



MEMOIRE DE FIN D'ETUDES DE MASTER ACADEMIQUE

Filière : **Industries Pétrochimiques**

Option : **Génie Pétrochimique**

Thème

TRAITEMENT CATALYTIQUE DES EFFLUENTS GAZEUX DE LA COLONNE C101 DU COMPLEXE CP1/Z

Présenté par

1-NEDJAR Dounia

2-CHEIKR Asma

Soutenu le 23 /06 / 2024 devant le jury composé de :

| | | | |
|---------------------|------------------|-----------|--------------------|
| Président : | MEZOUAGH Amina | Grade MCB | Université de UMAB |
| Examineur : | BELARBI Ilhem | Grade MAB | Université de UMAB |
| Rapporteur : | LARBI N-El Houda | Grade MAB | Université de UMAB |

Année Universitaire 2023/2024

Dédicace

A mon père et à ma mère ; Nulles dédicaces ne peuvent exprimer ce que je leur dois, par leur prière, leur patience avec moi, ils ont tout fait pour mon bonheur et ma réussite. Qu'ils puissent trouver dans ce travail le fruit de leurs sacrifices illimités et la preuve de mon amour et de ma gratitude éternelle. A mes chers frères et ma sœur.

A la famille CHEIKR, et mes amis pour vos encouragements, votre amour ainsi que pour les moments inoubliables qu'on a vécus ensemble durant cette année. Bonne chance pour vous aussi. Et enfin j'espère que ce rapport donnera satisfaction à toutes les personnes qui auront l'occasion de le lire

Dédicace

A mon père et à ma mère ; Nulles dédicaces ne peuvent exprimer ce que je leur dois, par leur prière, leur patience avec moi, ils ont tous fait pour mon bonheur et ma réussite. Qu'ils puissent trouver dans ce travail le fruit de leurs sacrifices illimités et la preuve de mon amour et de ma gratitude éternelle. A mes chers frères et ma sœur.

A la famille NEDJAR, et mes amis pour vos encouragements, votre amour ainsi que pour les moments inoubliables qu'on a vécus ensemble durant cette année. Bonne chance pour vous aussi. Et enfin j'espère que ce rapport donnera satisfaction à toutes les personnes qui auront l'occasion de le lire

Remerciements

Remerciant tout d'abord Dieu tout puissant de nous avoir donné la force de réaliser ce travail.

Nous voudrions exprimer notre profond remerciement à notre encadreur Dr. LARBI qui a bien voulu diriger ce travail, et pour ses orientations, ses aides et ses précieux conseils qui nous avons permis de bien mener ce travail.

Nous remercions également nos collègues qui nous ont beaucoup aidé dans ce travail.

Nous tenons également à exprimer nos sincères remerciements

A Dr. MEZOUAGH qui nous a fait l'honneur de présider le jury d'évaluation de ce mémoire

Nos vifs et sincères remerciements vont aussi à Dr. BELARBI d'avoir eu l'amabilité d'accepter d'être membre de jury de ce travail.

Sans oublier de remercier tous les enseignants du département Génie des procédés qui nous ont transmis le goût de l'étude.

Enfin, nous remercions tous ceux qui ont contribué de près ou de loin à la réalisation de ce modeste travail.

Sommaire

| | |
|------------------------------------------------------------------|----|
| INTRODUCTION GENERALE :..... | 1 |
| I.1 Présentation de la SONATRACH : | 3 |
| I.2 Présentation de complexe Cp1Z :..... | 3 |
| I.2.1 Historique de complexe :..... | 3 |
| I.2.2 Les missions principales du complexe : | 4 |
| I.2.3 Situation géographique :..... | 4 |
| I.2.4 Capacité de production :..... | 5 |
| I.3 Le méthanol : | 5 |
| I.3.1 Utilisation : | 5 |
| I.3.2 caractéristique de méthanol : | 5 |
| I.3.3 toxicité : | 5 |
| I.4 Formaldéhyde et le formurée:..... | 6 |
| La problématique : | 15 |
| II.1. Définition des composants organique volatiles :..... | 15 |
| II.2. Impacts des COV sur la santé et l'environnementales :..... | 15 |
| II.3. la réglementation relative au rejet atmosphérique : | 16 |
| II.3.1. La réglementation algérienne :..... | 16 |
| II.3.2. Réglementation internationale : | 17 |
| II.4. Bilan de matière sur la production | 17 |
| II.5. Les techniques de traitement :..... | 19 |
| II.6. Choix de la technique : | 21 |
| II.7. Description de procédé proposé: | 21 |
| II.7.1. La liste des équipements : | 22 |
| II.7.2. Etude des conditions de fonctionnement :..... | 23 |
| ETUDE DE DIMENSIONNEMENT DE REACTEUR..... | 25 |
| II.1. Dmensionnement du réacteur..... | 25 |
| II.1.2.Calcul des dimensions du réacteur:..... | 27 |
| II.1.3.Bilan enthalpique : | 33 |
| Conclusion Générale :..... | 38 |

LISTE DES TABLEAUX

| | |
|-------------------------------------------------------------------------------------|----|
| Tableau I.1:Capacité des différentes unités au niveau du complexe CP1/Z | 5 |
| Tableau I.2:Spécification techniques des réacteurs | 9 |
| Tableau I.3:Spécification technique du catalyseur | 10 |
| Tableau II.4:Valeur limite des paramètres de rejets atmosphériques | 16 |
| Tableau II.5:Les gaz de la tête de la colonne C101 | 18 |
| Tableau II. 6:Les différents débits d'entrés et de sorties de la colonne C101 | 18 |
| Tableau II.7:Détermination de la viscosité des gaz | 26 |
| Tableau II.8:Les données de départ pour le calcul du réacteur | 27 |
| Tableau II.9:Les compositions des effluents gazeux | 28 |
| Tableau II.10:Les caractéristiques du catalyseur | 28 |
| Tableau II.11:Les résultats du calcul du coefficient de transfert | 30 |
| Tableau II.12:Résultat du calcul de la diffusion de Knuden | 31 |
| Tableau II.13:Les résultats de calcul du coefficient $\square \square$ | 31 |
| Tableau II.14:Résultat de calcul des lits de chaque réactif | 31 |
| Tableau II.15:Quantité d'oxygène nécessaire pour les réactions | 31 |
| Tableau II.16:Enthalpie standard de formation de chaque réactif | 34 |
| Tableau II.17:Résultat des calculs des enthalpies | 35 |
| Tableau II.18:Les constantes de la capacité calorifique | 36 |
| Tableau II.19:Compositions des produits et leurs chaleurs spécifiques | 37 |

LISTE DES FIGURES

| | |
|-------------------------------------------------------------------------------------------|----|
| Figure I.1:Situation géographique du complexe CP1/Z | 4 |
| Figure I.2:Evaporateur de méthanol E101 | 8 |
| Figure I.3:Description de la phase gazeuse du procédé F36% et UFC80% | 11 |
| Figure I.4:Colonne d'absorption C101..... | 13 |
| Figure I.5:description de la phase liquide du procédé F36% et UFC80%..... | 14 |
| Figure II.6:Les entrées et les sorties de la colonne..... | 17 |
| Figure II.7:Schéma du procédé de traitement des effluents gazeux de la colonne C101 | 23 |
| Figure II.8:La ligne d'entrée du réacteur..... | 25 |

Nomenclature

m :Mètre,

m³: Mètre cube ;

m²: Mètre carré ;

Nm³: Normal mètre cube ;

h: Heure ;

s: seconde ;

kg: Kilo gramme ;

t: Tonne ;

Kmole: kilo mole;

°C: Degré Celsius;

K: kelvin;

KW: Kilowatt;

KJ: Kilo joule ;

Kcal: Kilocalorie ;

atm: Pression en atmosphère ;

Pa: Pression en pascal ;

mmHg: Pression en millimètre de mercure ;

bar: Pression en bar ;

Q_v: Débit volumique (Nm³/h) ;

Q_m: Débit massique (kg/h) ;

M: La masse molaire (kg/kmole) ;

ω: Fraction massique ;

X: Fraction molaire ;

T: Température (°C ou en K) ;

S: Surface d'échange (m²) ;

R: Constante des gaz parfait (atm.L/mole.K) ;

ρ : Masse volumique (kg/m^3) ;

μ : Viscosité du fluide (Pa.s) ;

V: La vitesse (m/s) ;

D_{Nominal} : Diamètre nominale (mm) ;

D_{ext} : Diamètre extérieur (mm) ;

D_{int} : Diamètre intérieur (mm) ;

L: La longueur (m) ;

f : coefficient de frottement ;

e/D : La rugosité relative ;

ε : Coefficient de singularité ;

ρ_C : Masse volumique du catalyseur (kg/m^3) ;

ρ_P : Masse volumique des pores (kg/m^3) ;

ρ_S : Masse volumique du solide (kg/m^3) ;

V_P : Volumes des pores (mL/g) ;

P_S : Surface du grain (m^2) ;

D_K : La diffusivité de Knudsen (m^2/s) ;

D_e : La diffusivité dans le grain (m^2/s) ;

D_{AB} : Diffusivité moléculaire (m^2/s) ;

V_{VH} : La vitesse spéciale (h^{-1}) ;

t_s : Le temps de séjour (s^{-1}) ;

H: La hauteur (m) ;

ΔfH° : Enthalpie standard de formation (Kcal/mol) ;

ΔrH : Enthalpie de la réaction (Kcal/h) ;

ΔHr : Enthalpie des réactifs (Kcal/h) ;

ΔHp : Enthalpie des produits (Kcal/h) ;

Résumé :

Le complexe CP1Z produit de grandes quantités de produits de synthèse, provoquant des émissions de Composant organique volatile (COV) toxiques qui affectent l'environnement. Pour gérer ces émissions et améliorer la qualité de l'air, une méthode appelée Oxydation Catalytique a été proposée. Cela implique l'installation d'une station de traitement muni d'un réacteur catalytique à base de platine. La composition du gaz à traiter, l'analyse des conditions de fonctionnement du réacteur et la teneur en oxygène ainsi que des bilans enthalpiques ont été effectués. Un calcul détaillé a été réalisé pour déterminer les dimensions et les propriétés du réacteur.

Summary :

The complex produces large quantities of synthetic products, causing toxic VOC emissions that effect the environment. To manage these emissions and improve air quality, a method called calatytic oxidation has been proposed. This involves the installation of a treatment station equipped with a platinum-based catalytic reactor. The composition of the gas to be treated, the analysis of the operating conditions of the reactor and the oxygen content as well enthaply dilans were carried out. A detailed calculation was carried out to determine the dimension and properties of the reactor.

الملخص

ينتج مجمع كميات كبيرة من المنتجات الاصطناعية، مما يسبب انبعاثات المركبات العضوية المتطايرة السامة التي تؤثر على البيئة لإدارة هذه الانبعاثات و تحسين نوعية الهواء، تم اقتراح طريقة تسمى الأكسدة التحفيزية. و يتضمن ذلك تركيب محطة معالجة بمفاعل حفاز قائم على البلاتين. تم إجراء تحليل تركيبية الغاز المراد معالجته و تحليل ظروف تشغيل المفاعل و محتوى الأكسجين بالإضافة إلى المحتوى الحراري. تم إجراء حساب تفصيلي لتحديد أبعاد و خصائص المفاعل.

INTRODUCTION GENERALE

Depuis toujours, les énergies fossiles demeurent la base de vie de l'homme, ils sont considérés comme une source indispensable pour l'existence, leur exploitation permet d'en extraire des divers produits qui ont facilité les tâches quotidiennes de l'être humain.

A titre d'exemple, la pétrochimie représente la clé de l'industrie moderne, et ça sera le secteur de développement des énergies le plus important pour l'économie algérienne dans le futur. Mais cela n'empêche pas que ces industries ont toujours un aspect nocif pour l'environnement et la santé humaine.

Après une prise de conscience progressive ces dernières années, la protection de l'environnement et le développement durable sont deux engagements largement plébiscités par le grand public. Il devient alors nécessaire, pour les différents acteurs du monde économique et politique, de prendre en compte et de mettre en avant ces deux notions fondamentales.

La pollution atmosphérique, et plus particulièrement les rejets de Composés Organiques Volatils (COV), sont aujourd'hui pointés du doigt à cause de leur effet direct ou indirect sur l'homme et l'environnement. Ils sont responsables de pathologies diverses et favorisent l'apparition de certains cancers. Concernant leur impact environnemental, ils sont indirectement impliqués dans le phénomène d'effet de serre.

Le traitement de ces rejets est souvent rendu obligatoire pour ne pas dépasser un flux annuel autorisé. Les traitements sont classés en deux catégories : les méthodes de récupération et les méthodes de destruction.

Dans ce mémoire, nous avons proposé un procédé de traitement des effluents gazeux de l'unité 100, pour éliminer les composés organiques émis par la colonne d'absorption C101, tout en respectant la réglementation nationale et internationale.

LA PROBLEMATIQUE

Le complexe CP1/Z est dédié à la production du méthanol, formaldéhyde, Formurée et la colle uréique liquide. Comme nous le savons que pour l'oxydation du méthanol ait lieu dans le réacteur R101 de l'unité 100, les 75 % des gaz d'échappements est récupérés au niveau de la soufflante FP101 pour ajuster le pourcentage de l'oxygène qui est l'agent principale de l'oxydation, alors que les 25% restantes sont rejetées vers atmosphère. Ces gaz sont nuisibles pour l'air, à cause de leur impact néfaste sur la santé de l'homme et l'environnement. Ces effluents gazeux comprennent des titres en composés organiques volatils au-dessus de la norme préconisée. L'objectif de notre étude, est de proposer un procédé de traitement de ces gaz, et produire des effluents gazeux qui respectent la réglementation et la norme donnée, tout en assurant un environnement plus sain.

LA METHODOLOGIE DU TRAVAIL :

Notre travail s'est basé sur 2 chapitres :

- Pour le premier chapitre, nous donnerons une petite description du groupe SONATRACH, une présentation du complexe CP1/Z ainsi que la présentation du département de production P2

- Quant au deuxième chapitre, nous poserons notre problématique et les solutions qui peuvent être élaborés, enfin nous expliquerons notre choix et nous donneront la description du procédé proposé.

