

NAZIV KOLEGIJA: Kemijskoinženjerska termodinamika		
NAZIV STUDIJA/STUDIJSKOG PROGRAMA: Kemijsko inženjerstvo		
GODINA STUDIJA: 2	SEMESTAR: 4	
PREDMETNI NASTAVNIK/NASTAVNICI: Marko Rogošić		
DA LI KOLEGIJ MOŽETE PREDAVATI NA ENGLESKOM ILI NA JEDNOM OD SLUŽBENIH JEZIKA EU engleski jezik		
OBLIK NASTAVE	SATI TJEDNO	IZVODAČ NASTAVE (<i>upisati nastavnik ili asistent</i>)
predavanja	3	Marko Rogošić, nastavnik
vježbe	1	Marko Rogošić, nastavnik i Kristina Zagajski-Kučan, asistent
seminar	1	Kristina Zagajski-Kučan, asistent
Terenska nastava (dana)		
<p>CILJ KOLEGIJA: U okviru ovog kolegija studenti ovladavaju primjenom osnovnih termodinamičkih zakona i matematičkih metoda pri rješavanju kemijsko inženjerskih zadataka: procjene termodinamičkih svojstava čistih tvari, smjese i otopina, proračuna fazne ravnoteže, proračuna kemijske ravnoteže. Također, studenti upoznaju osnove termodinamike neravnotežnih i nepovrativih procesa.</p>		
<p>IZVEDBENI PROGRAM KOLEGIJA (<i>razraditi ih što preciznije prema nastavnim tjednima</i>):</p> <p>1. Tjedan</p> <p><u>Uvod u termodinamiku realnih sustava</u> – što je termodinamika i čime se bavi, podjela termodinamike, program kolegija, potrebna predznanja, osnovni pojmovi: termodinamički sustavi, veličine, parametri faze, stanja, procesi, zakoni termodinamike,</p> <p><u>Volumetrijska svojstva realnih fluida</u> – pT-dijagram, Gibbsovo pravilo faza, opća plinska jednadžba, odstupanja od idealnosti, koeficijent kompresibilnosti, Joule-Thomsonov koeficijent, ukapljivanje realnog plina</p> <p><u>Volumetrijska svojstva realnih fluida</u> – međudjelovanja čestica plina, Lennard-Jonesov potencijal, virijalna jednadžba, Boyleova temperatura, BWR jednadžba</p> <p><u>Seminar</u> – upoznavanje s programom računskih seminara, laboratorijskih vježbi i izrade seminarskih zadataka na računalima (Rogošić, Zagajski-Kučan)</p> <p><u>Seminar</u> – zadaci: volumetrijska svojstva realnih fluida (Zagajski-Kučan)</p> <p>2. Tjedan</p> <p><u>Volumetrijska svojstva realnih fluida</u> – van der Waalsova jednadžba, parametri, rad ukapljivanja, ravnotežni tlak, načela korespondentnih stanja i termodinamičke sličnosti, kritični koeficijent kompresibilnosti, Pitzerov koeficijent acentričnosti, Lee-Keslerova korelacija</p> <p><u>Volumetrijska svojstva realnih fluida</u> – jednadžbe stanja trećeg stupnja, Redlich-Kwong, Soave-Redlich-Kwong, Peng-Robinson, izračunavanje pVT-svojstava, usporedba jednadžbi, plinske smjese</p> <p><u>Termodinamička svojstva realnih fluida</u> – toplinske tablice i dijagrami, konstrukcija ph i sT-dijagrama, funkcije odstupanja, načela korespondentnih stanja i termodinamičke sličnosti, Yen-Alexandrova i Lee-Keslerova korelacija za entalpiju i entropiju</p> <p><u>Seminar</u> – zadaci: volumetrijska svojstva realnih fluida (Zagajski-Kučan)</p>		

[Seminar – zadaci: volumetrijska svojstva realnih fluida, priprema 1. računalne vježbe \(Rogošić, Zagajski-Kučan\)](#)

3. Tjedan

Termodinamička svojstva realnih fluida – fugacitivnost i koeficijent fugacitivnosti, fugacitivnost kao funkcija odstupanja, izračunavanje Gibbsove energije iz fugacitivnosti, ovisnost fugacitivnosti o tlaku i temperaturi, fugacitivnost i načela korespondentnih stanja i termodinamičke sličnosti

Termodinamika realnih otopina – definicija idealne otopine, volumen, entalpija i entropija miješanja, uzroci neidealnosti realnih otopina

