

---

## Avant-propos

---

Cet ouvrage de thermodynamique chimique approfondie s'adresse aux étudiants des écoles d'ingénieurs et de master dans les disciplines de la chimie, la chimie-physique, le génie des procédés, les matériaux, etc., ainsi qu'aux doctorants des mêmes groupes de disciplines. Il sera également utile aux chercheurs en laboratoire de recherche fondamentale ou appliquée confrontés à des questions de thermodynamique au cours de leurs travaux.

Ces publics ont déjà suivi, au cours de leur licence ou en classes préparatoires, des cours de thermodynamique générale et de thermodynamique chimique, communs le plus souvent à tous les étudiants en sciences et qui leur ont apporté les éléments fondamentaux comme les connaissances des principes et des fonctions de base de la thermodynamique ainsi que le traitement des équilibres de phases et chimiques essentiellement en milieu idéal pour des phases le plus souvent fluides, en l'absence de champ électrique et indépendamment des effets de surface.

Cet ouvrage, constitué de 7 fascicules comprenant entre 130 et 250 pages environ chacun, positionné entre un ouvrage d'initiation et un ouvrage de recherche, apporte un approfondissement de la thermodynamique chimique nécessaire aux différentes disciplines relatives aux sciences chimiques ou des matériaux. Il permet aux étudiants d'aborder la lecture de publications spécialisées. Il constitue une série d'ouvrages de référence abordant l'ensemble des notions et des méthodes. Il prend en compte les deux échelles de modélisation : microscopique par la thermodynamique statistique et macroscopique et les relie entre elles à chaque étape. Ces modèles sont ensuite utilisés lors de l'étude des phases solides, liquides ou gazeuses, pures ou à plusieurs constituants.

Les différents fascicules aborderont les questions suivantes :

- fascicule 1 : les outils de la modélisation macroscopique et microscopique d'une phase. Applications aux gaz ;
- fascicule 2 : modélisation thermodynamique des phases liquides ;
- fascicule 3 : modélisation des phases solides ;
- fascicule 4 : les équilibres chimiques ;
- fascicule 5 : les transformations de phases ;
- fascicule 6 : la thermodynamique électrochimique ;
- fascicule 7 : la thermodynamique des surfaces, des systèmes capillaires et des phases de petites dimensions.

Cet ouvrage doit beaucoup aux réactions, remarques, questions de tous mes élèves de l'Ecole nationale supérieure des mines de Saint-Etienne qui ont « subi » mes enseignements de thermodynamique pendant de nombreuses années. Qu'ils reçoivent ici mes remerciements et l'expression de ma reconnaissance pour leur attitude stimulante. Il est aussi le fruit de nombreuses discussions avec mes collègues enseignant la thermodynamique dans les plus grands établissements, notamment à travers le groupe *Thermodic* animé par Marc Onillion. Qu'ils soient tous remerciés de leurs apports et de leur convivialité.

Ce premier fascicule présente deux parties. La première, consacrée, aux outils de la modélisation des phases, présente au premier chapitre l'objectif de la modélisation d'une phase : construire des fonctions caractéristiques potentielles. Le chapitre 2 traite de l'approche macroscopique et présente les matrices caractéristiques qui regroupent les coefficients thermodynamiques, lesquels sont issus de différentes données expérimentales. Le chapitre 3 modélise les solutions. Les chapitres 4, 5 et 6 présentent les outils pour la modélisation microscopique des phases à travers les statistiques *d'objets molécules* et les espaces microcanoniques et canoniques. Le calcul des fonctions d'état à partir des données moléculaires permet d'atteindre les fonctions caractéristiques d'une phase.

La deuxième partie est consacrée à la modélisation des phases gazeuses. Dans le chapitre 7 on aborde la modélisation macroscopique et microscopique des gaz purs à travers les équations d'état, les diagrammes de compressibilité généralisée et la notion de fugacité. La modélisation microscopique est une première application de la thermodynamique statistique par le calcul du deuxième coefficient du viriel. Le huitième chapitre décrit les modélisations des mélanges de gaz, macroscopiques et microscopiques. Des modélisations mixtes à partir des modèles des solutions condensées et des équations d'état sont abordées.