Enfin, nous finirons notre travail par une conclusion générale englobant les résultats principaux des différents chapitres, et des recommandations qui clôture notre étude.

I.1 Présentation de la SONATRACH :

SONATRACH est une société fondée en 1963 qui œuvre principalement dans l'exploration, le transport, le traitement et la commercialisation des produits Africain . Elle est classée 12^{ème} parmi les compagnies pétrolières mondiales. Sa production globale (tous produits confondus) est d'environ 160 millions de Tap (tonnes équivalent pétrole) en 2015 Ses activités constituent environ 52% du PNB de l'Algérie. Elle emploie 122 580 personnes dans l'ensemble du groupe. La société SONATRACH cumule une longue expérience dans le raffinage du pétrole depuis plus de 50 ans. Pour la maîtrise de ses installations, la SONATRACH bénéficie de retour d'expérience de ses 50 ans d'exploitation et de maintenance d'installations d'hydrocarbures, ainsi que des l'expérience acquise sur les sites de raffinage de pétrole et de compétences de ses équipes techniques, qu'elle peut diligenter à tout moment en cas de nécessité.

I.2 Présentation du complexe Cp1Z :

La pétrochimie représente un secteur clé de l'industrie moderne. A partir des ressources fossiles ou de biomasses, elle fournit des matières intermédiaires qui servent de base à la fabrication de nombreux objets quotidiens.

SONATRACH affirme que la pétrochimie sa sera le secteur de développement des énergies nouvelles et renouvelables la plus important pour l'économie de l'Algérie, tout en exploitant des énergies conventionnelles.

I.2.1 Historique du complexe :

Le complexe méthanol et résines synthétiques est le premier projet de la société mixte ALMER, créée par la société nationale SONATRACH et la société italienne SIR en 1969 dans le cadre de la politique d'industrialisation du pays et du développement de l'économie Nationale. Le 10 septembre 1970 fut signe un contrat avec la société HUPPHREYS et GLASGOW pour la construction de l'unité méthanol, contrat qui rentrera en vigueur en février 1971. Puis En novembre 1971, la société ALMER fut dissoute ; SONATRACH poursuivit la réalisation du projet en signant deux contrats avec la société italienne ITALCONSULT, le premier en 1972 pour la construction des utilités et le second contrat en 1973 pour celle des unités de production de résines. L'entreprise Nationale de Pétrochimie a été créé à l'issue de la restructuration de SONATRACH, par le décret n°83-410 du 06 Aout

1983 portant auparavant la création de l'entreprise nationale des industries pétrochimiques (ENIP) dont la mission devrait être la prise en charge des activités pétrochimiques et phytosanitaires.

I.2.2 Les missions principales du complexe :

Le complexe Cp1Z réalise un ensemble d'opérations de conversion chimique des hydrocarbures et de leurs dérivés pour produire des produits pétrochimiques de base et finaux destinés au marché national et à l'exportation à l'étranger.

Jusqu'à la fin des années 90 et avant l'arrêt de la production de quelques unités suite aux défauts de commercialisation et l'obsolescence des produits, le complexe produisait la gamme des produits suivants :

- Méthanol, Grade A ;
- Formaldéhyde 36% ;
- UFC 80
- Résines phénoliques liquides / en poudre à mouler.
- Résine uréique liquide/ atomisées/en poudre à mouler / Mélaminiques.

Mais aujourd'hui le complexe produit seulement, le méthanol Grade A , le Formaldéhyde 36% et UFC80 ainsi que la résine urée –formol L10 .

I.2.3 Situation géographique :

Le Complexe CP1/Z occupe une superficie de 27 hectares sur le plateau d'EL MOHGOUN la ville d'Arzew. Il est situé au nord de la Raffinerie à 2 Km de la ville.



Figure I.1: Situation géographique du complexe CP1/Z

I.2.4 Capacité de production :

Les différentes capacités des produits fabriqués au niveau du complexe CP1/Z :

Tableau I.1: Capacité des différentes unités au niveau du complexe CP1/Z

| Désignation des produits | Appellation abrégée | Capacité de production (tonne/an) |
|---------------------------|---------------------|-----------------------------------|
| Méthanol | MeOH | 112.000 |
| Formaldéhyde | F36 | 20.000 |
| Formurée | UFC80 | 12.000 |
| Résines uréiques liquides | RUL | 10.000 |

I.3 Le méthanol :**I.3.1 Utilisation :**

Le méthanol est un composé toxique synthétisé à partir du gaz de synthèse, mélange de dihydrogène et de monoxyde de carbone lui-même obtenu par vaporeformage du gaz naturel ou par gazéification du charbon.

Il est destiné principalement à produire de l'éthylène et du propylène et ailleurs à fabriquer le formaldéhyde mais il est aussi utilisé dans des carburants après transformation éventuelle et le diméthyléther, employé dans le GPL. Il est également utilisé dans des piles à combustible.

I.3.2 Caractéristique du méthanol :

Le méthanol est un liquide mobile, incolore volatile d'odeur plutôt agréable quand il est pur. Le méthanol est miscible à l'eau, le mélange se faisant avec dégagement de chaleur et contraction, et à la plupart des solvants organique (alcools, éthers, cétones....).

Il dissout les graisses et un grand nombre de matières plastique et de sels minéraux ; c'est, à cet égard, un meilleur solvant que l'éthanol.

I.3.3 Toxicité :

Le méthanol est un alcool très présent dans notre environnement. Au niveau industriel, c'est un solvant ; au niveau domestique, il est utilisé comme antigel et dégraissant.

Le méthanol n'est que peu toxique par lui-même mais l'acide formique, produit de son métabolisme, responsable de la toxicité oculaire et neurologique. Le diagnostic repose sur la présence simultanée d'une acidose avec trou anionique, d'un trou osmolaire et celle de

méthanol au niveau sanguin. Le traitement consiste en une alcalinisation l'administration d'inhibiteurs de son catabolisme (éthanol et 4-méthylpyrazole) et sur l'hémodialyse dans les cas les plus graves.

I.4 Formaldéhyde et Formurée:

Le formaldéhyde est la plus petite molécule de la famille des aldéhydes. il est également appelé méthanal ou aldéhyde formique. A température ambiante, le formaldéhyde se présente sous la forme d'un gaz incolore. son odeur caractéristique, est piquante et suffocante.

Les usages du formaldéhyde sont variés en tant que monomère, il entre dans la fabrication de résines (urée-formaldéhyde, mélamine-formaldéhyde, phénol-formaldéhyde, etc.) et des polyacétals. C'est un intermédiaire de synthèse de nombreuses chimiques. Le formaldéhyde est également utilisé en tant que biocide, c'est-à-dire en tant qu'agent chimique destiné à combattre des micro-organismes (bactéries, virus....) nuisibles.

L'unité 100 produit deux produits différents : le formaldéhyde et l'urée-formaldéhyde (UFC80). Le formaldéhyde est constitué de 36 % en poids et 64 % d'eau déminéralisée, et le formuré est constituée de 57 % en poids de formaldéhyde et de 23% en poids d'urée.

I.4.1 Phase gaz :

I.4.1.1 Mélange air frais et gaz de recyclage :

Pour des raisons de sécurité, l'air frais à 21 % en O₂ est mélangé avec les gaz de recyclage à basse teneur en oxygène jusqu'à obtenir un mélange d'air total contenant de 11.5 à 12.5 % en volume d'O₂. Le mélange a lieu dans la conduite d'aspiration du ventilateur FP101 (25 % d'air frais et 75 % de gaz recyclés). Le pourcentage voulu d'oxygène est obtenu grâce à une vanne de recyclage MC101, placée à la sortie de la colonne C101. Le débit mélange air frais et gaz de recyclage est déterminé grâce à la vanne MC102 qui permet de régler les aubes de guidage réglables disposés radialement dans FP101.

I.4.1.2 Chauffage d'air total :

Il est nécessaire de chauffer l'air à une température de 160-170°C afin de permettre l'évaporation du méthanol et la formation du mélange de réaction. L'échangeur E102/1 est utilisé pour le chauffage, en utilisant des gaz de formaldéhyde. Les deux réacteurs R101 et R102 sont chauffés à une température de 280 à 315°C.

I.4.1.3 Evaporation du méthanol :

Ce processus se déroule dans l'évaporateur E101. La partie supérieure de cet appareil contient une nébulisation du méthanol grâce aux tores situés sur la masse de la bague de remplissage. Lorsque le méthanol descend vers le bas, il se heurte à l'air chauffé qui monte, s'évapore et se mélange avec l'air pour former le gaz total, tout en respectant un rapport méthanol/gaz total d'environ 6,5. Ce rapport est crucial car le mélange méthanol/air total est explosif à des concentrations allant de 7,5 % à 36 %, qui représentent respectivement la limite d'explosivité inférieure et supérieure du méthanol.

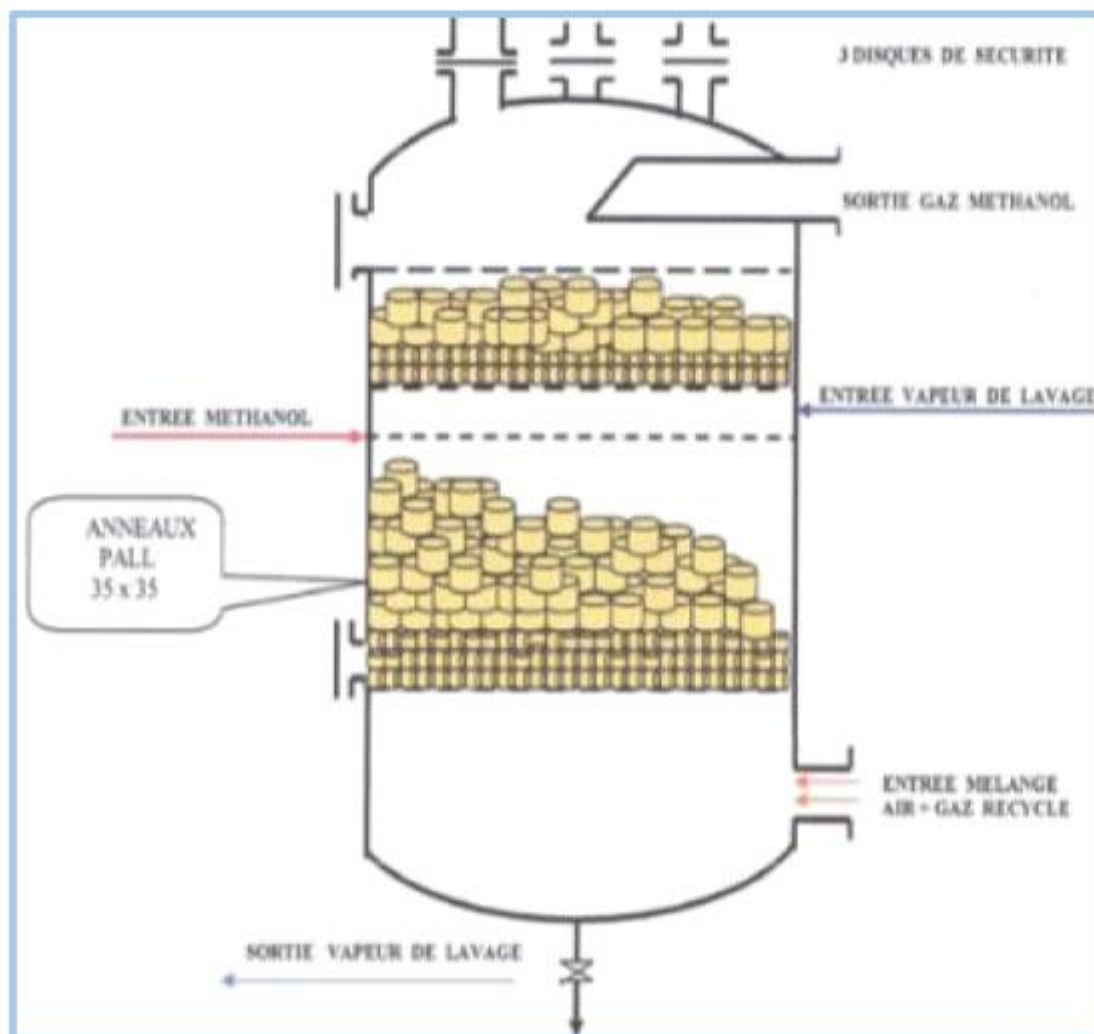


Figure I.2:Evaporateur de méthanol E101

I.4.1.4 Chauffage du gaz total :

Il est nécessaire de chauffer le mélange air-méthanol qui sort de l'évaporateur E101 à une température d'environ 70°C jusqu'à 135°C afin de faciliter la phase pré-réaction et d'éviter l'introduction du méthanol à l'état liquide dans le réacteur. Les gaz chauds provenant du réacteur chauffent ensuite le gaz préchauffé dans l'échangeur de chaleur E102/2.

I.4.1.5 La réaction :

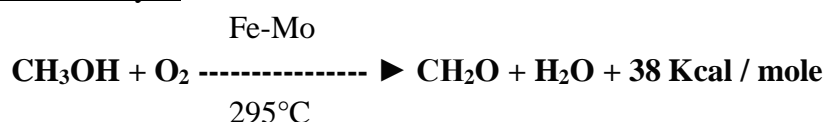
En passant à travers les tubes des réacteurs R101 et R102, le gaz total se transforme en aldéhyde formique grâce à l'agent catalytique Fe₂O₃-MoO₃ (Molybdène de fer), dont les caractéristiques sélectives garantissent une conversion optimale du méthanol en formaldéhyde en évitant au maximum la production de produits auxiliaires. En effet, les gaz de réaction contiennent une quantité de CO et de CO₂, qui sont produits par oxydation des molécules d'acide formique. De plus, il y a une faible quantité du méthanol (0,3-0,5% en volume) non réagie.

