

NAZIV KOLEGIJA: Termodinamika realnih sustava		
NAZIV STUDIJA/STUDIJSKOG PROGRAMA: Primijenjena kemija		
GODINA STUDIJA: 2	SEMESTAR: 4	
PREDMETNI NASTAVNIK/NASTAVNICI: Marko Rogošić		
DA LI KOLEGIJ MOŽETE PREDAVATI NA ENGLISKOM ILI NA JEDNOM OD SLUŽBENIH JEZIKA EU (navedite kojem) na engleskom		
OBLIK NASTAVE	SATI TJEDNO	IZVOĐAČ NASTAVE (upisati nastavnik ili asistent)
predavanja	2	Marko Rogošić, nastavnik
vježbe	0	
seminar	1	Kristina Zagajski-Kučan, asistent
Terenska nastava (dana)		
CILJ KOLEGIJA: U okviru ovog kolegija studenti ovladavaju primjenom osnovnih termodinamičkih zakona i naprednih matematičkih metoda pri rješavanju kemijsko inženjerskih zadataka: procjene termodinamičkih svojstava čistih tvari, smjesa i otopina, proračuna fazne ravnoteže, proračuna kemijske ravnoteže.		
IZVEDBENI PROGRAM KOLEGIJA (razraditi ih što preciznije prema nastavnim tjednima):		
1. Tjedan <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, <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 Seminar – upoznavanje s programom računskih seminara (Zagajski-Kučan)		
2. Tjedan <u>Volumetrijska svojstva realnih fluida</u> – međudjelovanja čestica plina, Lennard-Jonesov potencijal, virijalna jednadžba, Boyleova temperatura, BWR jednadžba <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 Seminar – zadaci: volumetrijska svojstva realnih fluida (Zagajski-Kučan)		
3. Tjedan <u>Volumetrijska svojstva realnih fluida</u> – jednadžbe stanja trećeg stupnja, Redlich-Kwong, Soave-Redlich-Kwong, Peng-Robinson, izračunavanje pvT -svojstava, usporedba jednadžbi, plinske smjese <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 Seminar – zadaci: volumetrijska svojstva realnih fluida (Zagajski-Kučan)		
4. Tjedan <u>Termodinamička svojstva realnih fluida</u> – 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

Seminar – pokazni seminar: jednadžbe stanja realnih plinova (Zagajski-Kučan)

5. Tjedan

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 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

Seminar – zadaci: termodinamička svojstva realnih fluida (Zagajski-Kučan)

6. Tjedan

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: termodinamika realnih otopina (Zagajski-Kučan)

7. 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 – priprema za 1. provjeru znanja (Zagajski-Kučan)

8. 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

Seminar – zadaci: termodinamika realnih otopina (Zagajski-Kučan)

9. Tjedan

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

Ravnoteža para–kapljevine – fazni dijagrami, T_{xy} -dijagram, p_{xy} -dijagram, xy -dijagram, sustavi pravilna ponašanja, azeotropni sustavi, izračunavanje vrelišta, kapljišta, jednokratnog isparavanja

Seminar – zadaci: termodinamika realnih otopina (Zagajski-Kučan)

10. 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, trokutni dijagrami, pravilo poluge

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

Seminar – zadaci: ravnoteža para–kapljevine (Zagajski-Kučan)

11. Tjedan

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

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

Seminar – zadaci: ravnoteža kapljevina–krutina (Zagajski-Kučan)

12. Tjedan

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

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

Seminar – priprema za 2. provjeru znanja (Zagajski-Kučan)

13. Tjedan

2. provjera znanja – termodinamička ravnoteža, ravnoteža para–kapljevina, ravnoteža kapljevina–kapljevina, ravnoteža kapljevina–krutina, kemijska ravnoteža

Rekapitulacija – rasprava o gradivu, predavanjima, seminarima, priprema pismenog i usmenog ispita

Seminar – zadaci: ponavljanje (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 kapljevina u ovisnosti o tlaku, temperaturi i sastavu, 2. karakterizacije ravnoteže para–kapljevina i kapljevina–kapljevina, 3. karakterizacije kemijske ravnoteže

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 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 pristupiti provjerama znanja i kolokvijima

UVJETI ZA DOBIVANJE POTPISA:

80%-tna nazočnost na predavanjima i seminarima

NAČIN IZVOĐENJA NASTAVE:

predavanja (ex cathedra)

seminari (ex cathedra)

konzultacije prema potrebi

NAČIN PROVJERE ZNANJA I POLAGANJA ISPITA:

2 obvezne pismene provjere znanja tijekom semestra (60% bodova na svakoj od provjera znanja donosi oslobađanje od usmenog ispita)

pismeni ispit (3 numerička zadatka, potrebno 50% bodova za prolaz, uz uvjet jednog potpuno ispravno riješenog zadatka)
usmeni ispit

NAČIN PRAĆENJA KVALITETE I USPJEŠNOSTI KOLEGIJA:

Studentska anketa

METODIČKI PREDUVJETI:

Potpis iz opće i anorganske kemije, matematike I i II, fizike I i II, primjene i programiranja računala, potpis iz fizikalne kemije I

LITERATURA POTREBNA ZA POLAGANJE ISPITA (*izdavač i godina izdanja, voditi računa da obavezna literatura mora biti dostupna studentima i što je moguće novijeg datuma*):

M. Rogošić, Nastavni tekstovi na mrežnim stranicama FKIT-a, 2013.

S.I. Sandler, Chemical, Biochemical and Engineering Thermodynamics, 4th Ed., Wiley, New York, 2006.

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.