**Nazwa przedmiotu:**

Fizykochemia roztworów i równowag fazowych II

**Koordynator przedmiotu:**

dr inż. Kamil Paduszyński

**Status przedmiotu:**

Obowiązkowy

**Poziom kształcenia:**

Studia II stopnia

**Program:**

Technologia Chemiczna

**Grupa przedmiotów:**

Obowiązkowe

**Kod przedmiotu:**

brak

**Semestr nominalny:**

2 / rok ak. 2020/2021

**Liczba punktów ECTS:**

2

**Liczba godzin pracy studenta związanych z osiągnięciem efektów uczenia się:**

1. godziny kontaktowe 30h, w tym:
a) obecność na wykładach – 15h,
b) obecność na laboratoriach komputerowych – 15h
4. przygotowanie do egzaminu i obecność na kolokwiach – 15 h
Razem nakład pracy studenta: 30 h + 15 h = 45 h, co odpowiada 2 punktom ECTS.

**Liczba punktów ECTS na zajęciach wymagających bezpośredniego udziału nauczycieli akademickich:**

1. obecność na wykładach – 15h,
2. obecność na laboratoriach komputerowych – 15h
Razem: 15h + 15h = 30h, co odpowiada 1 punktowi ECTS.

**Język prowadzenia zajęć:**

polski

**Liczba punktów ECTS, którą student uzyskuje w ramach zajęć o charakterze praktycznym:**

Zajęcia praktyczne w laboratorium komputerowym (1 punkt ECTS).

**Formy zajęć i ich wymiar w semestrze:**

|  |  |
| --- | --- |
| Wykład:  | 15h |
| Ćwiczenia:  | 0h |
| Laboratorium:  | 0h |
| Projekt:  | 15h |
| Lekcje komputerowe:  | 0h |

**Wymagania wstępne:**

Prerekwizyty: Chemia fizyczna

**Limit liczby studentów:**

-

**Cel przedmiotu:**

Zasadniczym celem wykładu jest przedstawienie studentowi przeglądu współczesnych teorii i modeli termodynamicznych opartych na równaniach stanu oraz omówienie ich podstawowych zastosowań w obliczeniach różnych właściwości fizykochemicznych zarówno substancji czystych jak i mieszanin nieelektrolitów i elektrolitów (przede wszystkim: właściwości wolumetryczne pVT, nadmiarowe funkcje mieszania, równowagi fazowe). Wykład rozpoczyna się krótkim wprowadzeniem do ogólnego opisu termodynamicznego układów wieloskładnikowych, po czym następuje szczegółowe omawianie kolejnych teorii w kolejności chronologicznej – począwszy od równania van der Waalsa i sześciennych równań stanu, poprzez równania oparte na teorii stanów odpowiadających sobie, równania oparte na teorii siatkowej, skończywszy na nowoczesnych teoriach uwzględniających asocjację, np. SAFT, CPA. W ramach wykładu omówione zostaną zastosowania oryginalnych wersji różnych modeli jak również zastosowania ich modyfikacji, np. tych opartych na idei udziałów grupowych. Ponadto, wiedza zdobyta przez Studenta w ramach wykładu, pozwoli mu umiejętnie dobierać teorię/model rzeczywistego problemów inżynierii chemicznej w celu jego projektowania i optymalizacji.

**Treści kształcenia:**

Wykład (15 h)
1. Termodynamiczny formalizm opisu układów wieloskładnikowych. Wymiar (2h)
1.1. Resztkowa energia swobodna, równanie stanu, model, parametry modelu.
1.2. Reguły mieszania.
1.3. Obliczanie różnych właściwości termodynamicznych na podstawie równania stanu: warunek równowagi termodynamicznej, przewidywanie/dopasowanie/korelacja.
2. Wirialne równanie stanu. Wymiar (1h)
3. Równanie van der Waalsa oraz jego modyfikacje/uogólnienia. Wymiar (2h)
4. Zasada stanów odpowiadających sobie i jej konsekwencje. Wymiar (1h)
5. Teoria siatkowa. Wymiar (3h)
5.1. Równania stanu oparte na modele dziurowych i komórkowych.
5.2. Zastosowanie teorii siatkowej do opisu fizykochemii i równowag fazowych polimerów.
6. Opis cieczy asocjujących – SAFT oraz CPA Wymiar (5h)
6.1. Ogólne wprowadzenie do modeli typu SAFT oraz CPA
6.2. Opis oddziaływań dipol-dipol, kwadrupol-kwadrupol, jon-jon (PCP-SAFT, ePC-SAFT)
7. Termodynamika cieczy jonowych – opis równaniami stanu. Wymiar(1h)

