

Guia docent

250332 - TERMOPRONA - Termodinàmica de Processos Naturals

Última modificació: 06/10/2020

Unitat responsable: Escola Tècnica Superior d'Enginyeria de Camins, Canals i Ports de Barcelona

Unitat que imparteix: 1004 - UB - Universitat de Barcelona.

Titulació: GRAU EN ENGINYERIA GEOLÒGICA (Pla 2010). (Assignatura obligatòria).

Curs: 2020

Crèdits ECTS: 4.5

Idiomes: Català, Anglès

PROFESSORAT

Professorat responsable: NEUS OTERO PÉREZ

Altres: NEUS OTERO PÉREZ

COMPETÈNCIES DE LA TITULACIÓ A LES QUALS CONTRIBUEIX L'ASSIGNATURA

Específiques:

4026. Capacitat per aplicar metodologies d'estudis i avaluacions d'impacte ambiental i, en general, de tecnologies ambientals, sostenibilitat i tractament de residus.

4066. Ecologia i ordenació del territori. Planificació i gestió territorial i urbanística.

Genèriques:

3103. Capacitat per identificar, formular i resoldre problemes d'enginyeria geològica. Capacitat per plantejar y resoldre problemes d'enginyeria geològica amb iniciativa, habilitats en presa de decisions i creativitat. Desenvolupar un mètode d'anàlisi i solució de problemes sistemàtic i creatiu.

3106. Identificar la complexitat dels problemes tractats en les matèries. Plantejar correctament el problema a partir de l'enunciat proposat. Identificar les opcions per la seva resolució. Escollir una opció, aplicarla i identificar si és necessari canviar-la si no s'arriba a una solució. Disposar d'eines o mètodes per verificar si la solució és correcta o, com a mínim, coherent. Identificar el paper de la creativitat en la ciència i la tecnologia.

3107. Identificar, modelar i plantejar problemes a partir de situacions obertes. Explorar les alternatives per a la seva resolució, escollir l'alternativa òptima d'acord a un criteri justificat. Manejar aproximacions. Plantejar i aplicar mètodes per validar la bondat de les solucions. Tenir una visió de sistema complex i de les interaccions entre els seus components.

3109. Capacitat per concebre, projectar, gestionar i mantenir sistemes en l'àmbit de l'enginyeria geològica. Capacitat per cobrir el cicle de la vida complet d'una infraestructura o sistema o servei en l'àmbit de l'enginyeria geològica. Això inclou la redacció i desenvolupament de projectes, el coneixement de les matèries bàsiques i tecnologies, la presa de decisions, la direcció de les activitats objecte dels projectes, la realització de mesuraments, càlculs i valoracions, el maneig d'especificacions, reglaments i normes d'obligat compliment, la valoració de l'impacte social i mediambiental de les solucions tècniques adoptades, la valoració econòmica i de recursos materials i humans involucrats en el projecte, amb una visió sistemàtica i integradora.

3112. Identificar les funcions de l'enginyeria i els processos involucrats en el cicle de vida d'una obra, procés o servei. Valorar la necessitat de la sistematització del procés de disseny. Identificar i interpretar els passos d'un document d'especificació del procés de disseny (PDS). Completar i millorar documents d'especificació i planificació. Aplicar un procés de disseny sistemàtic en les seves fases d'implementació i operació. Elaborar informes de progrés d'un procés de disseny. Gestionar eines de suport a la gestió de projectes. Elaborar un informe final corresponent a un procés de disseny senzill. Conèixer els aspectes econòmics bàsics associats al producte-procés-servei que s'està dissenyant.

3113. Identificar les necessitats de l'usuari i elaborar una definició de producte-procés-servei i unes especificacions inicials. Elaborar una especificació del procés de disseny. Dissenyar i seguir un model de gestió del procés de disseny basat en un estàndard. Conèixer profundament els passos associats a les fases de disseny, implementació i operació. Utilitzar de forma coherent els coneixements i eines adquirits en les diferents matèries en el procés de disseny i implementació. Avaluar i proposar millores al disseny realitzat. Avaluar l'aplicació de la legislació, normativa en els àmbits nacional, europeu i internacional

Transversals:

585. EMPRENEDORIA I INNOVACIÓ - Nivell 1: Tenir iniciatives i adquirir coneixements bàsics sobre les organitzacions i familiaritzar-se amb els instruments i les tècniques, tant de generació d'idees com de gestió, que permetin resoldre problemes coneguts i generar oportunitats.

586. EMPRENEDORIA I INNOVACIÓ - Nivell 2: Prendre iniciatives que generin oportunitats, nous objectes o solucions noves, amb una visió d'implementació de procés i de mercat, i que impliqui i faci partícips als altres en projectes que s'han de desenvolupar.

589. SOSTENIBILITAT I COMPROMÍS SOCIAL - Nivell 2: Aplicar criteris de sostenibilitat i els codis deontològics de la professió en el disseny i l'avaluació de solucions tecnològiques.

