

ECTS – Arkusz przedmiotu

Kod	Nazwa przedmiotu	Termodynamika chemiczna i kinetyka				
Prowadzący przedmiot	Dr inż. Robert Kaczmarczyk						
Osoby prowadzące zajęcia	Dr inż. Robert Kaczmarczyk						
Klasa przedmiotu	Specjalnościowy		Rodzaj przedmiotu	Obowiązkowy			
Wydział	Energetyki i Paliw						
Kierunek	Energetyka						
Rodzaj studiów	Stacjonarne		Stopień studiów	Studia II stopnia	Semestr	2	
Rodzaje zajęć Liczba godzin	Suma	Wykłady	Ćwiczenia	Laboratoria	Seminaria	Projekty	ECTS
	60	30	30	0	0	0	5
WWW							
Uwagi							
Cel przedmiotu - zdobyte umiejętności							
Pragmatyczne wykorzystanie reguł i zasad termodynamiki z elementami teorii roztworów, kinetyki reakcji chemicznych w aktualnie realizowanych procesach technologicznych w zakresie energetyki.							
Streszczenie przedmiotu							
<p>Program przedmiotu "Termodynamika chemiczna i kinetyka" obejmuje aspekty termodynamiki fenomenologicznej ze szczególnym uwzględnieniem teorii roztworów celem praktycznego wykorzystania reguł i zasad termodynamiki w aktualnie realizowanych procesach technologicznych. Wiele miejsca poświęca się problematyce badań termodynamicznych właściwości roztworów jako dziedziny intensywnie rozwijanej w ostatnich latach. Znajomość własności termodynamicznych roztworów jest szczególnie użyteczna w prognozowaniu skuteczności procesów technologicznych. Wyjaśnienie mechanizmów i praw rządzących procesami na drodze analizy termodynamicznej stwarza możliwości pewnego modelowego ujęcia problemu, ograniczając często czasochłonną i kosztowną procedurę eksperymentalną. Analiza prowadzona jest na podstawie właściwości termodynamicznych czystych składników, ich aktywności w roztworach ciekłych wykorzystując teorie roztworów metali i modelowego ujęcia ich właściwości. Analiza warunków równowagi reakcji chemicznych nadaje opracowaniom charakter orientacyjnego przewidywania kierunku reakcji i uzyskanych produktów. Zwraca się również uwagę na aspekt kinetyki procesów. Zajęcia planowane są pod kątem użytecznego wykorzystania wiedzy z zakresu teorii roztworów, warunków równowagi reakcji chemicznej, kinetyki reakcji, modelowania właściwości termodynamicznych roztworów, transportu masy i ciepła.</p> <p>The program of the subject „Chemical thermodynamics and kinetics” covers aspects of phenomenological thermodynamics especially theory of solutions in order to practically implement rules and principles of thermodynamics for currently realised technological processes. A lot of time is dedicated to thermodynamical studies of properties of solutions as a area particularly intensively developed during recent years. The knowledge of thermodynamical properties of solutions is especially useful in anticipation of efficiency of technological processes. The explanation of mechanisms and rules governing different processes on the basis of thermodynamical analysis provides the possibility of accurate modelling of the issue, allowing for keeping to minimum time-consuming and expensive experimental procedure. The analysis is carried out on the basis of thermodynamical properties of pure components, their activity in liquid solutions using theories of metal solutions and model approach to their properties. The analysis of conditions of the equilibrium of chemical reaction gives the results a character of anticipation of the direction of the reaction and the obtained products. The attention is paid on the kinetics of processes. The classes are planned to utilise the knowledge of the theory of solutions, chemical equilibrium conditions, reaction kinetics, modelling of thermodynamical properties of solutions, heat and mass transfer.</p>							
Warunki uczestnictwa w przedmiocie	Zgodnie z regulaminem studiów						
Forma zaliczenia przedmiotu	Egzamin, kolokwium zaliczeniowe						

Zasada wystawiania oceny końcowej

Średnia ważona: 0.4 x ocena z ćwiczeń rachunkowych + 0.6 x ocena z egzaminu

Program wykładów

- 1-2. Podstawowe pojęcia termodynamiki równowagowej: zmienne zależne i niezależne, własności jednorodności funkcji termodynamicznych (intensywność i ekstensywność), wielkości charakteryzujące własności fazy.
- 3-4. Równanie stanu. Wyrażenia różniczkowe w termodynamice. Związki między funkcjami termodynamicznymi
5. Zasady termodynamiki. Potencjały termodynamiczne.
6. Równanie Gibbsa-Duhema. Funkcje charakteryzujące fazę wieloskładnikową.
- 7-8. Aktywność, współczynnik aktywności, metody wyznaczania aktywności, modelowanie własności termodynamicznych układów wieloskładnikowych.
- 9-10. Równowaga w układzie wieloskładnikowym, równowaga reakcji chemicznych.
11. Obliczanie wartości funkcji termodynamicznych czystych składników.
- 12-13. Obliczanie entalpii swobodnej reakcji chemicznej. Zmiany składu fazy w wyniku przebiegu reakcji chemicznej, równania charakterystyczne.
- 14-15. Kinetyka chemiczna i kataliza: szybkość reakcji chemicznych, obszar dyfuzyjny i kinetyczny, rola i działanie katalizatora w reakcjach chemicznych.

