

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 | Kierunkowy | | Rodzaj przedmiotu | obowiązkowy | | | |
| Wydział | Energetyki i Paliw | | | | | | |
| Kierunek | Energetyka | | | | | | |
| Rodzaj studiów | Stacjonarne | | Stopień studiów | II go stopnia | Semestr | 2 | |
| Rodzaje zajęć | Suma | Wykłady | Ćwiczenia | Laboratoria | Seminaria | Projekty | ECTS |
| Liczba godzin | 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

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 możliwość 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.

| | |
|---|--|
| Warunki uczestnictwa w przedmiocie | Zgodnie z regulaminem studiów |
| Forma zaliczenia przedmiotu | Egzamin. Kolokwium zaliczeniowe. |
| Zasada wystawiania oceny końcowej | Średnia ważona : 0.4 ocena z ćwiczeń rachunkowych + 0.6 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, laboratoria, projekty, seminaria)

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 $\Delta G = - R T \ln K$ 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. Werle J. : Termodynamika fenomenologiczna, PWN, Warszawa, 1957.
2. Maginau-Murphy.: Matematyka w fizyce i chemii, PWN, W-wa, 1960.
3. Teoria roztworów ciekłych w stanie równowagi. cz.I-IV. PAN, W-wa, 1961. Praca zbior.
4. Krupkowski A. : Podstawowe zagadnienia teorii procesów metalurgicznych.Kraków 1958
5. Kubaschewski O., Alcock C.,: Metallurgical Thermochemistry. Pergamon Press, New York 1979.
6. Barin J., Knacke O.: Thermochemical properties of inorganic substances. Berlin 1977.
7. Panczenkow M.,: Kinetyka chemiczna i kataliza. WNT. W-wa. 1964