



# Thermodynamique et équilibres de phases



Niveau d'étude  
BAC +4



ECTS  
2 crédits



Structure de  
formation  
Faculté des  
Sciences

## En bref

- › **Date de début des cours:** 1 sept. 2021
- › **Langue(s) d'enseignement:** Français
- › **Méthodes d'enseignement:** En présence
- › **Organisation de l'enseignement:** Formation initiale
- › **Ouvert aux étudiants en échange:** Non

## Présentation

## Description

- Rappel de thermodynamique des systèmes monocomposants.
- Notions de base de thermodynamique des systèmes multicomposants. Potentiel chimique, relation de Gibbs-Duhem, variance.
- Notions sur les techniques d'analyses thermiques qui permettent la construction des diagrammes binaires/ternaires: ATG, ATD et DSC
- Construction et interprétation des diagrammes de phases binaires à partir de grandeurs thermodynamiques. Diagrammes d'enthalpie libre de Gibbs, pression et température en fonction de la composition du mélange binaire. Mélanges liquide-liquide, liquide-vapeur, solide-liquide.
- Transformation de phases : transitions de premier et deuxième ordre, points critiques. Exemples.
- L'état supercritique : définition, propriétés thermodynamiques, applications industrielles les plus étendues.
- Construction et interprétation des diagrammes de phases ternaires : variance, définitions eutectique ternaire, péritectique premier et second ordre, coupe isotherme, étude du refroidissement des alliages.

Volumes horaires\* :





CM :13

TD :7

## Objectifs

- Savoir construire un diagramme de phases à partir de quelques données thermodynamiques (coordonnées des points critiques, valeur des enthalpies de changement de phase...) et à partir des données des analyses thermiques.
- Comprendre les concepts de transition de phase de premier et deuxième ordre.
- Identifier les régions associées avec l'équilibre des phases dans les diagrammes. Donner l'évolution des fonctions thermodynamiques adéquates à partir de l'interprétation d'un diagramme binaire (estimation d'enthalpie de changement de phase, formule de Clapeyron).
- Identifier les points critiques dans un diagramme binaire. Savoir différencier l'état supercritique des états liquides et gaz en termes de ses propriétés thermodynamiques. Connaître les principales applications industrielles des fluides supercritiques.
- Identifier les réactions caractéristiques dans un diagramme ternaire: eutectique ternaire, péritectique 1er ordre et 2nd ordre.
- Savoir interpréter un diagramme binaire ou ternaire pour connaître les conditions d'obtention des phases souhaitées ou à l'inverse éviter la formation des phases indésirables et anticiper les propriétés et la stabilité des matériaux.

## Heures d'enseignement

TD	Travaux Dirigés	7h
CM	Cours Magistral	13h

## Pré-requis obligatoires

Chimie générale, Les principes de la thermodynamique. Thermodynamique de transition de phases d'un système monocomposant. Diagrammes de phases d'un système monocomposant. Condition d'évolution spontanée et d'équilibre d'un système monocomposant.

Licence Chimie, physique, sciences des matériaux

## Contrôle des connaissances

Examen Terminal

## Syllabus





- **Notions de base de thermodynamique multicomposant.** Définition des fonctions d'état thermodynamiques pour un système multicomposant. Définition du potentiel chimique. Condition d'évolution spontanée et condition d'équilibre. Relation de Gibbs-Duhem. Diagrammes d'enthalpie libre molaire en fonction de la composition pour un mélange. Variance d'un système.
- **Diagramme de Pression de Vapeur - composition d'un mélange liquide binaire.** Construction et interprétation. Solution idéal, loi de Raoult, loi de Henry. Propriétés colligatives.
- **Diagramme température - composition d'un mélange liquide binaire.** Cas de mélange miscible et cas de mélange partiellement miscible. Mélanges azéotropes. Construction et interprétation.
- **Diagramme température - composition d'un mélange solide binaire.** Eutectique. Construction et interprétation.
- **Transition des phases.** Paramètres d'ordre, transitions de premier et deuxième ordre. Points critiques. Exemples : changements d'état, transition de phase dans les polymères, transitions de phase dans les matériaux solides (avec et sans diffusion).
- **L'état supercritique.** Définition, propriétés thermodynamiques, applications industrielles les plus étendues (par exemple, extraction de caféine avec CO<sub>2</sub> supercritique).
- **Les analyses thermiques** : Analyse thermique gravimétrique, Analyse thermique différentielle, Analyse calorimétrique différentielle à balayage : Définitions, interprétation des courbes, utilités des techniques pour la construction des diagrammes de phases
- **Les diagrammes ternaires** : Définitions, variance, règles des segments inverses, surface liquidus, surface solidus
- **Diagramme ternaire température-composition** : coupes isothermes, eutectique ternaire, péritectique de 1<sup>er</sup> ordre, péritectique de 2<sup>nd</sup> ordre, étude du refroidissement lent d'une composition fondue

## Bibliographie

- "Physical Chemistry: Thermodynamics, Statistical Thermodynamics and Kinetics", Thomas Engel & Philip Reid, Pearson, 2018.
- "Atkins' Physical Chemistry", Peter Atkins, Julio de Paula & James Keeler, 11<sup>th</sup> edition, OUP Oxford, 2017.
- "Phase Equilibria, Phase Diagrams and Phase Transformations: Their Thermodynamic Basis", Mats Hillert, Cambridge University Press, 2<sup>nd</sup> edition, 2007.
- "Ternary Phase Diagrams in Materials Science", D. R. F. West, CRC Press, 2017.
- "The Liquid and Supercritical States of Matter", John E. Proctor, CRC Press, 2020.
- "Computational Thermodynamics of Materials", Zi-Kui Liu & Yi Wang, Cambridge University Press, 2016.

## Infos pratiques





## Contacts

Responsable pédagogique

Angelique LEBRANCHU

✉ angelique.lebranchu@umontpellier.fr

## Lieu(x)

› Montpellier - Triolet