Laboratorium komputerowe (15 h)
1. Wprowadzenie do środowiska obliczeniowego GNU Octave. Wymiar (3 h).
1.1. Zmienne, operacje na macierzach, wektorach, strukturach, elementy programowania zorientowanego obiektowo.
1.2. Opis podstawowych funkcji umożliwiających stosowanie metod numerycznych.
2. Przedstawienie programu ThermoMAT Wymiar (3 h)
3. Modelowanie termodynamiki substancji czystych Wymiar (3 h)
3.1. Właściwości wolumetryczne pVT i krzywa parowania.
3.2. Właściwości pochodne – szybkość propagacji fal dźwiękowych, pojemność cieplna.
4. Modelowanie termodynamiki mieszanin w układach niereagujących. Wymiar (3 h)
4.1. Diagramy fazowe równowag SLE/LLE/VLE w układach wieloskładnikowych
4.2. Funkcje nadmiarowe
5. Modelowanie termodynamiki mieszanin w układach reagujących Wymiar (3 h)

**Metody oceny:**

Dwa kolokwia (w połowie i na koniec sem.) w laboratorium komputerowym.

**Egzamin:**

nie

**Literatura:**

Literatura podstawowa:
1. G. Folas, G.M. Kontogeorgis, Thermodynamic Models for Industrial Applications: From Classical and Advanced Mixing Rules to Association Theories, John Wiley & Sons, 2010.
2. J.V. Sengers, R.F. Kayser, C.J. Peters, H.J. White, Equations of State for Fluids and Fluid Mixtures, vol. 5, 1-885, z serii: Experimental Thermodynamics, Elsevier, 2000.

Literatura uzupełniająca:
1. J. M. Prausnitz, R.N. Lichtenthaler, E. G. de Azavedo, Molecular thermodynamics of fluid-phase equilibria, Sec. Ed. Prentice-Hall Inc., Englewood Cliffs, NJ, 1986.
2. J. M. Smith, H. C. Van Ness, M.M. Abbot, Introduction to Chemical Engineering Thermodynamics, McGraw Hill Inc., USA, 1996.

Materiały pomocnicze:
Materiały drukowane do wykładu.

**Witryna www przedmiotu:**

-

**Uwagi:**

## Charakterystyki przedmiotowe

### Profil ogólnoakademicki - wiedza

**Charakterystyka W01:**

Posiada wiedzę z matematyki i fizyki w zakresie pozwalającym na wykorzystanie pojęć matematycznych i fizycznych do opisu procesów chemicznych i wykonywania zaawansowanych obliczeń praktycznych

Weryfikacja:

kolokwium

**Powiązane charakterystyki kierunkowe:** K\_W01

**Powiązane charakterystyki obszarowe:**

**Charakterystyka W02:**

Posiada rozszerzoną wiedzę z podstawowych działów chemii fizycznej i termodynamiki chemicznej

Weryfikacja:

kolokwium

**Powiązane charakterystyki kierunkowe:** K\_W02

**Powiązane charakterystyki obszarowe:**

### Profil ogólnoakademicki - umiejętności

**Charakterystyka U01:**

Potrafi sprawnie pozyskiwać informacje z literatury, baz danych i innych źródeł; potrafi samodzielnie interpretować uzyskane informacje, oraz oceniać ich rzetelność i wyciągać z nich wnioski, formułować i uzasadniać opinie

Weryfikacja:

kolokwium

**Powiązane charakterystyki kierunkowe:** K\_U01

**Powiązane charakterystyki obszarowe:**

**Charakterystyka U02:**

Potrafi posługiwać się zaawansowanymi technikami informacyjno-komunikacyjnymi, w tym programami komputerowymi wspomagającymi realizację zadań inżynierskich z zakresu technologii chemicznej

Weryfikacja:

kolokwium

**Powiązane charakterystyki kierunkowe:** K\_U06

**Powiązane charakterystyki obszarowe:**

**Charakterystyka U03:**

Potrafi wykorzystać metody obliczeniowe i statystyczne do formułowania i rozwiązywania problemów w zakresie technologii chemicznej

Weryfikacja:

kolokwium

**Powiązane charakterystyki kierunkowe:** K\_U08

**Powiązane charakterystyki obszarowe:**

**Charakterystyka U04:**

W oparciu o wiedzę ogólną wyjaśnia podstawowe zjawiska związane z istotnymi procesami w technologii i inżynierii chemicznej

Weryfikacja:

kolokwium

**Powiązane charakterystyki kierunkowe:** K\_U09

**Powiązane charakterystyki obszarowe:**

### Profil ogólnoakademicki - kompetencje społeczne

**Charakterystyka K01:**

Rozumie potrzebę dokształcania się i podnoszenia swoich kompetencji zawodowych i osobistych; ma umiejętności pozwalające na prowadzenie efektywnego procesu samokształcenia

Weryfikacja:

kolokwium

**Powiązane charakterystyki kierunkowe:** K\_K01

**Powiązane charakterystyki obszarowe:**