Termodinamika realnih otopina – parcijalne molarne veličine u dvo- i višekomponentnim realnim sustavima, Gibbs-Duhemova jednadžba, parcijalna fugacitivnost i parcijalni koeficijent fugacitivnosti, veličine miješanja, eksces veličine

[Seminar – zadaci: termodinamička svojstva realnih fluida \(Zagajski-Kučan\)](#)

[Vježbe na računalima – jednadžbe stanja realnih plinova \(Rogošić, Zagajski-Kučan\)](#)

4. Tjedan

Termodinamika realnih otopina – aktivnost i koeficijent aktivnosti, standardna stanja čistog plina, kapljevine i krutine te komponenti plinskih i kapljevitih smjesa, Poyntingov faktor, Lewis-Randallovo pravilo, beskonačno razrijeđena otopina, Henryjev zakon za realne otopine

Termodinamika realnih otopina – određivanje parcijalnih molarnih veličina metodama presjeka, tangente, prividnih molarnih veličina, te primjenom Gibbs-Duhemove jednadžbe, veza Gibbsove energije, aktivnosti i koeficijenta aktivnosti

Modeli koeficijenta aktivnosti – modeli koeficijenta aktivnosti: Margules, red potencija, Van Laar, Wohl, regularne i atermalne otopine, Scatchard-Hildebrand; Flory-Hugginsov parametar međudjelovanja, parametar topljivosti, određivanje parametara modela

[Seminar – zadaci: termodinamička svojstva realnih fluida \(Zagajski-Kučan\)](#)

[Vježbe na računalima – jednadžbe stanja realnih plinova \(Rogošić, Zagajski-Kučan\)](#)

5. Tjedan

Modeli koeficijenta aktivnosti – modeli koeficijenta aktivnosti: Wilson, Tsuboka-Katayama, Hiranuma, NRTL, UNIQUAC; modeli strukturno-grupnih doprinosa: ASOG, UNIFAC

Rekapitulacija – termodinamika realnih otopina i modeli koeficijenta aktivnosti, priprema za provjeru znanja

[Seminar – zadaci: termodinamika realnih otopina \(Zagajski-Kučan\)](#)

[Vježbe na računalima – jednadžbe stanja realnih plinova \(Rogošić, Zagajski-Kučan\)](#)

6. Tjedan

1. provjera znanja – volumetrijska svojstva realnih fluida, termodinamička svojstva realnih fluida, termodinamika realnih otopina, modeli koeficijenta aktivnosti

Termodinamička ravnoteža – uvjeti ravnoteže u izoliranim i zatvorenim sustavima, uvjeti stabilnosti sustava, reakcijski sustavi, termodinamička interpretacija Le Chatelierovog načela

Ravnoteža para–kapljevine – uvjet ravnoteže preko kemijskih potencijala i parcijalnih fugacitivnosti, opis neidealnosti faza pomoću jednadžbi stanja i modela koeficijenta aktivnosti, uvjet ravnoteže za idealnu paru, odnosno kapljevinu

[Laboratorij – parcijalni molarni volumeni \(Zagajski-Kučan\)](#)

[Laboratorij – parcijalni molarni volumeni \(Zagajski-Kučan\)](#)

7. Tjedan

Ravnoteža para–kapljevine – fazni dijagrami, T_{xy} -dijagram, p_{xy} -dijagram, xy -dijagram, sustavi pravilna ponašanja, azeotropni sustavi, test konzistentnosti

Ravnoteža para–kapljevine – proračuni fazne ravnoteže u kemijskom inženjerstvu: vrelište, kapljište, jednokratno isparavanje, numeričke metode u proračunima ravnoteže para–kapljevine

Ravnoteža para–kapljevine – područje visokih tlakova: retrogradna kondenzacija, proračun ravnoteže; topljivost plinova u kapljevinama, postupak Prausnitza i Shaira

[Laboratorij – Ravnoteža para–kapljevine \(Zagajski-Kučan\)](#)

[Laboratorij – Ravnoteža para–kapljevine \(Zagajski-Kučan\)](#)

8. Tjedan

Ravnoteža kapljevine–kapljevine – uvjet ravnoteže preko kemijskih potencijala, fazni dijagrami, ovisnost tlaka para o sastavu, ovisnost Gibbsove energije miješanja o sastavu, utjecaj temperature i tlaka na mješljivost, određivanje parametara modela iz eksperimentalnih podataka, trokutni dijagrami, pravilo poluge, izračunavanje ravnotežnih sastava faza u dvo- i trokomponentnim sustavima

Ravnoteža kapljevine–kapljevine – razdvajanje azeotropa promjenom tlaka ili dodatkom treće komponente, ravnoteža kapljevine–kapljevine–para, fazni dijagrami, proračun fazne ravnoteže