Program pozostałych zajęć (ćwiczenia)

1. Matematyczna interpretacja funkcji intensywnych i ekstensywnych (jednorodność funkcji, tożsamość Eulera).
2. Związki między funkcjami termodynamicznymi, temperaturowa i ciśnieniowa zależność C_p , relacja $C_p - C_v$ z wykorzystaniem równania stanu.
3. Pojęcie potencjału chemicznego substancji czystej i składnika w roztworze, definicja aktywności składnika w roztworze,
4. Obliczanie funkcji standardowych.
5. Model roztworu doskonałego, cząstkowe i molowe funkcje termodynamiczne.
6. Metody opisu współczynników aktywności składników w roztworze (wg. Krupkowskiego, metoda wielomianów: Pelton, Redlich-Kister i in.).
7. Metody wyznaczania aktywności składnika w roztworze: pomiar prężności par, SEM, interpretacja równania Gibbsa-Duhema.
8. Warunek równowagi w układach wieloskładnikowych wielofazowych, interpretacja równowag międzyfazowych: w układach eutektycznych i z ograniczoną rozpuszczalnością.
9. Analiza termodynamiczna dwuskładnikowych układów metali modelowanie właściwości termodynamicznych w układach wieloskładnikowych (formalizm: Krupkowskiego, Toppa, Kehlera),
10. Warunki równowagi reakcji chemicznych, interpretacja równania $\Delta G = -RT \ln K$ a także składników w nim występujących. Metody wyznaczania $\Delta G^0_T(T)$, wg. formalizmu Krupkowskiego i Kubaschewskiego,
11. Równowagi reakcji rozkładu węglanów, siarczków i tlenków, pojęcie temperatury inwersji.
12. Powinowactwo metali do tlenu, rozpuszczalność tlenu w metalach, teoria redukcji tlenków metali.
13. Wyznaczanie składów równowagowych reakcji chemicznych w oparciu o teorię równań charakterystycznych.
14. Szybkość reakcji chemicznej, modelowanie procesu katalitycznego reformingu parowego metanu z interpretacją wytrącania węgla w tym procesie na katalizatorze.
15. Optymalizacja zjawiska emisji metali ciężkich w procesach technologicznych energetyki.

Bibliografia

1. Termodynamika procesowa, K. Wańkowicz, Stanisław Michałowski, WNT 1999
2. Termodynamika procesów nierównowagowych M. Poniewski, J. Sado, B. Staniszewski, Oficyna Wyd. Politechniki Warszawskiej, 2008.
3. Wybrane zagadnienia z chemii fizycznej, Red. A.M. Grossman, Wydawnictwo Politechniki Śląskiej, 2006.
4. Termodynamika techniczna, J. Szargut, Wydawnictwo Politechniki Śląskiej, 2010.
5. Termodynamika, J. Tomczek, Wydawnictwo Politechniki Śląskiej, 1999.
6. Termodynamika techniczna, S. Wiśniewski, Wydawnictwa Naukowo-Techniczne, 2009.
7. Termodynamika zjawisk przepływowych. Podstawy teoretyczne wraz z przykładami, S. Postrzednik, Wydawnictwo Politechniki Śląskiej, 2006.
8. Chemical Thermodynamics of Materials: Macroscopic and Microscopic Aspects. S. Stølen, T. Grande, John Wiley & Sons, 2004.
9. Physical Chemistry, R.S. Berry, S.A. Rice, J. Ross, Oxford University Press, 2000.
10. Physical Chemistry, R.G. Mortimer, Elsevier, 2008.
11. Werle J.: Termodynamika fenomenologiczna, PWN, Warszawa, 1957.
12. Maginaw-Murphy.: Matematyka w fizyce i chemii, PWN, W-wa, 1960.
13. Teoria roztworów ciekłych w stanie równowagi. cz. I-IV. PAN, W-wa, 1961. Praca zbior.
14. Krupkowski A.: Podstawowe zagadnienia teorii procesów metalurgicznych. Kraków 1958
15. Kubaschewski O., Alcock C.: Metallurgical Thermochemistry. Pergamon Press, New York 1979.
16. Barin J., Knacke O.: Thermochemical properties of inorganic substances. Berlin 1977.
17. Panczenkow M.: Kinetyka chemiczna i kataliza. WNT. Warszawa. 1964.