L'oxydation du méthanol est une réaction extrêmement exothermique. Il est essentiel que la chaleur de la réaction soit évacuée de manière uniforme pour chaque tube afin de maintenir une température constante dans le lit catalytique.

Tableau I.2:Spécification techniques des réacteurs

| | |
|-----------------------------------|----------------------|
| Nombre de réacteur | 2 |
| Nombre de tubes | 10400 |
| Diamètre interne des tubes | 15mm |
| Hauteur des tubes | 800mm |
| Volume des réacteurs | 2*0.63m ³ |

La réaction de formaldéhyde :



- **Le catalyseur :**

Le catalyseur utilisé est un mélange constitué de 18 à 19 % en poids de Fe₂O₃ et 81 à 82 % de MoO₃. Celui dans des conditions soigneusement contrôlées conduit à l'espèce active Molybdate de Fer.. Un excès de MoO₃ est souvent ajouté pour compenser les pertes en catalyseur causées par la formation du bleu de molybdène. En outre, ce sous-produit se déplace vers la zone la plus froide du lit catalytique, ce qui entraîne à la fois une réduction de l'activité catalytique et une diminution de la sélectivité.

La stabilité mécanique des pastilles du catalyseur détermine la durée de vie.

Tableau I.3:Spécification technique du catalyseur

| Désignation du produit | Catalyseur |
|---------------------------------------------------------|--------------------------------|
| Production de base | $Fe_2O_3 - MoO_3$ |
| Quantité totale exploitable (sans poudre) | 1200kg |
| Durée de vie | >à une année |
| Consommation spécif de catalyseur/tonne de formaldéhyde | 0.054 kg/tonne de formaldéhyde |
| Forme | Anneaux cylindriques |
| Dimensions | 4*4*2 mm |
| Conversion du méthanol | 98% molaire |
| Rendement en formaldéhyde | 93.5% molaire |
| Perte de charge au démarrage | 60 mmHg |
| Température de réaction au démarrage | 265-275°C |
| Densité du catalyseur | 0.93 |
| Porosité | 0.26 cm ³ /g |
| Emballage | Futs de 25 kg par carton |

- **Circuit d'huile diathermique :**

L'huile diathermique est une huile caloporteur, elle est utilisée pour absorber la chaleur Cédée par la réaction dans les deux réacteurs R101 et R102. Dans la marche normale, l'huile est aspirée du bac D103 par la pompe G102 et refoulée vers la chaudière EB101, une partie pénètre dans le serpentin de la chaudière pour se refroidir en évaporant une quantité d'eau dans la chaudière, et la deuxième partie est entraînée à travers un by-pass. Ensuite l'huile s'écoule vers les deux réacteurs coté calandre pour absorber la chaleur de la réaction et se retourne vers le bac de stockage D103, ainsi l'huile circule dans un circuit fermé.

I.4.1.6 Refroidissement des gaz sortant des réacteurs :

Avant leurs entrées dans la colonne d'absorption C101, le gaz formaldéhyde issu de la partie inférieure des réacteurs dont la température est d'environ 315°C, est refroidi dans l'échangeur E102 jusqu'à 160°C, ou il transmet dans la première section (E102/1) à l'air total prévu pour l'évaporation du méthanol, et dans la deuxième section (E102/2) au gaz de la réaction sortant de l'évaporateur.

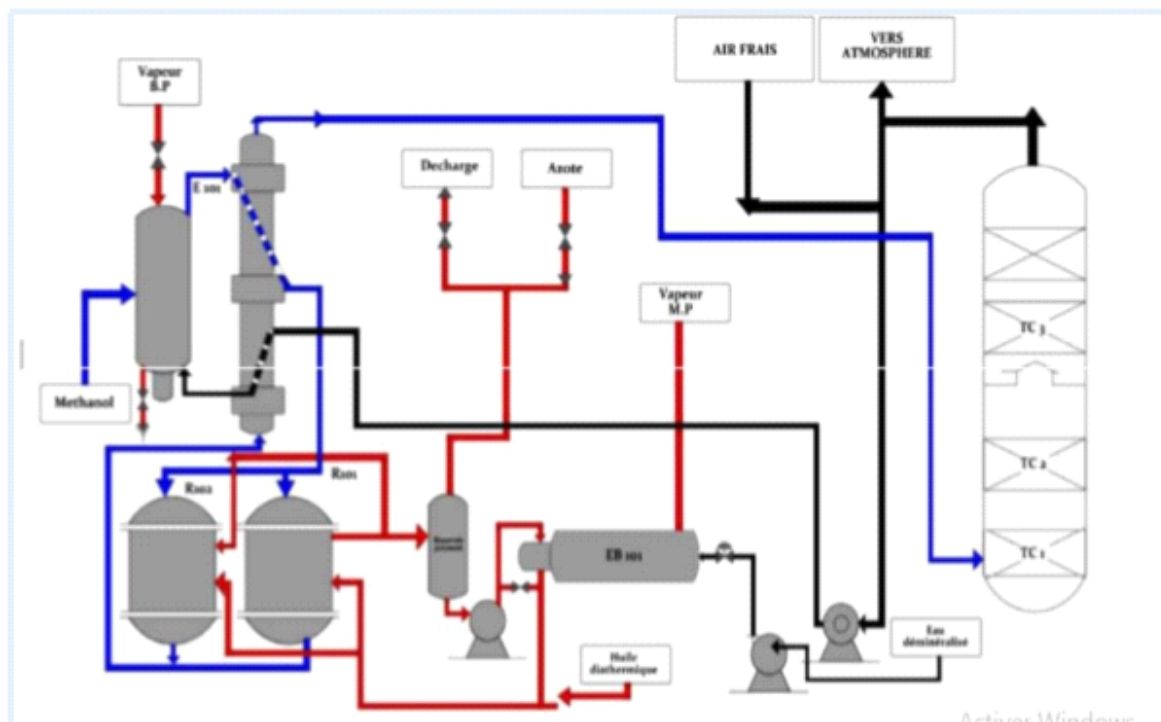


Figure I.3: Description de la phase gazeuse du procédé F36% et UFC80%

I.4.2 Phase liquide:

I.4.2.1 Production de formaldéhyde liquide à 36% en poids:

Le formaldéhyde en solution à 36 % en poids est produit lorsque le gaz de formaldéhyde refroidi à 160°C pénètre dans la partie inférieure de la colonne d'absorption C101 et traverse les deux sections de garnissage TC1 et TC2. La chaleur du gaz de procédé et la chaleur issue de solution aqueuse sont évacuées grâce à une recirculation des produits :

Le tronçon TC1 : Le liquide est aspiré par la pompe G107 de la cuve de la colonne (C101) à une température de 52°C, ensuite refroidi dans les échangeurs à plaque E103 et E104, puis il entre dans le déversoir du TC1 à une température de 48°C.

Le tronçon TC2 : Le liquide est soutiré de la cuve de TC2 par la pompe G108 à une température de 33°C, ensuite refroidi dans l'échangeur à plaque E105, puis il entre dans le déversoir du TC2 à la température 28°C, cette opération s'appelle la mise en circulation du TC2. La majeure partie de formaldéhyde est absorbée par le liquide de recirculation.

Dans la troisième section de la colonne d'absorption, soit TC3, le gaz non encore absorbée traverse les (11) plateaux perforés sur lesquels s'écoule de l'eau de procédé alimenté par le haut de la colonne d'absorption. Cela pour déshumidifier les gaz sortant des plateaux de manière à en permettre le recyclage. Plus en va vers le fond de la colonne, plus l'eau

s'enrichit de formaldéhyde. Le produit final est pompé de la partie inférieure de la colonne d'absorption aux limites de batterie pour un transport vers l'unité de stockage. La concentration de la solution aqueuse de formaldéhyde est ajustée par la quantité d'eau ajoutée dans la partie supérieure de la colonne C101. En réduisant la quantité d'eau, la concentration de la solution aqueuse va augmenter mais parallèlement, la quantité de gaz de formaldéhyde perdue dans les gaz d'échappement augmentera légèrement.

- **Pré-stockage et stockage finale du formaldéhyde:**

Le formaldéhyde produit est soutiré du fond de la colonne. Si le niveau de la colonne dépasse 50% (ligne de soutirage), l'électrovanne LICV101 s'ouvre automatiquement afin de faire circuler le produit à l'aide de la pompe G112 vers le bac de pré-stockage (D113 ou D114) en utilisant l'échangeur à plaque E106 pour obtenir un refroidissement supplémentaire. On peut ajuster le formaldéhyde pour l'obtenir à 36 % en poids en ajoutant une quantité d'eau calculée en fonction des résultats d'analyse fournis par le laboratoire. Le formaldéhyde à 36% est conservé dans les récipients D201A/B d'une capacité de 250 m³.

I.4.2.2 Description du procédé de formuréé:

Pour la production de pré-condensat UFC80 %, le gaz formaldéhyde entre dans la partie inférieure de la colonne C101 et traverse les deux sections à garnissage TC1 et TC2. La chaleur du gaz de formaldéhyde et la chaleur issue de la réaction de formaldéhyde avec l'urée sont évacuées grâce à une recirculation des produits de la partie inférieure de la colonne d'absorption au haut du premier niveau de garnissage. Dans la troisième section de la colonne, le gaz non encore absorbé, traverse les plateaux à garnissage sur lesquels une solution aqueuse d'urée s'écoule ; cette dernière est introduite dans le haut de la colonne d'absorption. La solution d'urée consommée est remplacée grâce à une unité de dissolution. Pour éliminer la chaleur du formaldéhyde, la solution de TC1 est refroidie dans l'échangeur à plaque E103, celle de TC2 dans E104 et celle de TC3 dans E103. Pour éviter d'évoluer un milieu acide (ce qui entraîne des corps insolubles) et pour avoir un milieu alcalin, la soude peut être ajoutée à 10% dans TC1 et TC2 et le septième plateau. De la condensation dans la phase en phase liquide d'urée et de formaldéhyde en milieu légèrement alcalin, dérivent des composés solubles dans l'eau plus ou moins stable appelés méthylol-urées. Pour ne pas trop faire avancer le stade de condensation, et obtenir des produits solubles et stables, il faut

- **Le pré-stockage et stockage finale du formurée :**

La formurée fabriquée est soutiré du fond de la colonne, dans le cas où le niveau de la colonne dépasse 50 %, l'électrovanne s'ouvre automatiquement pour faire circuler le produit à l'aide de la pompe G112 vers le bac de pré stockage (D113 ou D114) en passant par l'échangeur à plaque E106 pour être refroidi davantage. La formurée peut être corrigée pour l'obtenir à 80% en poids en additionnant une quantité d'eau et d'urée calculée en se basant sur les résultats d'analyse donnés par laboratoire. La formurée à 80% est stockée dans les bacs D202 A/B d'une capacité de 500 m3 chacun. L'UFC 80% doit être de préférence conservée à des températures comprises entre 20°C et à 30°C. Dans ces conditions ses propriétés chimiques restent inaltérées pendant plus de six (06) mois.

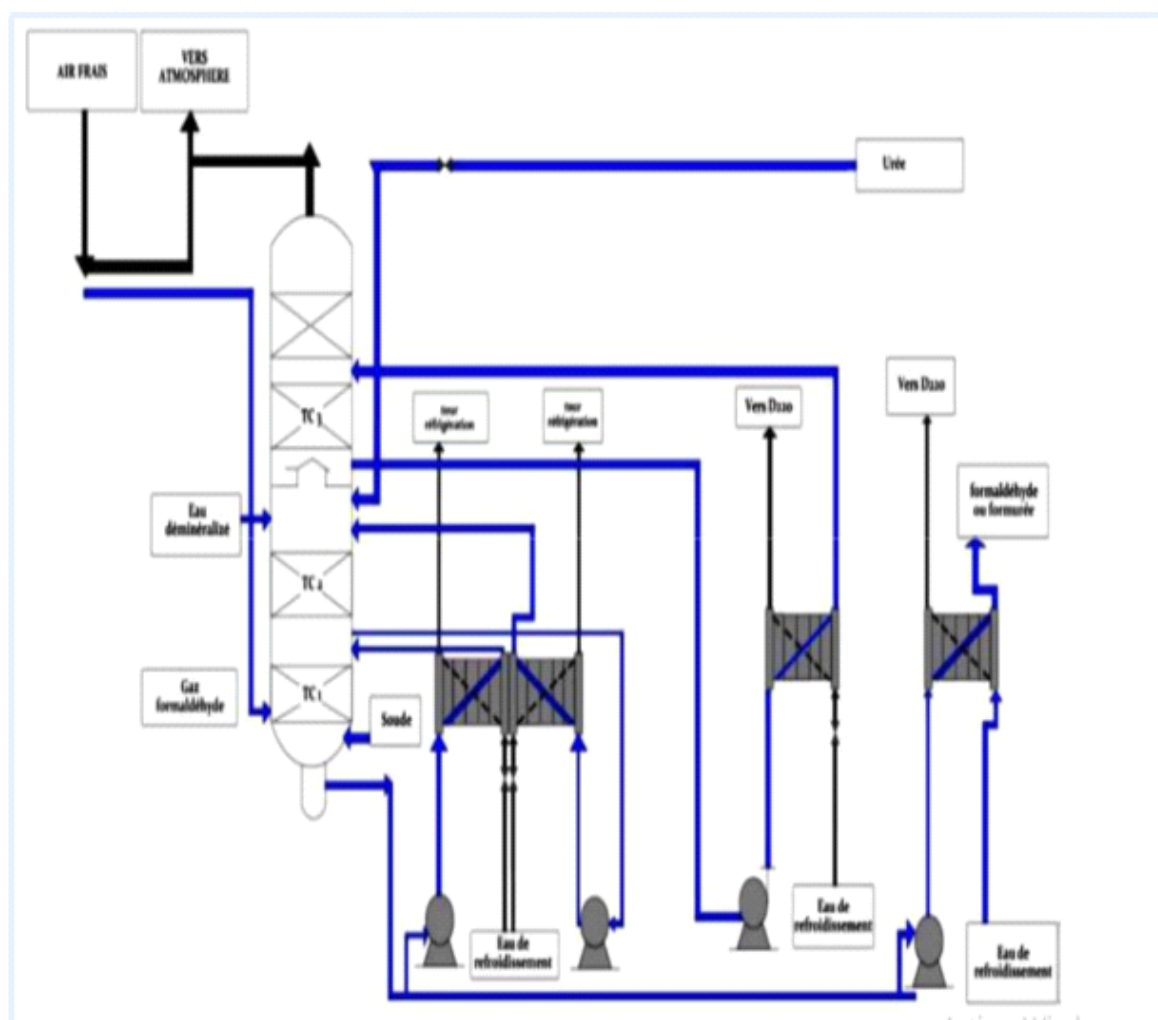


Figure I.5:description de la phase liquide du procédé F36% et UFC80%

La problématique :

Selon la description de l'unité (100), il est observé que pendant la production du formaldéhyde, 75% de l'air total est récupéré au niveau de la tête colonne C101, 25 % est rejeté vers l'atmosphère. Ces effluents gazeux contiennent des composés organiques volatils (COV) qui sont très toxique et qui devais subir un traitement avant d'être rejeté vers l'atmosphère afin de répondre aux normes nationales et internationales ($\leq 200 \text{ mg/Nm}^3$).