Ravnoteža kapljevine–krutina – uvjet ravnoteže preko kemijskih potencijala i parcijalnih fugacitivnosti, fazni dijagrami, eutektici, međumolekulni spojevi, peritektici, izračunavanje topljivosti krutina u kapljevine, Schroederove jednadžbe, ternarni eutektici, eutektički kanali

[Laboratorij – Ravnoteža kapljevine–kapljevine \(Zagajski-Kučan\)](#)

[Laboratorij – Ravnoteža kapljevine–kapljevine \(Zagajski-Kučan\)](#)

9. Tjedan

Ravnoteža plin–krutina – uvjet ravnoteže preko kemijskih potencijala i parcijalnih fugacitivnosti, superkritični fluidi kao otapala, izračunavanje topljivosti krutine u fluidu

Rekapitulacija – termodinamička ravnoteža, ravnoteža para–kapljevine, ravnoteža kapljevine–kapljevine, ravnoteža kapljevine–krutina, ravnoteža plin–krutina

[Seminar – zadaci: termodinamika realnih otopina \(Zagajski-Kučan\)](#)

[Seminar – obrada rezultata laboratorijskih vježbi \(Zagajski-Kučan\)](#)

10. Tjedan

2. provjera znanja – termodinamička ravnoteža, Ravnoteža para–kapljevine, Ravnoteža kapljevine–kapljevine, ravnoteža kapljevine–krutina

Kemijska ravnoteža – uvjet kemijske ravnoteže: minimum Gibbsove energije, stehiometrijska suma kemijskih potencijala, homogene kemijske reakcije, standardna reakcijska Gibbsova energija, ovisnost standardne Gibbsove reakcijske energije o temperaturi

Kemijska ravnoteža – primjeri rješavanja problema homogene kemijske ravnoteže, homogena kemijska ravnoteža kod višereakcijskih sustava, određivanje minimalnog broja reakcija, Denbighova metoda, metoda matrične eliminacije

[Seminar – zadaci: Ravnoteža para–kapljevine \(Zagajski-Kučan\)](#)

[Seminar – priprema 2. računalne vježbe \(Rogošić, Zagajski-Kučan\)](#)

11. Tjedan

Kemijska ravnoteža – određivanje globalnog minimuma Gibbsove energije sustava, heterogena kemijska ravnoteža

Termodinamika nepovrativih procesa – eksterna i interna promjena entropije, primjeri nepovrativih procesa, prijenos topline i tvari, termodinamički potencijali i tokovi, prirast entropije, primjeri: difuzija topline i tvari

Termodinamika nepovrativih procesa – primjeri: istodobna difuzija topline i tvari, ireverzibilna ekspanzija idealnog plina, kemijska reakcija, afinitet

[Seminar – zadaci: Ravnoteža kapljevine–kapljevine \(Zagajski-Kučan\)](#)

[Vježbe na računalima – Ravnoteža para–kapljevine \(Rogošić Zagajski-Kučan, \)](#)

12. Tjedan

Termodinamika nepovrativih procesa – fenomenološke jednadžbe, međuovisnost tokova i potencijala, Onsagerovi fenomenološki koeficijenti, primjeri: vođenje električne struje u elektrolitima i metalnim vodičima, Ohmov zakon, difuzija tvari, 1. Fickov zakon, istodobna difuzija više tvari

Termodinamika nepovrativih procesa – primjeri: difuzija topline, Fourierov zakon, termoelektrični efekti, ukršteni fenomenološki koeficijenti, kemijske reakcije, jednostavne i složene

Termodinamika nepovrativih procesa – stacionarna i nestacionarna stanja, primjeri, difuzija topline, Prigoginovo načelo i njegove posljedice: gradijent kemijskog potencijala, slijedne kemijske reakcije, stabilnost stacionarnog stanja, Ljapunovljevi zakoni

[Seminar – zadaci: Ravnoteža kapljevine–kapljevine \(Zagajski-Kučan\)](#)

[Vježbe na računalima – Ravnoteža para–kapljevine \(Rogošić Zagajski-Kučan, \)](#)

13. Tjedan

3. provjera znanja – kemijska ravnoteža, neravnotežna termodinamika

Rekapitulacija – rasprava o gradivu, predavanjima, seminarima, laboratorijskim vježbama i računalnim seminarima, pitanja i odgovori, priprema pismenog i usmenog ispita

Seminar – zadaci: Ravnoteža kapljevine–krutina (Zagajski-Kučan)

