del fluido o material de interés, provistas por la Termodinámica.
- Repasar el primer principio de la Termodinámica y estudiar una formulación muy general del 2do principio.
- Estudiar el comportamiento de las propiedades de los fluidos.
- Estudiar y comprender las diversas formas en que se modelan las fugacidades de las especies químicas, sea en estado de pureza, en mezclas fluidas o en sólidos; y la aplicación en cálculos de equilibrio entre fases y/o equilibrios químicos.
- Estudiar el test de estabilidad basado en la función “distancia con respecto al plano tangente”.
- Entender los criterios que permiten distinguir entre fluidos estables, metaestables, intrínsecamente inestables y globalmente no estables.
- Comprender los diagramas de fases que involucran principalmente a fases fluidas de sistemas binarios, ternarios y multicomponente.

- Estudio limitado de diagramas de fases involucrando fases sólidas.
- Uso de bases de datos termodinámicos
- Uso de programas de cómputo de mapas característicos del equilibrio entre fases, y de programas para cálculos más convencionales como isotermas, isobaras, isopletas y flashes multifásicos.

Contenidos

Los contenidos de la asignatura Termodinámica Avanzada son los siguientes:

CAPITULO I

Equilibrio líquido-vapor. Curva de Presión de vapor .

Regla de las fases. Diagramas de fases para sistemas binarios bajo equilibrio líquido-vapor, líquido-líquido, gas-líquido, sólido – fluido , etc.

Envolturas de fases. Diagramas globales.

Equilibrio en sistemas multicomponente a alta presión. Ejemplos.

CAPITULO II:

Variables termodinámicas, variables intensivas, extensivas y de campo.

Funciones de estado.

Relaciones termodinámicas.

Balances de energía y entropía.

Criterios de equilibrio y estabilidad.

Ecuación de Clausius-Clapeyron.

CAPITULO III:

Propiedades de Fluidos puros.

Presión de vapor y factor de compresibilidad. Correlaciones.

CAPITULO IV:

Ecuaciones de estado: virial, cúbicas, multiparamétricas.

Curva espinodal.

CAPITULO V:

Funciones termodinámicas a partir de relaciones PVT o de la función de Helmholtz. Cálculo de funciones residuales.

CAPITULO VI:

Propiedades termodinámicas de mezclas. Diagramas de fases.

Reglas de combinación y reglas de mezclado clásicas.

CAPITULO VII:

Cálculo del Equilibrio entre fases. Criterio de isofugacidad.

CAPITULO VIII:

Cálculo del Equilibrio entre fases con ecuaciones de estado.

Ajuste de parámetros binarios.

Estabilidad termodinámica.

CAPITULO IX:

Funciones de exceso y coeficientes de actividad.

Modelos para la energía de Gibbs de exceso.

Cálculo de equilibrio v-l con funciones de exceso.

CAPITULO X:

Equilibrio L-L en modelos de coeficientes de actividad.

Equilibrio sólido-líquido.

CAPITULO XI:

Enfoques modernos en el modelado termodinámico utilizando ecuaciones de estado.

Bibliografía

La bibliografía utilizada/sugerida es la siguiente:

Introduction to Chemical Engineering Thermodynamics, 8th edition. Mcgraw-Hill. J.M. Smith, Hendrick C Van Ness, Michael Abbott and Mark Swihart (2019)

Stanley I. Sandler. Chemical, Biochemical, and Engineering Thermodynamics, 5th Edition (2017)

Phase behavior of petroleum reservoir fluids. Second edition. Karen Schou Pedersen; Peter Lindskou Christensen; Jawad Azeem Shaikh. CRC Press, Boca Raton, FL (2015)

Elliott R., Lira, C.T. (2012) Introductory Chemical Engineering Thermodynamics (Prentice Hall International Series in the Physical and Chemical Engineering Sciences). New Jersey.

E.A. Brignole, S. Pereda. Volume 3: Phase Equilibrium Engineering, 1st Edition. Print Book. Expected Release Date: 12 Jun 2013. Imprint: Elsevier. ISBN: 978-0-444-56364-4.

Kontogeorgis, G.M.; Folas, G.K. Thermodynamic Models for Industrial Applications: From Classical and Advanced Mixing Rules to Association Theories. Wiley (2009)

Thermodynamics: Fundamentals for Applications (Cambridge Series in Chemical Engineering) by J. P. O'Connell and J. M. Haile (2005)

B.E. Poling, J.M. Prausnitz, J.P. O'Connell "The Properties of Gases and Liquids", 5th Edition, McGraw-Hill, New York (2001)

R. Koningsveld, W.H. Stockmayer, E. Nies, Polymer Phase Diagrams, Oxford University Press, Oxford, NY, 2001.

J.M. Prausnitz, R.N. Lichtenthaler, E. Gomes de Azevedo. Molecular Thermodynamics of Fluid-Phase Equilibria (3rd Edition) (Prentice Hall International Series in the Physical and Chemical Engineering Sciences) (1998)

PVT and phase behaviour of petroleum reservoir fluids. Danesh A., Elsevier. Amsterdam (1998)

Models for Thermodynamic and Phase Equilibria Calculations (Chemical Industries) by Stanley I. Sandler (1993)

Varias Tesis Doctorales del Grupo de Termodinámica de Procesos de PLAPIQUI y artículos de la literatura.