594. TREBALL EN EQUIP - Nivell 3: Dirigir i dinamitzar grups de treball, resolent-ne possibles conflictes, valorant el treball fet amb les altres persones i avaluant l'efectivitat de l'equip així com la presentació dels resultats generats.

584. TERCERA LLENGUA: Conèixer una tercera llengua, que serà preferentment l'anglès, amb un nivell adequat de forma oral i per escrit i amb consonància amb les necessitats que tindran les titulades i els titulats en cada ensenyament.

METODOLOGIES DOCENTS

En les classes presencials es fomenta al màxim la participació de l'alumnat. Hi haurà penjat al campus virtual un calendari detallat de l'assignatura així com el material de lectura recomanat per cada tema. L'assistència regular a classe és molt important per poder superar l'assignatura. Les classes es distribuïran de la següent manera:

- Classes teòriques d'una hora de duració, es recomana revisar el material de lectura i la bibliografia abans de cada sessió.
- Sessions de problemes de dues hores de duració centrats resolució d'exercicis relacionats amb els continguts teòrics.
- Sessions de pràctiques de una o dues hores, a l'aula d'informàtica, centrats la utilització de programes informàtics i bases de dades termodinàmiques per resoldre problemes.

Activitats no presencials: durant el transcurs de l'assignatura es proposen activitats addicionals mitjançant el campus virtual de la UB, per incrementar l'aprenentatge i, fer un seguiment per part del professorat.

OBJECTIUS D'APRENTATGE DE L'ASSIGNATURA

Coneixement dels conceptes bàsics de termodinàmica química i capacitat per a l'aplicació a problemes d'enginyeria ambiental.

En finalitzar el curs l'alumne haurà adquirit la capacitat de:

1. Desenvolupament d'una sèrie de mètodes i tècniques senzilles, basades en la termodinàmica de l'equilibri, per estudiar l'estabilitat dels sistemes naturals. Es fa èmfasi en la interacció dels materials geològics, minerals i roques, amb l'aigua i l'atmosfera en condicions ambientals, així com en la interacció dels materials de l'obra civil amb l'aigua i l'atmosfera.

Principis i postulats de la termodinàmica de l'equilibri; funcions d'estat i equacions d'estat; equilibri tèrmic, mecànic i químic. Regla de les fases; el gas ideal com a model de referència; energia lliure de Gibbs; propietats termodinàmiques estàndard de minerals i espècies en solució; propietats molars parcials. Potencial químic; solucions aquoses. Especiació. Força iònica i activitats; constant d'equilibri. Producte iònic i índex de saturació; influència del pH en els sistemes naturals; processos naturals d'oxidació reducció; aplicacions en l'enginyeria: aigües àcides, aigües salines, durabilitat en l'obra civil, deposició de residus, etc.; diagrames d'estabilitat mineral: activitats, $E_h(pH)$ -pH, pressió parcial, etc.; estabilitat a elevades temperatures i pressions; diagrames de fases binaris i ternaris; bases de dades termodinàmiques en mineralogia i geoquímica.

HORES TOTALES DE DEDICACIÓ DE L'ESTUDIANT

Tipus	Hores	Percentatge
Hores aprenentatge autònom	63,0	56.00
Hores grup gran	19,5	17.33
Hores activitats dirigides	4,5	4.00
Hores grup mitjà	15,0	13.33
Hores grup petit	10,5	9.33

Dedicació total: 112.5 h

CONTINGUTS

Tema 1 Fonaments

Descripció:

Definicions de sistemes (oberts, tancats, aïllats, aïdabàtics). Definició d'estats d'equilibri, (metastables estables). Definicions de tipus de processos o reaccions (reversibles o irreversibles). Paràmetres intensius i extensius. Propietats molars parcials. Fases i Components.

Definició d'energia interna. 1^a Llei de la termodinàmica. Definició d'entalpia. Capacitat calorífica. Exemples simples amb gasos ideals.

2^a Llei de la Termodinàmica. Potencials Termodinàmics. Definició d'entropia. La equació fonamental. Energia de Gibbs. Calorimetria. Dades a elevada T^a i P . La 3^a Llei de la Termodinàmica.

Objectius específics:

Familiartitzar-se amb els termes bàsics.

Dedicació: 9h 36m

Grup gran/Teoria: 4h

Aprenentatge autònom: 5h 36m

Problemes

Descripció:

Problemes

Propietats de l'aigua. Diagrames de fase simples.

Problemes: Solucions ideals, fugacitat i activitat.

Problemes: La constant d'equilibri.

Problemes: Solucions reals. Regla de les fases.

Problemes: Reaccions Redox.

Problemes: Solucions sòlides.

Sistemes Aigua-Roca.

Diagrames de fases.

Pràctiques: Bases de dades termodinàmiques.

Dedicació: 48h

Grup mitjà/Pràctiques: 20h

Aprenentatge autònom: 28h

Tema 2 Termodinàmica de solucions

Descripció:

Unitats de concentració. Propietats de les solucions ideals. Llei de Henry. Llei de Raoult. Potencials químics. Relació entre composició i energia de Gibbs.