Dans ce chapitre, la composition de ces COV et leurs concentrations sera établis et des solutions de traitement vont être étudiées.

II.1. Définition des composants organique volatiles :

Composés organiques volatils sont des gaz et des vapeurs qui contiennent au moins un élément carboné et un ou plusieurs autres éléments, tels que l'hydrogène, l'oxygène, l'azote et les halogènes (fluor, chlore, brome et iode), et constituent l'une des causes de pollution de l'air à l'intérieur des bâtiments, des habitations, des lieux publics et des lieux de travail. Les effets des COV varient considérablement selon la nature du polluant considéré. Ils vont de l'inconfort olfactif aux effets cancérigènes, en passant par diverses irritations et diminution de la capacité respiratoire.

Les COV peuvent être trouvés dans plusieurs types de matériaux et produits de rénovation des bâtiments, tels que le benzène (dans les peintures et les solvants), le toluène (dans les peintures, les diluants, les vernis, les colles et les produits de vitrage), le formaldéhyde (dans les colles à bois pressé, les tissus, les colles, adhésifs, peintures et revêtements) ou de la trichloroquine (en diluants).

II.2. Impacts des COV sur la santé et l'environnementales :

II.2.1. Impact sur la santé :

Les effets transitoires sur la santé ont des origines : irritations respiratoires, gorges, peau, yeux, impacts sur le système nerveux central, troubles cardiovasculaires, gastro-intestinaux ou neurologiques, jusqu'aux atteintes hépatiques et rénales en présence de concentrations élevées. Les atteintes chroniques sont observées essentiellement dans le milieu industriel.

II.2.2. Impact sur environnement :

Les COV peuvent avoir des effets cancérigènes ou toxiques pour la reproduction et le développement de l'être humain.

Les COV sont également susceptibles d'être transformés dans l'atmosphère à la suite de réactions physico-chimiques et contribuer à la formation de nouveaux composés, tels que les aérosols organiques secondaires (AOS, particules) ou encore l'ozone troposphérique (O3), autre polluant de l'air.

II.3. La réglementation relative au rejet atmosphérique :

II.3.1. La réglementation algérienne :

Le journal officiel de la république algérienne N°24, énonce selon le décret exécutif N°06-138 du 16 Rabie El Aouel 1427 correspondant au 15 avril 2006 réglementant l'émission dans l'atmosphère de gaz, fumées, vapeurs, particules liquides ou solides, ainsi que les conditions dans lesquelles s'exercent leurs contrôles. Toutefois, il précise qu'en attendant la mise à niveau des installations industrielles anciennes dans un délai de cinq (05) ans, les limites des rejets atmosphériques prennent en charge l'ancienneté des installations industrielles en déterminant une tolérance pour les rejets atmosphériques émanant de ces installations. Les valeurs limites donné par le décret sont présentés dans **l'annexe1**, le tableau suivant représente les valeurs limites en composés organiques volatiles admises au sein des installations en exploitation, ainsi que pour les anciennes installations :

Tableau II.4: Valeur limite des paramètres de rejets atmosphériques

| N° | Paramètre | Unité | La valeur limite | Tolérances des valeurs limite des industries anciennes |
|----|--------------------------------------------------------------------------------------------------------|--------------------|------------------|--------------------------------------------------------|
| 7 | Composés organiques volatiles (rejet total des composés organiques volatiles à l'exclusion du méthane) | mg/Nm ³ | 150 | 200 |

II.3.2. Réglementation internationale :

Le journal officiel de l'union européenne, affirme selon la directive N° 2008/1 1 2/CE du 16 décembre 2008 (article 03) que : • Si le flux horaire total des composés organiques volatils dépasse 0,1 kg/h, la valeur limite d'émission de la concentration globale de l'ensemble de ces composés est de 2 mg/m^3 .

I.4. Bilan de matière sur la production :

Comme mentionné dans la première partie, afin de réguler le taux d'oxygène à l'entrée de l'évaporateur, 75 % des effluents gazeux sont collectés au niveau de la soufflante et mélangés avec l'air frais pour des raisons de sécurité, tandis que les 25 % restants sont rejetés.

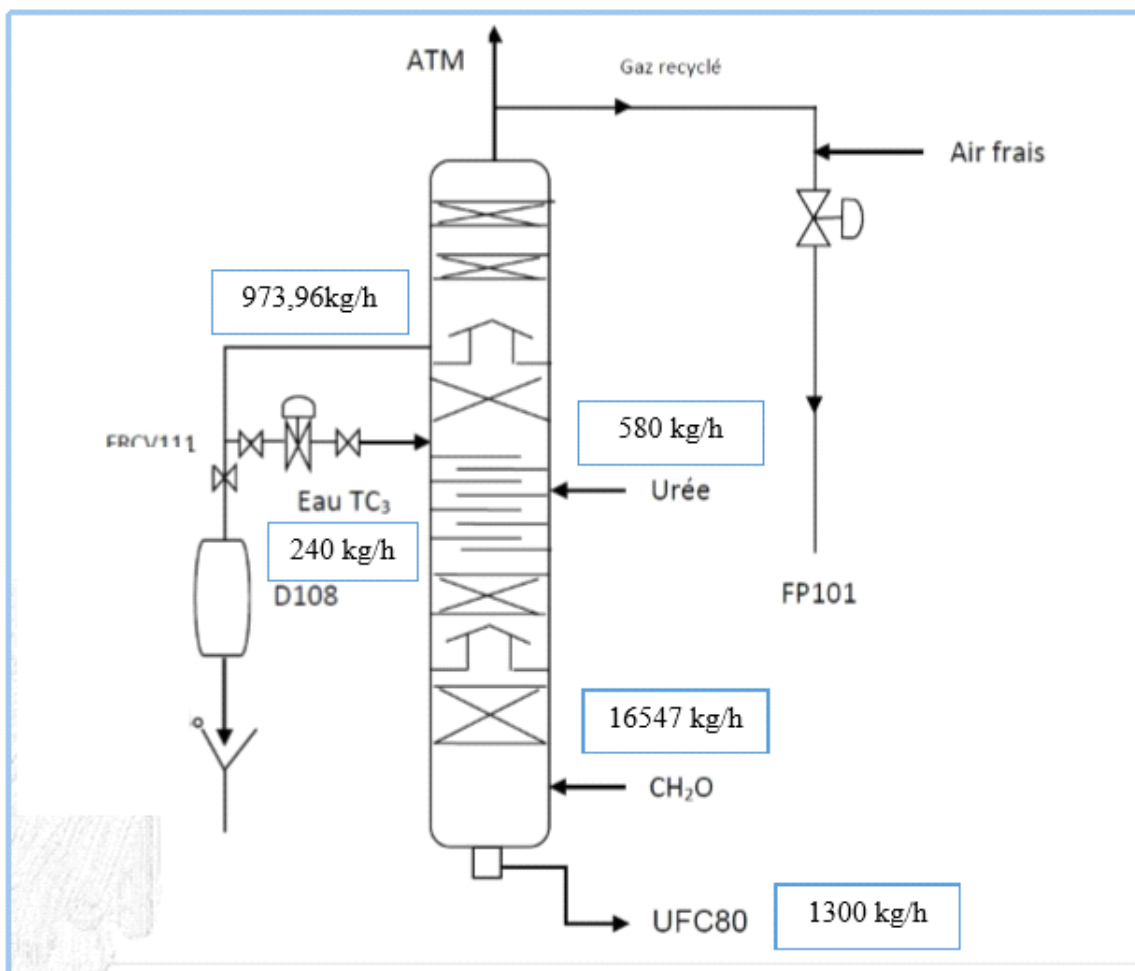


Figure II.6: Les entrées et les sorties de la colonne

Tableau II.5: Les gaz de la tête de la colonne C101

| Composés | Composition ω_i(%) | Débits (kg/h) |
|-----------------|---------------------------------------------|----------------------|
| N2 | 84.83 | 3200.85 |
| O2 | 10.73 | 404.87 |
| CO | 0.96 | 36.22 |
| CO2 | 0.66 | 24.90 |
| CH3OH | 0.300 | 11.32 |
| CHOH | 0.509 | 19.20 |
| Urée | 0 | 0 |
| H2O | 1.98 | 74.71 |
| HCOOH | 1.001 | 0.037 |
| C2H6O | 0.03 | 1.13 |
| Total | 100 | 3773.26 |

• **Bilan globale :**

Entrée + Accumulation = Sortie + Production

$Q_{EC101} + Q_{Urée} + Q_{eau\ FRCV111} = Q_{Eff\ liq} + Q_{prod\ D114} + Q_{Eff\ gaz}$

Avec :

Q_{EC101} : Débit des gaz de formaldéhyde entrant dans la colonne C101 ;

$Q_{Urée}$: Débit d'urée entrant à la colonne C101 ;

$Q_{eauFRCV111}$: Débit d'eau ajouté à l'aide de la vanne FRCV111 ;

Q_{Effliq} : Débit des effluents liquides rejetés ;

$Q_{prodD114}$: Débit du produit sortant de la colonne ;

Q_{Effgaz} : Débit total des effluents gazeux.

Tableau II. 6: Les différents débits d'entrés et de sorties de la colonne C101

| | Q_{EC101} | $Q_{Urée}$ | $Q_{eauFCV111}$ | Q_{Effliq} | $Q_{prodD114}$ |
|---------------------|-------------------------------|------------------------------|-----------------------------------|--------------------------------|----------------------------------|
| Débit (kg/h) | 16547 | 580 | 240 | 973.96 | 1300 |

$Q_{Eff\ gaz} = Q_{EC101} + Q_{Urée} + Q_{eau\ FRCV111} - Q_{Eff\ liq} - Q_{prodD114}$

$Q_{Eff\ gaz} = 15093,04\ kg/h$

Sachant que les gaz rejetés vers atmosphère représentent 25 % de cette quantité, pour cela :

$Q_{Eff\ atm} = Q_{Eff\ gaz} * 0,25$ $Q_{Eff\ atm} = 3773,26\ kg/h$

Le tableau 5 représente la composition des effluents gazeux rejetés vers l'atmosphère, indiqué en gras les composés organiques volatils concernés par la réglementation. Le débit de ces gaz (seulement les COV) en volume est de 2669.2 m³ / h, on va le convertir en conditions normal de pression et de température pour avoir un résultat de 2775.92 Nm³ / h.

Après le calcul de la concentration des gaz en composés organiques volatils on trouve: 11404.15 mg/Nm³ qui dépasse largement la norme préconisée de 200 mg/Nm³. Pour cela nous allons étudier un procédé qui traite ces gaz, et produire des effluents gazeux qui respectent la réglementation et la norme donnée, tout en assurant un environnement plus sain.

II.5. Les techniques de traitement :

II.5.1. Adsorption :

Les procédés d'adsorption représentent 30 % des installations de traitement des COV en fonctionnement. Cette technique est basée sur le phénomène physique de fixation des molécules sur la surface d'un corps solide de grande surface spécifique sous l'action des forces de Van der Waals. Les matériaux adsorbants sont variés : charbon actif, zéolithe, gel de silice, alumine activée, résines. La récupération des COV est effectuée par désorption et consiste en une diminution de la pression totale ou une augmentation de la température en présence de vapeur d'eau qui permet ensuite une condensation des COV désorbés à plus faible température

II.5.2. Absorption :

Le procédé d'absorption est peu répandu pour le traitement des COV. L'eau est généralement utilisée comme absorbant pour le traitement des odeurs en station d'épuration. L'absorbant peut aussi être un solvant lourd, comme une huile, pour l'élimination des COV peu solubles dans l'eau. Les COV sont absorbés avec ou sans réaction chimique.

II.5.3. Condensation :

Le procédé est basé sur la diminution de pression saturante d'une molécule par la diminution de la température. La condensation d'une molécule a lieu quand sa pression partielle est supérieure à la pression de vapeur saturante. Elle s'opère généralement autour de -40/-50°C, mais selon la nature des composés.

II.5.4. Procédé à membrane :

Cette technologie utilise une membrane semi-perméable qui agit comme une barrière sélective entre l'air et les COV à éliminer. Les procédés à membrane sont onéreux et sensibles aux variations de débits et de concentrations. Ils sont souvent utilisés pour des applications à faibles débits.

II.5.5. Procédés destructifs :

Ce type de procédé convient aux effluents variables en nature et en proportions de COV, dilués et difficiles à séparer :

II.5.6. Procédés biologiques :

Les procédés biologiques sont utilisés pour éliminer les composants indésirables des rejets gazeux industriels au moyen de micro-organismes. Les gaz passent au travers de couches de matériaux filtrants sur lesquelles des micro-organismes ont été déposés. Après absorption des polluants dans le matériau filtrant, les micro-organismes consomment les polluants et les transforment en produits inoffensifs tels que le dioxyde de carbone, l'eau et les sels minéraux.

