

Conversion des unités de mesures en Thermodynamique

Les unités qui peuvent varier entre plusieurs bases de données thermodynamiques sont la température, la pression et l'énergie. Les règles de conversion sont suivantes :

$$T[K] = T[^\circ C] + 273.15,$$

$$P[mmHg] = \frac{101325}{760} P[Pa]$$

$$1cal = 4.1868J$$

Calcul de la pression de vapeur saturé

Équation d'Antoine

L'équation d'Antoine classique établie la relation entre la pression de saturation et la température d'un corps pure selon l'expression suivante :

$$\log_{10} P^{sat} = a - \frac{b}{T + c}.$$

Les valeurs numériques des 3 constantes a et c dépendent des unités de mesures. Plusieurs cas sont possibles :

- température : $^\circ C$, pression : $mmHg$ (notre cas de départ)
- température : Kelvin. Alors $c[K] = c[^\circ C] - 273.15$
- pression : Pa . Alors $a[Pa] = a[mmHg] + \log_{10} \left(\frac{101325}{760} \right)$.

Équation DIPPR

L'équation DIPPR exprime la pression de saturation (mesuré en Pa) en fonction de la température (mesuré en K) :

$$\ln P^{sat}[Pa] = a + \frac{b}{T[K]} + c \ln T[K] + d (T[K])^e.$$

Cette équation dépend de 5 paramètres a, b, c, d et e . Pour la conversion entre $^\circ C$ et Pa la règle est la même que avant. Je n'ai jamais rencontré ce modèle utilisé avec $mmHg$, mais si il est le cas, je suppose que ce sera comme dans le cas d'Antoine : $a[Pa] = a[mmHg] + \log_{10} \left(\frac{101325}{760} \right)$.

Coefficients d'activité : NRTL généralisé

Cas 1 : énergie en calories, température en $^\circ C$

Les coefficients d'activité sont calculés à partir des matrices de coefficients des interactions binaires A_0 et A_1 (en cal/mol) ayant tous les éléments diagonaux nuls, et la matrice symétrique α de paramètres non aléatoires ("non - randomness parameters"). Ces matrices permettent de calculer l'énergie de Gibbs en excès. Voici les formules de calculs :

$$A = A_0 + A_1 T[^\circ C]$$

$$\tau = \frac{1}{R (T[^\circ C] + 273.15)} A, \quad \text{avec } R = 1.9872036 \frac{cal}{K \cdot mol}$$

$$G_{ij} = e^{-\alpha_{i,j} \tau_{i,j}}$$

Cas 2 : température en K

$$A = A_0 + A_1(T[K] - 273.15)$$

$$\tau = \frac{1}{R T[K]} A, \quad \text{avec } R = 1.9872036 \frac{cal}{K \cdot mol}$$

$$G_{ij} = e^{-\alpha_{i,j} \tau_{i,j}}$$

Cas 3 : énergie en Joules

$$\tau = \frac{1}{R T[K]} A(J/mol), \quad \text{avec } R = 8.314462618 \frac{J}{mol}$$