Definició de fugacitat. Definició d'activitat. Efectes de la T^a i la P en les activitats. Estats estàndard i coeficients d'activitat.

Reaccions en equilibri. La constant d'equilibri (K). K en reaccions sòlid-sòlid. Canvis de K amb la T^a .

Volums molars parcials. Volums molars aparents. Entalpia, Capacitat calorífica i Energia de Gibbs.

Dedicació: 12h

Grup gran/Teoria: 5h

Aprenentatge autònom: 7h



Avaluació

Dedicació: 12h

Grup petit/Laboratori: 5h

Aprenentatge autònom: 7h

Tema 3 Aplicacions

Descripció:

Fases. Components. Graus de Llibertat. Regla de les fases. Sistemes tamponats.

Equació de Nerst. Mesura de les condicions Redox. Potencial Redox (Eh). Diagrames Eh-pH. Fugacitat d'oxigen.

Solucions sòlides. Coeficients d'activitat en solucions sòlides. Exemples.

Activitats de les espècies iòniques.

Producte de solubilitat (Ksp). Producte d'activitat iònica (IAP). Índex de saturació (SI). Especiació. Diagrames d'activitat.

Diagrames d'estabilitat mineral. Fases metaestables.

Dedicació: 16h 48m

Grup gran/Teoria: 7h

Aprenentatge autònom: 9h 48m

Tema 4 Diagrames de fases

Descripció:

Diagrames de fases d'un component. Diagrames binaris. Diagrames ternaris.

Dedicació: 4h 48m

Grup gran/Teoria: 2h

Aprenentatge autònom: 2h 48m

Tema 5 Bases de dades Termodinàmiques.

Descripció:

NIST Chemistry WebBook, NASA Glenn thermodynamic database

Dedicació: 4h 48m

Grup gran/Teoria: 2h

Aprenentatge autònom: 2h 48m

SISTEMA DE QUALIFICACIÓ

Avaluació continuada. Mètode de qualificació:

- Examens parcials (3 proves). La nota final serà el promig de les 3 proves. Si no es realitza alguna de les proves d'avaluació continuada, la nota final del curs serà "No presentat". (70% nota)
- Problemes i pràctiques. Es plantejaran problemes al campus virtual que s'han d'entregar obligatòriament. Si no es realitza alguna de les activitats d'avaluació contínua en el període programat, es considerarà com a puntuació zero (30% nota).

Avaluació única.

L'alumne que vulgui acollir-se aquesta avaluació ho haurà de demanar per escrit en el període màxim de 3 setmanes a comptar des de l'inici de les classes.

-Exàmen únic (100% nota).

Críteris de qualificació i d'admissió a la reavaluació: Els alumnes suspesos a l'avaluació ordinària que s'hagin presentat regularment a les proves d'avaluació de l'assignatura suspesa tindran opció a realitzar una prova de reavaluació en el període fixat en el calendari acadèmic. No podran presentar-se a la prova de reavaluació d'una assignatura els estudiants que ja l'hagin superat ni els estudiants qualificats com a no presentats. La qualificació màxima en el cas de presentar-se a l'examen de reavaluació serà de cinc (5,0). La no assistència d'un estudiant convocat a la prova de reavaluació, celebrada en el període fixat no podrà donar lloc a la realització d'una altra prova amb data posterior. Es realitzaran avaluacions extraordinàries per a aquells estudiants que per causa de força major acreditada no hagin pogut realitzar alguna de les proves d'avaluació continuada.

Aquestes proves hauran d'estar autoritzades pel cap d'estudis corresponent, a petició del professor responsable de l'assignatura, i es realitzaran dins del període lectiu corresponent.

BIBLIOGRAFIA

Bàsica:

- Smith, E.B. Basic chemical thermodynamics. 6th ed. London: Imperial College Press, 2014. ISBN 9781783263356.
- Anderson, G.M.; Crerar, D.A. Thermodynamics in geochemistry: the equilibrium model. Oxford, UK: Oxford University Press, 1993. ISBN 019506464X.
- Ganguly, J. Thermodynamics in earth and planetary sciences. Berlin: Springer, 2008. ISBN 9783540773054.
- Anderson, G.M. Thermodynamics of natural systems: theory and applications in geochemistry and environmental science. 3rd ed. Cambridge: Cambridge University Press, 2017. ISBN 9781107175211.
- Nordstrom, D.K.; Muñoz, J.L. Geochemical thermodynamics. 2nd ed. Boston: Blackwell Scientific, 1994. ISBN 0865422745.
- Galí, S. Termodinàmica aplicada a la geologia. Barcelona: Edicions Universitat de Barcelona, 1999. ISBN 84-8338-100-1.
- Solans, X. Introducció als diagrames de fases. Barcelona: EUB, 1997. ISBN 8489829519.

Complementària:

- Morel, F.M.M.; Hering, J.G. Principles and applications of aquatic chemistry. New York [etc.]: Wiley, 1993. ISBN 0471548960.
- Callen, H.B. Thermodynamics and an introduction to thermostatistics. 2nd ed. New York: Wiley, 1985. ISBN 0471862568.