II.5.7. Oxydation thermique :

Le traitement des COV par oxydation thermique est basé sur la minéralisation des COV en utilisant l'oxygène comme oxydant. Il est effectué à des températures supérieures à 750°C. Le pouvoir calorifique des COV, à concentration suffisante (supérieure à 10 g. Nm⁻³) et avec une récupération d'énergie efficace, permet de maintenir la température dans la chambre d'oxydation et d'avoir un procédé autonome en énergie. En revanche, si la concentration en COV est trop faible, la consommation énergétique de cette technologie peut être importante. Les conditions essentielles à la mise en œuvre de l'oxydation thermique sont réunies dans la « règle des 3 T »: Température supérieure à la température d'auto-inflammation des COV à traiter, Turbulence pour un mélange homogène dans le réacteur et Temps de séjour suffisant (0,5 à 1,5 secondes). Si l'effluent à traiter contient des polluants avec des atomes halogénés ou soufrés, des sous-produits toxiques ou dangereux peuvent se former (NO_x, HCl, Cl₂, SO₂).

II.5.8. Oxydation catalytique :

L'une des méthodes les plus efficaces dans l'élimination des COV est l'oxydation catalytique, elle permet le traitement des COV à des températures inférieures à celles des procédés d'incinération thermique classiques (de 200 à 500°C) (Papaefthimiou et al. 1998 ;

Khan et Ghoshal, 2000 ; Everaert et Baeyens, 2004). Elle s'effectue sur un lit catalytique composé d'un support inerte comprenant une base métallique ou en céramique sur lequel est déposé un catalyseur fait à partir des métaux précieux (platine, palladium, Rhodium, etc.) Ou d'oxydes de métaux de transition, qui favorise la réaction d'oxydation, et abaissant les conditions opératoires de température et de pression (Everaert et Baeyens, 2004). La diminution des besoins énergétiques constitue le principal avantage de ce procédé par rapport au précédent. Dans ces conditions, des polluants tels que les NO_x (ou le CO) ne se forment pas.

II.6. Choix de la technique :

De nos jours, il n'existe pas de technique universelle pour traiter tous les types de fuites de gaz. Chaque procédé doit être choisi en fonction de plusieurs critères, notamment la qualité de l'air à traiter, les déversements, les concentrations, les paramètres physiques et les paramètres de sécurité (explosivité, réactivité, corrosivité). En outre, chaque entreprise industrielle doit envisager d'autres critères en fonction de ses propres conditions et de ses contraintes économiques et environnementales, telles que les sources d'énergie disponibles, les contraintes en matière de sécurité et de maintenance, les possibilités d'espace et d'extension disponibles et l'équilibre économique.

L'étude révèle qu'une faible concentration de gaz contenant des COV est libérée dans l'atmosphère à une température de 30°C et à une pression de 0,04 bar. Les techniques de récupération ne sont pas réalisables au-delà de trois espèces en raison de la difficulté de séparation des polluants hautement mélangables et des coûts d'investissement élevés. Les méthodes de biomasse sont les plus avantageuses sur le plan financier, mais elles ne peuvent être appliquées que dans des situations spécifiques. Les méthodes d'élimination ont un intérêt lorsque les déchets ne peuvent pas être exploités. Les techniques de catalyseur ou de purification thermique sont les plus sûres pour éliminer les contaminants.

II.7. Description de procédé proposé:

Les effluents gazeux proviennent de la colonne d'absorption C101 de l'unité 100, doivent être traités pour éliminer les composés organiques volatils existant dans le gaz dans une station de « traitement des effluents gazeux par oxydation catalytique ».

Ces gaz sont aspirés par un compresseur centrifuge, avant leur passage dans le réacteur catalytique, ensuite ils sont chauffés dans un échangeur de chaleur par les gaz traités sortant du réacteur.

Lors de la réaction catalytique qui a lieu dans le réacteur catalytique, une chaleur va être cédée par les réactifs lors de leurs transformations (des réactions exothermiques), les gaz sortants sont envoyés vers l'échangeur de chaleur pour chauffer les polluants atmosphériques de la colonne ; afin d'assurer leurs chauffages pour atteindre la température de réaction souhaitée.

Les gaz traités sont envoyés ensuite vers une chaudière à vapeur (échangeur KTELLE), pour récupérer le maximum de chaleur, la vapeur générée est envoyée ensuite vers le réseau de vapeur.

Durant le fonctionnement continu de l'unité de traitement des gaz d'échappement, la chaleur issue des réactions est largement suffisante pour faire fonctionner l'unité sans apport de chaleur externe. Cependant lors de la phase de démarrage, les effluents gazeux sont chauffés grâce à une résistance électrique.

II.7.1. La liste des équipements :

Les différents équipements de traitement sont présentés dans le schéma ci-dessous, tandis que la liste ci-dessous représente les équipements essentiels de l'unité:

- Un compresseur centrifuge, pour augmenter la pression des gaz et les faire circuler dans le procédé ;
- Echangeur de chaleur pour assurer le chauffage des polluants gazeux ;
- Résistance électrique utilisé dans la phase de démarrage ;
- Réacteur catalytique où les réactions d'oxydation auront lieu ;
- Chaudière de récupération.

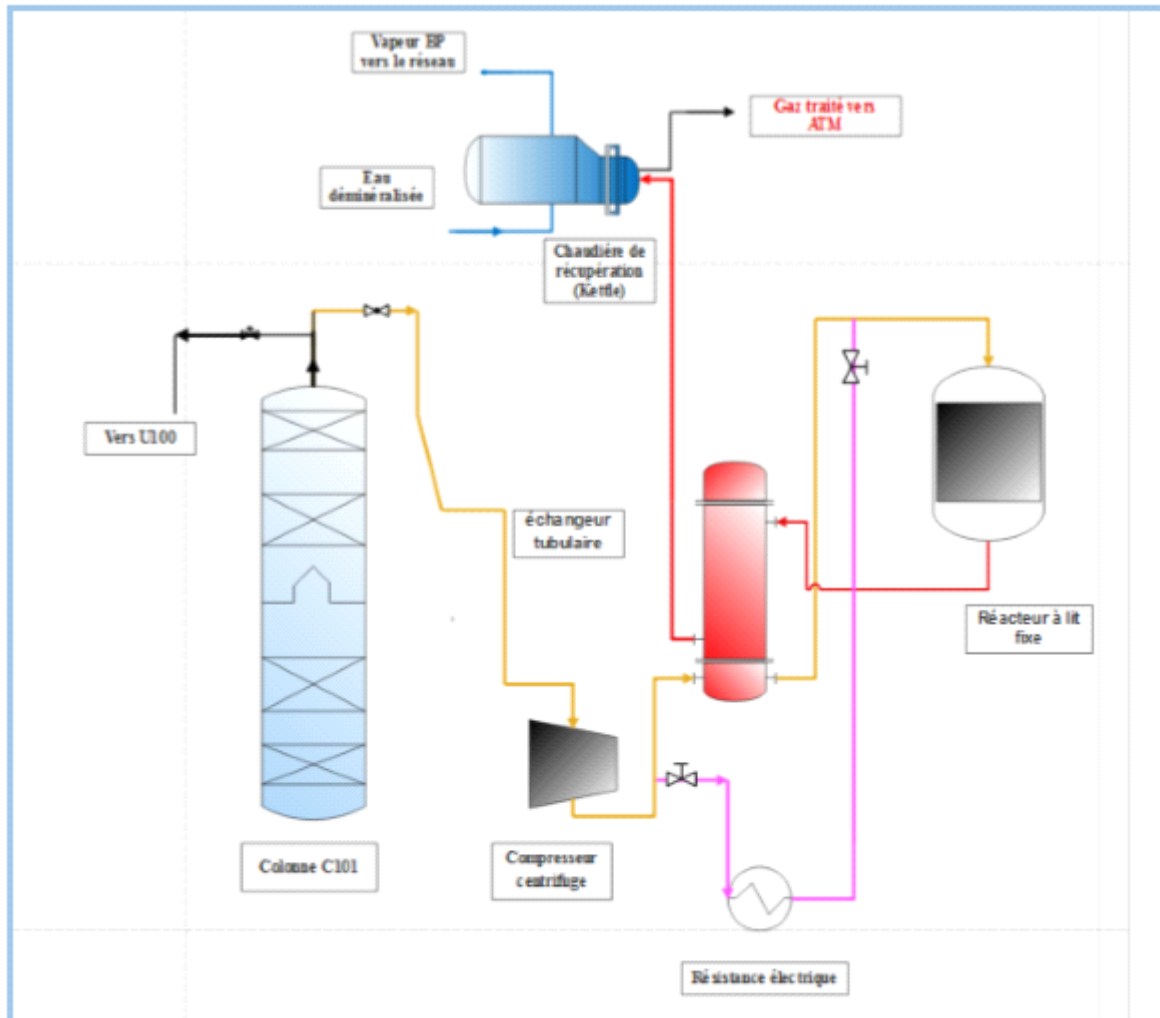


Figure II.7: Schéma du procédé de traitement des effluents gazeux de la colonne C101

II.7.2. Etude des conditions de fonctionnement :

Le procédé proposé permet l'élimination des COV par un traitement catalytique, dont nous allons étudier les conditions catalytique et thermique pour que le phénomène aura lieu.

1. La pression nécessaire :

La cinétique d'oxydation des composés organique a été étudié à des pressions ente 20 à 80 mmHg. Ainsi pour que les gaz circulent dans l'unité nous allons augmenter leur pression jusqu'à 0,13 bar.

Pour cela nous avons choisi un compresseur centrifuge, qui permet d'augmenter la pression de 0,04 bar jusqu'à 0,13 bar, il est adapté aux moyens et grands débits de gaz, et donne une excellente fiabilité.

2. La température nécessaire :

La température du procédé de traitement catalytique est beaucoup plus faible que pour les procédés thermiques.

Pour une oxydation presque parfaite, nous allons éliminer environ 99,9 % des polluants gazeux, pour cela le gaz doit être chauffé jusqu'à 450°C, dans l'échangeur à chaleur.

3. Choix le catalyseur :

On peut utiliser différents catalyseurs pour détruire les composés organiques volatils, En premier lieu, le catalyseur parfait doit avoir la capacité d'amorcer l'oxydation complète à des températures relativement basses. Il doit également être en mesure de maintenir son activité pendant de longues périodes dans un environnement chimique, principalement thermique et parfois mécanique.

Il est nécessaire qu'il puisse supporter la présence de poison et ne soit pas affecté par les pulsations causées par les flux d'air. Il doit également présenter une densité de particules homogène, même à des températures élevées, afin que toute la surface soit accessible à la réaction d'oxydation. Les catalyseurs sont constitués de métaux précieux tels que le platine (Pt), le palladium (Pd), etc. ou d'oxydes tels que le cuivre, le nickel, le chrome.

Les métaux nobles, notamment le Pt et le Pd, sont souvent conseillés pour ce genre de réactions catalytiques en raison de leur résistance thermique et de leur tolérance aux substance toxique , leur forte activité et leur sélectivité élevée par rapport au CO₂.le platine et le palladium, comme le ruthénium (Ru), ont aussi la capacité de rester métalliques dans diverses conditions opératoires et les oxydes produits à partir de ces catalyseurs ne sont donc pas entraînés par une diminution de la masse de la matière active. En outre, lorsque le Pt et/ou le Pd sont désactivés, leur régénération pourrait dans certains cas rétablir leur état initial de surface et d'activité catalytique. Le platine supporté sur l'alumine (Pt-Al₂O₃) est un système catalytique efficace pour la destruction des COV, qui peut être utilisé à diverses températures et réaliser une conversion complète en COV.

On considère que le platine supporté est l'un des catalyseurs les plus performants pour l'oxydation complète des COV, et plusieurs étude ont démontré que le platine avait une activité catalytique supérieure à celle du palladium pour l'oxydation des COV. Selon Cullis et Willatt (1983), cité par Tibirna (19997), il a été constaté que l'exposition prolongée du platine à une température de 450°C n'avait pas d'impact sur son activité et qu'aucun changement de

structure n'avait été observé. Le support le plus couramment employé dans ce genre de traitement est l'alumine (Al_2O_3), et il est également le plus économique par rapport aux autres. Notre procédé utilise un catalyseur qui peut être régénéré ANNEXE2.

ETUDE DE DIMENSIONNEMENT DE REACTEUR

Dans cette partie, nous exposerons les principes et les techniques pour évaluer la taille d'un des équipements que nous avons décidé de mettre en place dans la station de traitement des déchets liquides et gazeux évacués par la colonne d'absorption, dans le but de répondre à notre problématique et d'obtenir les conditions de fonctionnement optimales.

II.1. Dimensionnement du réacteur :

Le réacteur à lit fixe est une catégorie de réacteur à piston. Il est principalement employé dans le cadre de réactions catalytiques hétérogènes en phase gazeuse : la réaction se produit à la surface d'un catalyseur solide, les réactifs et les produits étant des gaz.

Dans le réacteur, le catalyseur est placé à la surface de supports inertes tels que des grilles métalliques ou des éléments en silice, créant ainsi une structure fixe (lit fixe).les réactifs se déplacent dans le réacteur autour des composants du lit et interagissent avec le catalyseur à la surface de celui-ci.