Vježbe na računalima – Ravnoteža para–kapljevine (Rogošić, Zagajski-Kučan)

RAZVIJANJE OPĆIH I SPECIFIČNIH KOMPETENCIJA STUDENATA:

Opće kompetencije:

primjena osnovnih zakona termodinamike i literaturnih ili vlastitih eksperimentalnih podataka pri rješavanju kemijskoinženjerskih problema: 1. procjene termodinamičkih svojstava plinova i kapljevine u ovisnosti o tlaku, temperaturi i sastavu, 2. karakterizacije ravnoteže para-kapljevine i kapljevine-kapljevine, 3. karakterizacije kemijske ravnoteže

razumijevanje osnovnih načela termodinamike nepovrativih procesa

Posebne kompetencije:

izračunavanje termodinamičkih svojstava realnih fluida pomoću jednadžbi stanja: virijalna, vdW, RK, SRK, PR, Lee-Kesler

izračunavanje termodinamičkih svojstava realnih otopina pomoću modela koeficijenta aktivnosti: Margules, Van Laar, Wilson, NRTL, UNIQUAC, UNIFAC, ASOG

izračunavanje parametara modela koeficijenta aktivnosti iz eksperimentalnih podataka

izračunavanje temperatura, tlakova i ravnotežnih sastava za faznu ravnotežu para-kapljevine: proračun vrelišta, proračun kapljišta, proračun jednokratnog isparavanja

izračunavanje ravnotežnih sastava za faznu ravnotežu kapljevine-kapljevine

izračunavanje ravnotežnih sastava u reakcijskim smjesama u ovisnosti o tlaku i temperaturi: reakcija u plinskoj fazi, više reakcija u plinskoj fazi, reakcije u heterogenim sustavima

OBAVEZE STUDENATA U NASTAVI I NAČINI NJIHOVA IZVRŠAVANJA:

studenti su obavezni nazočiti predavanjima i seminarima

studenti su obavezni izraditi 3 laboratorijske vježbe

studenti su obavezni izraditi 2 numeričke vježbe

studenti su obavezni pristupiti provjerama znanja i kolokvijima

UVJETI ZA DOBIVANJE POTPISA:

80%-tna nazočnost na predavanjima i seminarima

završene laboratorijske vježbe, izrađeni i predani referati, položen pismeni kolokvij iz laboratorijskih vježbi

završene numeričke vježbe, izrađeni i predani referati, položen pismeni kolokvij iz numeričkih vježbi

NAČIN IZVOĐENJA NASTAVE:

predavanja (ex cathedra)

seminari (ex cathedra)

laboratorijske vježbe (praktični rad u grupama uz nadzor asistenta i demonstratora)

numeričke vježbe (samostalna izrada seminarskih zadataka uz nadzor asistenta i demonstratora)

konzultacije prema potrebi

NAČIN PROVJERE ZNANJA I POLAGANJA ISPITA:

ulazni kolokvij iz laboratorijskih vježbi

usmeni izlazni kolokvij iz laboratorijskih vježbi

pismeni kolokvij iz numeričkih vježbi

3 obvezne pismene provjere znanja tijekom semestra

pismeni ispit

usmeni ispit
NAČIN PRAĆENJA KVALITETE I USPJEŠNOSTI KOLEGIJA: Studentska anketa
METODIČKI PREDUVJETI: Potpis iz opće kemije, matematike I i II, fizike I i II, primjene i programiranja računala, potpis iz fizikalne kemije I i tehničke termodinamike
LITERATURA POTREBNA ZA POLAGANJE ISPITA (<i>izdavač i godina izdanja, voditi računa da obavezna literatura mora biti dostupna studentima i što je moguće novijeg datuma</i>): M. Rogošić, Nastavni tekstovi na mrežnim stranicama FKIT-a, 2013. S.I. Sandler, Chemical, Biochemical and Engineering Thermodynamics, 4th Ed., Wiley, New York, 2006. D. Kondepudi, I. Prigogine, Modern Thermodynamics, Wiley, New York, 1998.
DOPUNSKA LITERATURA: J.M. Smith, H.C. Van Ness, M.M. Abbott, Introduction to Chemical Engineering Thermodynamics, 5th Ed., McGraw-Hill, New York, 1996. J.M. Prausnitz, R.N. Lichtenthaler, E.G. de Azevedo, Molecular Thermodynamics of Fluid Phase Equilibria, 3rd Ed., Prentice Hall, Englewood Cliffs, 1999. B.E. Poling, J.M. Prausnitz, J.P. O'Connell, The Properties of Gases and Liquids, 5th Ed., McGraw-Hill, New York, 2000.