



Tárgytematika

Félév:	2014/15/2
Tárgynév:	Műszaki termodinamika
Tárgykód:	VEMKFK3242T
Felelős szervezet neve:	Fizikai Kémiai Intézeti Tanszék
Felelős szervezet kódja:	MKFK
Tárgyfelelős neve:	Dr. Dallos András

Oktatás célja:

A molekulatervezés és a kívánt tulajdonságú anyagok tervezésének alapjai. A kémiai technológiai számítások termodinamikai hátterének megismertetése.

Tantárgy tartalma:

1. A molekul szerkezet és a fázis egyensúlyi jellemzők kapcsolata. Tiszta anyagok kritikus paramétereinek, forrás- és dermedéspontjának számítása. 2. Ideális gázok termodinamikai tulajdonságainak (hőkapacitás, képződési entalpia, -entrópia, -szabadentalpia, P-V-T) becslése. 3. Tiszta fluidumok és szilárd anyagok sűrűségének számítása. 4. Kétparaméteres köbös állapotegyenletek (vdW, RK, SRK, PR). Fluidumok egyensúlyi gőznyomásának, móltérfogatának, energia-függvényeinek (szabadenergia, entrópia, entalpia, belső energia, szabadentalpia) és fugacitásának számítása állapotegyenletekkel. 5. Elegyek P-V-T jellemzői. Elegyítési szabályok. Technikai termodinamikai diagramok. 6. Folyadékok termodinamikai jellemzői (gőznyomás, párolgási entalpia-változás, hőkapacitás, felületi feszültség, lobbanáspont) és számításuk. 7. Fluidumok és elegyeik viszkozitásának számítása. 8. Fluidumok és elegyeik hővezető képességének becslése. 9. Diffúzió gázokban, folyadékokban és szilárd testekben. 10. Aktivitási tényező modellek. UNIQUAC, WILSON, UNIFAC, COSMO. 11. Többkomponensű rendszerek gőz-folyadék egyensúlya és lobbanáspontja. 12. Többkomponensű rendszerek gáz-folyadék és folyadék-folyadék egyensúlya. 13. Többkomponensű rendszerek szilárd-folyadék egyensúlya. 14. Termodinamikai adatokat tartalmazó adatbázisok és tulajdonságokat számító szoftverek. 15. A kívánt tulajdonságú anyagok tervezésének módszerei

Számonkérési és értékelési rendszere:

A vizsgadolgozat műszaki számítási feladatok megoldásából, valamint termodinamikai paraméterek és jellemzők közelítő módszereket alkalmazó számításából áll.

Kötelező és ajánlott irodalom:

Poling-Prausnitz-O'Connell: The Properties of Gases and Liquids. 5th Ed. McGraw-Hill, New York 2000.
Bumble: Computer Generated Physical Properties. Lewis, Boca Raton, 1999.
Horvath: Molecular Design. Elsevier, Amsterdam, 1992.
Lyman-Reehl-Rosenblatt: Handbook of Chemical Property Estimation Methods. ACS Washington, 1990.