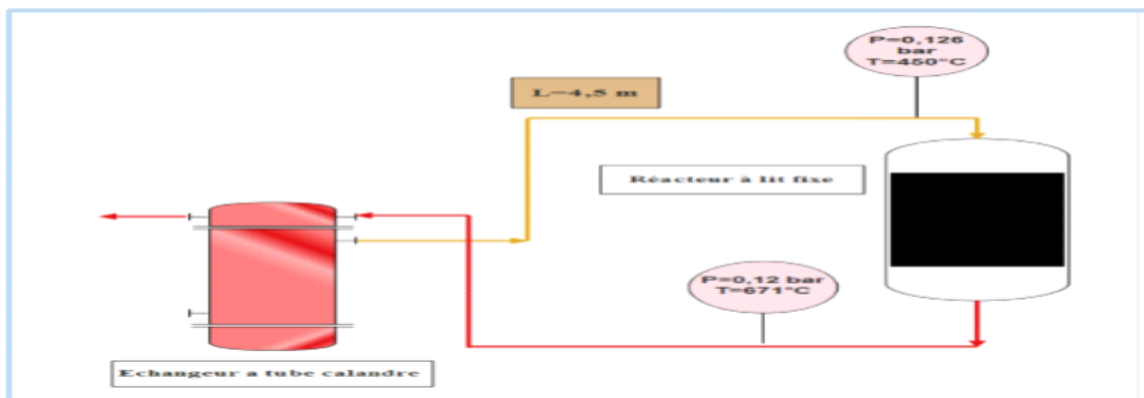


Figure II. 8:La ligne d'entrée du réacteur

Dans cette partie nous allons étudier le réacteur tubulaire à lit fixe, tout en déterminant ses dimensions et ses caractéristiques, afin d'établir plusieurs calcul et études de certains paramètres.

Pour le caractérisé nous allons suivre les étapes suivantes :

1. Détermination de la viscosité des gaz :

$$\mu = \sum_i \frac{C_i}{\mu_i}$$

Avec C_i : La fraction massique de chaque composant $C_i = \frac{M_i \cdot X_i}{\sum M_i \cdot X_i}$

La viscosité de chaque constituant est calculée selon l'équation d'Antoine ANNEXE3 :

$$\mu = A + B * T + C * T^2$$

Tableau II.7:Détermination de la viscosité des gaz

| Effluents gaz | $M_i * X_i$ | C_i | T (k) | A | B | C | μ (m. poise) | $\frac{C_i}{\mu_i}$ |
|------------------------------------|--------------|---------------------------------|-------|-----------------|-------------|----------------------|------------------|---------------------|
| N₂ | 23,75 | 0,83 739 | 723 | 42,60 6 | 0,475 | - 0,0000988 | 334,38537 5 | 0,0025042 66 |
| O₂ | 3,43 | 0,12 1052 | 723 | 44,22 4 | 0,562 | -0,000113 | 391,48162 3 | 0,0003092 15 |
| CO | 0,2688 | 0,00 9476 | 723 | 23,81 1 | 0,5394 4 | - 0,0001541 1 | 333,26835 4 | 2,84335E- 05 |
| CO₂ | 0,2904 | 0,01 0238 | 723 | 11,81 1 | 0,4983 8 | - 0,0001085 1 | 315,41841 6 | 3,24585E- 05 |
| CH₃OH | 0,096 | 0,00 338 | 723 | - 14,23 6 | 0,3893 5 | - 0,0000627 62 | 234 ,45653 3 | 1,44163E- 05 |
| CHOH | 0,1527 | 0,00 538 | 723 | - 6,439 | 0,4480 2 | - 0,0001013 | 264,52701 2 | 2,03382E- 05 |
| H₂O | 0,3564 | 0,01 256 | 723 | - 36,82 6 | 0,429 | - 0,0000162 | 264,87279 | 4,7419E- 05 |
| HCOOH | 0,0004 6 | 1,62 17. 10 ⁻⁵ | 723 | - 13,13 9 | 0,2748 6 | 0,0001918 9 | 285,89124 8 | 5,67E-05 |
| C₂H₆O | 0,0138 | 0,00 0486 523 | 723 | 1,499 | 0,3074 1 | - 0,0000444 79 | 200,50596 7 | 2,42648E- 06 |
| Total | 28,364 56 | / | 723 | / | / | / | / | 3,02E-05 |

II.2.Calcul des dimensions du réacteur:

Tableau II.8:Les données de départ pour le calcul du réacteur

| | |
|----------------------------------|---------|
| Débit (Kg/h) | 3773,26 |
| Débit d'oxygène total (Kmole/h) | 12,65 |
| Masse molaire (Kg/Kmole) | 28,36 |
| La masse volumique | 1,19 |
| La viscosité | 3,02. |
| Pression d'entrée du gaz (bar) | 0,126 |
| Température d'entrée du gaz (°C) | 450 |

1. Les réactions d'oxydation qu'auront lieu :

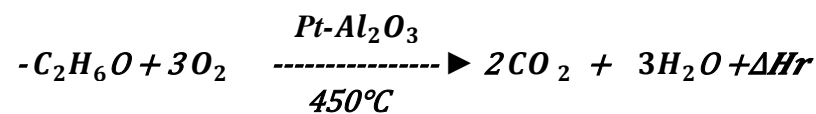
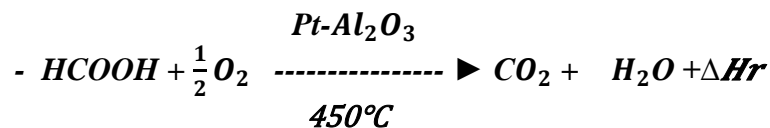
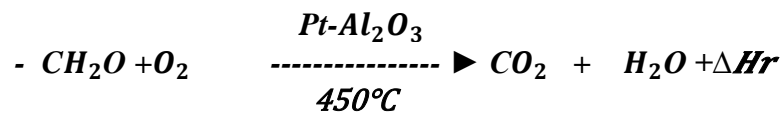
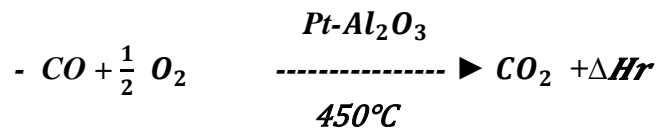
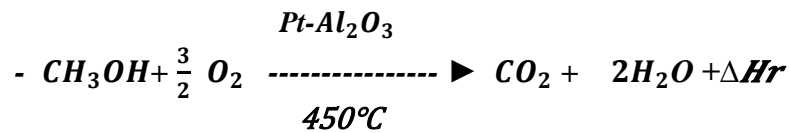


Tableau II.9: Les compositions des effluents gazeux

| Les effluents gazeux | Wi(%) | m(kg/h) | M(Kg/Kmol) | n(kmol/h) | Xi(%) |
|----------------------|--------|---------|------------|-----------|--------|
| N_2 | 84,83 | 3200,85 | 28 | 114,31 | 85,31 |
| O_2 | 10,73 | 404,87 | 32 | 12,65 | 9,44 |
| CO | 0,96 | 36,22 | 28 | 1,29 | 0,96 |
| CO_2 | 0,66 | 24,90 | 44 | 0,565 | 0,42 |
| CH_3OH | 0,3 | 11,31 | 32 | 0,353 | 0,26 |
| CHOH | 0,51 | 19,20 | 30 | 0,640 | 0,47 |
| H_2O | 1,98 | 74,71 | 18 | 4,15 | 3,097 |
| HCOOH | 0,001 | 0,037 | 46 | 0,0008 | 0,0006 |
| C_2H_6O | 0,03 | 1,13 | 46 | 0,0246 | 0,0183 |
| Total | 100,00 | 3773,26 | 28,36 | 134,00 | 100 |

2. Détermination des caractéristiques du catalyseur ANNEXE 4:

Tableau II.10: Les caractéristiques du catalyseur

| | |
|-------------------------------|-------------|
| Structure | Sphérique |
| Diamètre des pores | 3,5 mm |
| Volume des pores | 0,42 ml/g |
| Superficie du catalyseur | 180 /g |
| La tortuosité | 4 |
| Masse volumique du catalyseur | 600 kg/ |
| Masse volumique du solide | 3600 kg/ |
| Masse volumique des pores | 1433,12 kg/ |
| La surface externe du grain | 716,57 |
| La porosité | 0,602 |
| Fraction de vide | 0,42 |

II.2.1. Calcul du volume occupé par le catalyseur :

Dans le réacteur, le catalyseur occupe un espace spécifique appelé le lit catalytique. Pour évaluer le volume du lit, il est possible de spécifier les dimensions du réacteur telles que la hauteur et le diamètre, mais cela nécessite de prendre en compte les phénomènes d'écoulement du fluide à travers le lit. La formule pour déterminer le volume est présentée ci-dessous :

$$V = L_{iM} \frac{Q_v}{V_{SF}}$$

Avec:

Q_V : Débit volumique du fluide aux conditions de la réaction (/s) ;

L_{iM} : La longueur moyenne du lit pour avoir une bonne conversion (m) ;

V_{SF} : vitesse superficielle du fluide (m/s).

Pour la vitesse, on suppose que le diamètre égal à 2 m, avec (sachant que la vitesse des gaz dans les réacteurs à lit fixe varie entre 0,1-1 m/s) $\rightarrow V_{SF} = 0,28\text{m/s}$

1. Calcul du coefficient de transfert de masse externe:

Pour déterminer ce coefficient, on utilise la relation suivante :

$$K_{i,s} = j_D \cdot V_{SF} \cdot S_{ci}^{-\frac{2}{3}}$$

Avec :

Facteur de Colburn :
$$j_D = \frac{0,36}{(1-\varepsilon)Re^{0,36}}$$

Le nombre de Reynolds :
$$Re = \frac{d_p V_{SF} \rho_F}{\mu_F}$$

Le nombre de Schmidt :
$$S_{ci} = \frac{\mu_F}{\rho_F \cdot D_{i,F}}$$

Il est nécessaire de calculer la diffusivité moléculaire de chaque composant avant de calculer le nombre de Schmidt, en se basant sur la relation de WILK et Lee 1955 :

$$D_{AB} = \frac{\left(3,03 - \frac{0,98}{M_{AB}^{0,5}}\right) \cdot 10^{-3} \cdot T^{\frac{3}{2}}}{P \cdot M_{AB}^{0,5} \cdot \Omega_{AB} \cdot \sigma_{AB}^2}$$

σ_{AB} : Le diamètre de collision effectif, c'est un facteur dépendant de la structure de la molécule il est donné par la relation ci-dessous **ANNEXE5** :

$$\sigma_{AB} = \frac{\sigma_A + \sigma_B}{2}, \text{ avec } \sigma_A = 1,18(V)^{\frac{1}{3}}$$

V : Volume molaire à la température normal d'ébullition (cm^3/mol)

Ω_{AB} : C'est une valeur adimensionnelle qui découle de la fonction d'intégral de collision, il est tabulé comme fonction KT/avec **ANNEXE6** :

$$\Omega_{AB} = \frac{1,06036}{(T^*)^{0,1561}} + \frac{0,193}{\exp(0,47635T^*)} + \frac{1,03587}{\exp(1,52996T^*)} + \frac{1,76474}{\exp(3,89411T^*)}$$

Avec $T^* = KT/\varepsilon_{AB}$

K : la constante de boltzmann $1,38. 10^{-23} \text{ J/K}$

$\varepsilon_{AB} = (\varepsilon_A \cdot \varepsilon_B)^{0,5}$

P : La pression dans le réacteur en atm.

Tableau II.11 : Les résultats du calcul du coefficient de transfert

| substance | CO | CH ₃ OH | CH ₂ O | HCOOH | C ₂ H ₆ O |
|----------------------------------------------------|-----------------|--------------------|-------------------|-----------------|---------------------------------|
| σ_A | 3,143 | 3,662 | 3,493 | 3,723 | 4,357 |
| $\sigma_{AB}(A)$ | 3,075 | 3,336 | 3,251 | 3,367 | 3,683, |
| Masse molaire $M_{AB} \text{ (g/mol)}$ | 28,01 | 32,05 | 30,03 | 46,03 | 46,08 |
| La diffusivité $(\text{m}^2/\text{s}) D_{AB}$ | $5,484.10^{-5}$ | $4,43. 10^{-4}$ | $4,81. 10^{-4}$ | $4,08. 10^{-4}$ | $3,413.10^{-4}$ |
| S_{Ci} | 51,14 | 63,31 | 58,31 | 68,73 | 82,17 |
| $K_{i.s} \left(\frac{\text{m}^2}{\text{s}}\right)$ | $3,5. 10^{-3}$ | $3,03. 10^{-3}$ | $3,2. 10^{-3}$ | $2.87. 10^{-3}$ | $2,54. 10^{-3}$ |

1. Calcul du coefficient de transfert global K_i :

$K_{i.s}$: Le transfert de masse externe

$$\text{On a : } \frac{1}{K_i} = \frac{1}{K_{i.s}} + \frac{A_s}{-\vartheta_i \cdot K_M \cdot \eta_i \cdot \rho_c}$$

η_i : La diffusion dans les pores

2. Calcul le facteur d'efficacité η_i :

Est calculé d'une manière conventionnelle par l'équation:

$$\eta_i = \frac{th(\phi)}{\phi} \text{ avec } \phi_i = \frac{d_p}{\delta} \cdot \sqrt{\frac{-\vartheta_i \cdot K_M \rho_p}{D_e}} \text{ c'est la modèle de Thiele.}$$

D_e : C'est la diffusion dans les grains de catalyseur, on la détermine selon les deux diffusivités moléculaires et celle de Knudsen :

Dans des systèmes ou les pores sont très étroit et la diffusion est dominée par les collisions avec les parois des pores, la diffusivité de knudsen devient égale ou très proche de la diffusivité effective

3. Calcul de la diffusivité de Knudsen: Cette diffusivité est évoquée lorsque les molécules entrent en contact avec les parois des pores de catalyseurs plutôt qu'avec d'autres molécules.

$$D_K = 6.14 \cdot \frac{\theta^2}{\tau \cdot S_p \cdot \rho_p} \cdot \sqrt{\frac{T}{M}}$$

Tableau II.12:Résultat du calcul de la diffusion de knudsen

| Substance | CO | CH ₃ OH | CH ₂ O | HCOOH | CH ₃ CH ₃ O |
|----------------------------------|------------------------|-------------------------|-------------------------|-------------------------|-----------------------------------|
| $D_K \left(\frac{m^2}{s}\right)$ | 3,465.10 ⁻³ | 3.241. 10 ⁻³ | 3.348. 10 ⁻³ | 2,703. 10 ⁻³ | 2,703. 10 ⁻³ |

Tableau II.13:les résultats de calcul du coefficient

| Substance | CO | CH ₃ OH | CH ₂ O | HCOOH | CH ₃ CH ₃ |
|----------------------------------|---------------------------|---------------------------|--------------------------|---------------------------|---------------------------------|
| $D_e \left(\frac{m^2}{s}\right)$ | 3,465. . 10 ⁻³ | 3,241. . 10 ⁻³ | 3,348 . 10 ⁻³ | 2,703. . 10 ⁻³ | 2,703. . 10 ⁻³ |
| ϕ_i | 59,55 | 55,41 | 56,94 | 53,92 | 50,73 |
| η_i | 0,028 | 0,026 | 0,027 | 0,025 | 0,024 |
| K_i | 2,83. . 10 ⁻³ | 2,44. . 10 ⁻³ | 2,58. . 10 ⁻³ | 2,32. . 10 ⁻³ | 2,05. . 10 ⁻³ |

4. Calcul de la longueur moyenne du lit :

$$L_i = \frac{\sum L_i}{5}$$

L_i : la longueur nécessaire pour la conversion de 99,9 % d'un seul réactif,

$$L_i = \frac{V_{SF}}{K_i \cdot \mathcal{A}_S} \cdot \text{Ln} \left(\frac{1}{1-X} \right)$$

Tableau II.14:Résultat de calcul des lits de chaque réactif

| Substance | CO | CH ₃ OH | CH ₂ O | HCOOH | CH ₃ CH ₃ |
|-----------|------|--------------------|-------------------|-------|---------------------------------|
| L_i (m) | 0,96 | 1,1 | 1,04 | 1,16 | 1,31 |

$$L_{IM} = 1,11 \text{ m}$$

Le volume occupé par le catalyseur égal :

$$V_{cat} = 3,49 \text{ m}^3$$

II.2.1. La masse du catalyseur :

$$m_{cat} = V_{cat} \cdot \rho_c$$

$$m_{\text{cat}} = 2094 \text{ kg}$$

II.2.2. Le temps de séjour :

$$t_s = \frac{3600}{V_{\text{VH}}}$$

VVH : La vitesse spéciale (h^{-1}), $V_{\text{VH}} = \frac{Q}{V_{\text{cat}}} = 907,7 \text{ h}^{-1}$

$$t_s = 3,96 \text{ s}^{-1}$$

II.2.3. La hauteur du réacteur H :

$$H = L_{\text{IM}} + 1$$

1 : Représente la longueur ajoutée en haut et en bas pour placer le distributeur et les bille en céramique.

Remarque :

Les billes ont pour fonction de maintenir le catalyseur à l'intérieur du lit catalytique, ce qui permet également d'éviter tout phénomène de soulèvement du lit en conditions de vitesse superficielle anormalement élevée. De cette manière, elles contribuent à prolonger le temps de séjour.

Donc :

$$H = 2,11 \text{ m}$$

II.2.4. Le diamètre du réacteur D

- **Calcul du volume de réacteur :**

$$V = \frac{H \cdot \pi \cdot D^2}{4} \rightarrow V = \frac{H \cdot Q}{V_{\text{SF}}}$$

$$V = 6,63 \text{ m}^3$$

À partir de l'équation précédente, on obtient l'expression du diamètre :

$$D = \sqrt{\frac{4 \cdot V}{\pi \cdot H}} \quad D = 2 \text{ m}$$

II.2.5. Le poids du réacteur :

1. Calcul de son épaisseur :

- **Choix du matériau du réacteur :** Le matériau du réacteur a été sélectionné en utilisant l'acier inoxydable 310, car ce matériau est résistant à l'oxydation à des

températures pouvant atteindre 2000°F. En raison de sa forte teneur en Chrome et de sa composition moyenne en nickel, il est également résistant à la corrosion à chaud.

La formule suivante permet de calculer l'épaisseur du réacteur :

$$e = \frac{500.P.D}{\alpha t - 0,6P}$$

α : Coefficient de soudure égal à 1 ;

t: Le stress maximal accepté par l'acier en bar (12000 bar pour un acier inoxydable 310),

$$e = 0,01 \text{ m}$$

2. Détermination du poids du réacteur :

$$W = \pi \cdot \rho_A \cdot (0,14 \cdot (D + 2e)^2 + H + (D + e))$$

$$W = 1192 \text{ kg}$$

II.3. Bilan enthalpique :

II.3.1. Calcul de la quantité d'oxygène nécessaire :

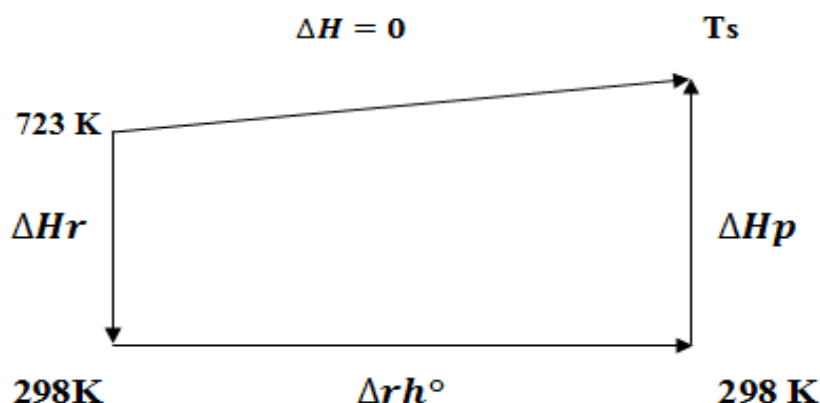
L'oxygène nécessaire à la réaction d'oxydation est présent en quantité suffisante dans les gaz à traiter avec une valeur de 12,65 Kmole/h, et nous n'avons pas besoin d'injecter de l'air pour enrichir le mélange, le tableau suivant indique les besoins en oxygène pour l'oxydation de chaque composant :

Tableau II.15: Quantité d'oxygène nécessaire pour les réactions

| Les réactifs | Xi(%) | Nombre stœchiométrique d'O2 | Quantité d'O2 (Kmole/h) |
|---------------------------------|--------|------------------------------------|-------------------------|
| CO | 0,9655 | 0,5 | 0,482726506 |
| CH ₃ OH | 0,2640 | 1,5 | 0,395986587 |
| HCOOH | 0,0006 | 0,5 | 0,000306077 |
| CHOH | 0,4778 | 1 | 0,47776515 |
| C ₂ H ₆ O | 0,0184 | 3 | 0,055093786 |
| Total | / | / | 1,411878105 |
| | | Quantité d' total (Kmole/h) | 1,891890495 |
| | | Quantité restante (Kmole/h) | 10,76032194 |

II.3.2. Diagramme de la réaction :

En utilisant ce schéma réactionnel, nous procéderons au calcul des enthalpies suivantes : l'enthalpie des réactifs dans l'intervalle de température 723-298°C, l'enthalpie de la réaction à 298°K, et enfin l'enthalpie des produits dans l'intervalle de température 298-Ts°K.



II.3.2.1. Calcul de l'enthalpie de la réaction :

Le Calcul de l'enthalpie de réaction est réalisé en utilisant la loi de Hess :

$$\Delta r H = \Delta_f H \text{ Produits} - \Delta_f H \text{ Réactifs}$$

Les enthalpies standards de formation des réactifs sont représentées dans le tableau suivant :

Tableau II.16: Enthalpie standard de formation de chaque réactif

| Les réactifs | $\Delta_f H^\circ$ |
|----------------------------------|--------------------|
| CO | -26,41 |
| CO ₂ | -94,05 |
| CH ₃ OH | -48,04 |
| CHOH | -25,95 |
| H ₂ O | -57,8 |
| HCOOH | -90,51 |
| CH ₃ OCH ₃ | -56,12 |

Remarque :

L'enthalpie standard de formation de l'oxygène égal à 0.

Exemple de calcul : Réaction d'oxydation du méthanol :

$$\Delta rH^\circ = (N_{H_2O} \cdot \Delta fH^\circ_{H_2O} + N_{CO_2} \cdot \Delta fH^\circ_{CO_2}) - (N_{CH_3OH} \cdot \Delta fH^\circ_{CH_3OH})$$

Le tableau suivant regroupe le résultat de notre calcul, ainsi l'enthalpie totale des réactions :

Tableau II.17: résultat des calculs des enthalpies

| Les réactifs | Quantité des réactifs (Kmole/h) | Nombre stœchiométrique de | Nombre stœchiométrique de | (kcal/mole) | (kcal/h) |
|----------------------------------|---------------------------------|---------------------------|---------------------------|-------------|------------------|
| CO | 1,293 | 1 | 0 | -67,64 | -87458,52 |
| CH ₃ OH | 0,353 | 1 | 2 | -161,61 | -57048,33 |
| CHOH | 0,64 | 1 | 1 | -125,9 | -80576 |
| HCOOH | 0,00082 | 1 | 1 | -61,34 | -50,3 |
| CH ₃ OCH ₃ | 0,0246 | 2 | 3 | -305,38 | -7521,35 |
| Total | / | / | / | / | -232654,5 |

Tableau 18: résultat des calculs des enthalpies

L'enthalpie totale des réactions : $\Delta rH = -232654,5$ Kcal/h

II.3.2.2. Calcul de l'enthalpie des réactifs :

Le calcul de l'enthalpie des réactifs est fait en utilisant la loi de Kirchoff, cependant nous devons calculer la capacité calorifique de chaque réactif en fonction de la température, avec la relation suivante :

$$\Delta rH = n \int \sum C_p \cdot \Delta T$$

Le calcul des capacités calorifique C_p de chaque constituant peut être calculé selon l'équation d'Antoine, donnée ci-dessous :

$$C_p = a + b \cdot T + c \cdot T^2$$

Avec a, b, c des constantes relatives au constituant, T est la température du constituant en degré kelvin.

Les constantes a, b, c de chaque constituant sont présentés dans l'ANNEXE7.

Le tableau suivant regroupe les valeurs des constantes a, b, c des constituants de bases de nos réactions d'oxydation ANNEXE8, ainsi la chaleur spécifique de chaque composant :

Tableau II.18: Les constantes de la capacité calorifique

| Effluents gazeux | Xi(%) | a | b | c | C_{pi} (Kcal/Kmol.K) |
|------------------------------------|--------------|----------|-------------|---------------------------|-----------------------------------------|
| N₂ | 84,83 | 6,91 | -0,00037583 | 1,9332. 10 ⁻⁶ | 6,0567 |
| O₂ | 10,73 | 6,095 | 0,0036363 | -0,000001711 | 6,9223. 10 ⁻¹ |
| CO | 0,96 | 6,7368 | 0,000400717 | 1,2851. 10 ⁻⁶ | 6,8926. 10 ⁻² |
| CO₂ | 0,66 | 5,3253 | 0,01431 | -8,3756. 10 ⁻⁶ | 4,1792. 10 ⁻² |
| CHOH | 0,3 | 9,5712 | -0,0091508 | 5,85825. 10 ⁻⁵ | 4,2934. 10 ⁻² |
| CH₃OH | 0,51 | 8,2284 | -0,0071473 | 0,000039507 | 5,8893. 10 ⁻² |
| H₂O | 1,98 | 7,7129 | 0,00046004 | 0,000002523 | 2,5908. 10 ⁻¹ |
| HCOOH | 0,001 | 7,5872 | 0,00177423 | 4,49116. 10 ⁻⁵ | 1,0072. 10 ⁻⁴ |
| C₂H₆O | 0,03 | 8,2858 | 0,01680043 | 0,000039507 | 4,1434. 10 ⁻³ |
| Total | 100 | / | / | / | 7,2248 |

L'enthalpie total des réactifs égal à : $\Delta H_r = -411452,36$ Kcal/h

II.3.2.3. Détermination de l'enthalpie des produits :

$$\Delta H_p = -(\Delta_r H + \Delta H_r)$$

$$\Delta H_p = 644106,86 \text{ Kcal/h}$$

II.3.2.4. Calcul de la température de sortie du réacteur :

A partir des résultats précédents, et la relation suivante :

$$\Delta H_p = n \int \sum C_p(\text{produits}) \cdot \Delta T$$

Nous allons pouvoir calculer la température de sortie du réacteur, en faisant la somme des DHp. Pour cela, nous allons développer la relation de l'enthalpie des produits.

La température varie de 298°K, donc la relation d'enthalpie des produits est la suivante :

$$\Delta H_p = n \cdot \int_{298}^{T_s} \sum C_p \Delta T$$

$$\Delta H_p = n \cdot \int_{298}^{T_s} \sum X_i (a + b \cdot T + c \cdot T^2)$$

Après intégration:

$$\Delta H_p = n \cdot \sum X_i (a \cdot (T_s - 298) + \frac{b}{2} (T_s^2 - 298^2) + \frac{c}{3} (T_s^3 - 298^3))$$

Tableau II.19: Compositions des produits et leurs chaleurs spécifiques

| Effluents gazeux | Xi(%) | a | b | c | C _{pi} (Kcal/Kmol.K) |
|-----------------------|-------|--------|-------------|--------------|----------------------------------|
| N₂ | 85,59 | 6,91 | -0,00037583 | 1,9332. 10-6 | 6,9697 |
| O₂ | 8,056 | 6,095 | 0,0036363 | -0,000001711 | 7,0267 |
| CO₂ | 2,174 | 5,3253 | 0,01431 | -8,3756 | 8,8459 |
| H₂O | 4,172 | 7,7129 | 0,00046004 | 0,000002523 | 8,0740 |
| Total | 100 | / | / | / | 7,80 |

La formule de l'enthalpie des produits après calculé :

$$\Delta H_p = 6,4 \cdot 10^{-5} \cdot T^3 + 0,021 \cdot T^2 + 912,78 \cdot T - 290857,3$$

Après avoir calculé l'enthalpie des produits, on a obtenu une équation de troisième ordre dont l'une de ses solutions est la température de sortie du réacteur.

D'après les calculs précédents, la somme des ΔH_p égal à **644106,86 Kcal/h** ; ainsi :

$$6,4 \cdot 10^{-5} \cdot T^3 + 0,021 \cdot T^2 + 912,78 \cdot T - 290857,3 = 644106,86$$

$$6,4 \cdot 10^{-5} \cdot T^3 + 0,021 \cdot T^2 + 912,78 \cdot T - 934964,16 = 0$$

Donc, la température de sortie du réacteur égal à : $T = 671 \text{ }^\circ\text{C}$

Conclusion Générale :

Le complexe CP1Z produit des produits synthétiques en quantités énormes et est donc confronté à des problèmes d'émissions de gaz toxiques appelés composés organiques volatils COV qui affectent l'environnement. Légalement, ils ne doivent pas dépasser 200 mg/. Afin de réduire ces émissions et d'offrir une meilleure qualité de l'air, il est possible de proposer un moyen de les gérer.

L'objectif assigné à ce travail, était de proposer un procédé de traitement des polluants gazeux de la colonne C101, afin de réduire ou éliminer leurs teneurs dans le gaz traité, et assurer une meilleure qualité d'air.

Nous avons donc utilisé un réacteur catalytique à base de platine, déterminer la composition du gaz à traiter, analysé les conditions de fonctionnement du réacteur, la teneur en oxygène et les bilans enthalpiques ainsi que la température finale de la réaction. Un calcul complet a également été réalisé pour déterminer les dimensions et les caractéristiques du réacteur.

Recommandation

Après cette étude, nous proposons les recommandations suivantes :

- Etude de la colonne d'absorption, et indiquer les principaux problèmes qui conduisent au dégagement du formaldéhyde dans les effluents gazeux et liquide ;
- Etude des performances de l'unité 100, afin de réduire ou éliminer les effluents gazeux
- Installation d'un analyseur en amont et en aval de l'unité de traitement, afin d'établir des analyses périodiques pour le suivi de l'état du catalyseur ;
- Etablir une étude technico-économique pour déterminer la rentabilité de l'unité.

Référence bibliographiques :

[1] F. MATINEZ, Rapport de stage société pétrolière SONATRACH, Rapport de stage, Ingénieur d'état en RO 2008, Université des sciences et de la technologie Houari Boumediène, 2008.

[2] Z. CHEIKH, réutilisation des eaux de condensation de la colonne d'absorption, Projet professionnel de fin de formation pour l'obtention du diplôme d'ingénieur spécialisé En Pétrochimie, école de Boumerdes, institut algérien du pétrole IAP, Avril 2015.

[3] CP1/Z méthanol et résines synthétique SONATRACH, manuel opératoire sur la production des résines, Arzew, Algérie, 21/10/1975.

[4] Actu environnement www.actu-environnement.com

[5] M. BOUZIANE, BIODEGRADATION DU METHANOL EN REACTEUR BATCH ET ETUDE DE L'INFLUENCE DES PARAMETRES PHYSICO- CHIMIQUE SUR LA CINETIQUE, magister en chimie physique et analytique, département chimie, faculté des sciences exactes, université Montoury CANSTANTINE, 06/07/2009.

[6] Directive n°1999/13 CE du 11/03/99 relative à la réduction des émissions de composés organiques volatils due à l'utilisation de solvants organiques dans certaines activités et installation, [EN LIGNE]

[7] Agence de la transition écologique www.ademe.fr

[8] M. LHUISIER, éco-procédé de traitement de COV et de valorisation d'huiles de collecte, thèse de doctorat, spécialité chimie, procédé, environnement, université de Bretagne, 03/07/2019.

[9] F. RACHEDI, CONCEPTION, DEVELOPPEMENT ET CARACTERISATION DE MICROREACTEURS POUR LA DEGRADATION DES COMPOSES ORGANIQUES VOLATILS PAR OXYDATION CATALYTIQUE SUR PLATINE: APPLICATION A L'ACETONE, A LA METHYLETHYLACETONE ET AU TOLUENE, thèse de doctorat, spécialité génie des procédés et de l'environnement, laboratoire génie chimique, université de toulouse, 24/03/2014.

[10] A. TAFAT BOUZID, SYNTHÈSE DES FORMULES DU CALCUL DES PERTES DE CHARGES ET ANALYSE DE L'INCERTITUDE SUR LE CHOIX DE LA RUGOSITÉ,

mémoire de master, département d'hydraulique urbaine, option alimentation en eau potable, école nationale supérieure d'hydraulique Arbaoui Abdellah, mars 2015.

[11] A.CHEURFI, S.AMARACHE, étude et maintenance du compresseur centrifuge BCL406 problème d'encrassements, mémoire de master, département de maintenance industrielle, faculté des sciences de l'ingénieur, université M'hamed Bouguera Bumerdes, 2017.

[12] PIERRE TRAMBOUZE, JEAN-PAUL EUZEN, chemical reactors from design to operation, éditions technip, Paris, 2004.

[13] PIERRE WHITTIER, mise en œuvre des catalyseurs solides, V7.

LISTES DES ANNEXES

ANNEXE1 : la réglementation algérienne concernant le rejet des COV.

| 17 Rabie El Aouel 1427 16 avril 2006 | | JOURNAL OFFICIEL DE LA REPUBLIQUE ALGERIENNE N° 24 | | 13 |
|---------------------------------------------------------|--------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|----------------------------------------------------|-----------------|--------------------------------------------------------|
| ANNEXE I | | | | |
| VALEURS LIMITES DES PARAMETRES DE REJETS ATMOSPHERIQUES | | | | |
| N° | PARAMETRES | UNITE | VALEURS LIMITES | TOLERANCE DES VALEURS LIMITES DES INDUSTRIES ANCIENNES |
| 1 | Poussières totales | mg/Nm ³ | 50 | 100 |
| 2 | Oxydes de soufre (exprimés en dioxyde de soufre) | " | 300 | 500 |
| 3 | Oxydes d'azote (exprimés en dioxyde d'azote) | " | 300 | 500 |
| 4 | Protoxyde d'azote | " | 300 | 500 |
| 5 | Chlorure d'hydrogène et autres composés inorganiques gazeux du chlore (exprimé en HCL). | " | 50 | 100 |
| 6 | Fluor et composés inorganiques du fluor (gaz, vésicule et particules), (exprimés en HF) | " | 10 | 20 |
| 7 | Composés organiques volatils (Rejet total de composés organiques volatils à l'exclusion du méthane) | " | 150 | 200 |
| 8 | Métaux et composés de métaux (gazeux et particulaires) | " | 5 | 10 |
| 9 | Rejets de cadmium, mercure et thallium, et de leurs composés | " | 0,25 | 0,5 |
| 10 | Rejets d'arsenic, sélénium et tellure et de leurs composés autres que ceux visés parmi les rejets de substances cancérigènes | " | 1 | 2 |
| 11 | Rejets d'antimoine, chrome, cobalt, cuivre, étain, manganèse, nickel, vanadium et zinc, et de leurs composés autres que ceux visés parmi les rejets de substances cancérigènes | " | 5 | 10 |
| 12 | Phosphine, phosgène | " | 1 | 2 |
| 13 | Acide cyanhydrique exprimé en HCN, brome et composés inorganiques gazeux du chrome exprimés en HBr, chlore exprimé en HCl, Hydrogène sulfuré | " | 5 | 10 |
| 14 | Ammoniac | " | 50 | 100 |
| 15 | Amiante | " | 0,1 | 0,5 |
| 16 | Autres fibres que l'amiante | " | 1 | 50 |

ANNEXE2 : La température idéale pour le fonctionnement du procédé.

Table 10-1 Comparison of process temperatures for the oxidation of VOCs in afterburning processes

| Pollutant | Temperature Catalytical processing (°C) | Temperature Thermal processing (°C) |
|---------------------|-----------------------------------------|-------------------------------------|
| Formaldehyde | 300 | 800 |
| CO | 250 | 760 |
| Styrene | 250 | 760 |
| Solvents | 350 | 760 |
| Phenol/formaldehyde | 350 | 800 |
| Phenol/creosol | 400 | 800 |
| Ethylacetate | 350-400 | 760 |

Table 10-1 Comparison of process temperatures for the oxidation of VOCs in afterburning processes

| Pollutant | Temperature Catalytical processing (°C) | Temperature Thermal processing (°C) |
|---------------------|-----------------------------------------|-------------------------------------|
| Formaldehyde | 300 | 800 |
| CO | 250 | 760 |
| Styrene | 250 | 760 |
| Solvents | 350 | 760 |
| Phenol/formaldehyde | 350 | 800 |
| Phenol/creosol | 400 | 800 |
| Ethylacetate | 350-400 | 760 |

CO
Dimethylether
Methanol
Formaldehyde

The feed gas is heated up to ca. 200 °C and can completely be oxidized by the catalyst. During this process the temperature rises up to 300-450 °C, dependent to the heat recovery system applied in the plant. The degree of conversion depends to the process temperature and the catalyst age. The following approximate results can be obtained:

| Catalyst temperature (°C) | Conversion of the pollutants [%] |
|---------------------------|----------------------------------|
| 300 | 90% |
| 350 | 99.0% |
| 450 | 99.9% |

ANNEXE3 : La viscosité des gaz.

| Effluents gaz | Mi*Xi | Ci | T des gaz(K) | A | B | C |
|---------------------------------|---------|------------|--------------|---------|---------|-----------------|
| N ₂ | 23,7524 | 0,83739709 | 602 | 42,606 | 0,475 | -0,0000988 |
| O ₂ | 3,4336 | 0,12105247 | 602 | 44,224 | 0,562 | -0,000113 |
| CO | 0,2688 | 0,00947661 | 602 | 23,811 | 0,53944 | - 0,00015411 |
| CO ₂ | 0,2904 | 0,01023813 | 602 | 11,811 | 0,49838 | - 0,00010851 |
| CH ₃ OH | 0,096 | 0,00338451 | 602 | -14,236 | 0,38935 | -6,2762E- 05 |
| CHOH | 0,1527 | 0,00538348 | 602 | -6,439 | 0,44802 | -0,0001013 |
| H ₂ O | 0,3564 | 0,01256498 | 602 | -36,826 | 0,429 | -0,0000162 |
| HCOOH | 0,00046 | 1,6217E-05 | 602 | -13,139 | 0,27486 | 0,00019189 |
| C ₂ H ₆ O | 0,0138 | 0,00048652 | 602 | 1,499 | 0,30741 | -4,4479E- 05 |

ANNEXE 4: Caractéristiques du catalyseur Pt-Al₂O₃

|  Shandong Avant New Material Technology CO., LTD Activated Alumina Technical Data Sheet | | | | | | | | | | |
|---------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|--------------------|----------------------------------|--------------------|----------------------------------|--------------------|---------------------|----------------------------------|--------------------|-------------------------------|-----|
| Series | Specification (mm) | Al ₂ O ₃ % | SiO ₂ % | Fe ₂ O ₃ % | Na ₂ O% | Bulk Density (g/ml) | Surface Area (m ² /g) | Pore volume (ml/g) | Crushing Strength (N/Granule) | |
| Precious Metal Catalyst Carrier | AM-PMS | Φ2.5-3.8 | ≥92 | ≤0.10 | ≤0.04 | ≤0.10 (MAX:≤0.40) | 0.5-0.7 | ≥200 | ≥0.42 | ≥50 |
| | | Φ2-4 | ≥92 | ≤0.10 | ≤0.04 | ≤0.10 (MAX:≤0.40) | 0.5-0.7 | ≥200 | ≥0.42 | ≥60 |
| Thin-shell type AL ₂ O ₃ supported Pt-Pd double noble metal catalyst | AVANT-CC-00 | 2-3mm | ≥92 | ≤0.10 | ≤0.04 | ≤0.45 | ≤0.70 | ≥200 | ≥0.40 | ≥30 |
| Precious Metal Catalyst Carrier | AM-PMS-B | Φ3-5 | ≥92 | ≤0.10 | ≤0.04 | ≤0.1 | ≤1.0 | ≥200 | ≥0.42 | ≥50 |
| | | Φ2.5-3.8 | ≥92 | ≤0.10 | ≤0.04 | ≤0.40 | 0.5-0.7 | ≥200 | ≥0.42 | ≥50 |
| | | Φ2-4 | ≥92 | ≤0.10 | ≤0.04 | ≤0.40 | 0.5-0.7 | ≥200 | ≥0.45 | ≥60 |

ANNEXE 5 : Les volumes molaires des différents composés.

| TABLE D-1. SPECIAL ATOMIC DIFFUSION VOLUMES | | | |
|----------------------------------------------------------|------|------------------------------------|-------|
| <i>Atomic and Structural Diffusion Volume Increments</i> | | | |
| C | 16.5 | (Cl) | 19.5 |
| H | 1.98 | (S) | 17.0 |
| O | 5.48 | Aromatic or heterocyclic rings | -20.2 |
| (N) ^a | 5.69 | | |
| <i>Diffusion Volumes of Simple Molecules</i> | | | |
| H ₂ | 7.07 | CO ₂ | 26.9 |
| D ₂ | 6.70 | N ₂ O | 35.9 |
| He | 2.88 | NH ₃ | 14.9 |
| N ₂ | 17.9 | H ₂ O | 12.7 |
| O ₂ | 16.6 | (CCl ₂ F ₂) | 114.8 |
| Air | 20.1 | (SF ₆) | 69.7 |
| Ne | 5.59 | (Cl ₂) | 37.7 |
| Ar | 16.1 | (Br ₂) | 67.2 |
| Kr | 22.8 | (SO ₂) | 41.1 |
| (Xe) | 37.9 | | |
| CO | 18.9 | | |

^aParentheses indicate that the value is based on only a few data points.
 Source: E. N. Fuller, P. D. Schettler, and J. C. Giddings, *Ind. Eng. Chem.*, 58(5), 19 (1966).

ANNEXE6 : L'intégrale de collision à utiliser avec le potentiel de Lennard-Jones.

tableau 19 - Valeurs des intégrales de collision (obtenues à partir des potentiels de Lennard-Jones).

| $\frac{KT}{E_{AB}}$ | Ω_0 | $\frac{KT}{E_{AB}}$ | Ω_0 | $\frac{KT}{E_{AB}}$ | Ω_0 |
|---------------------|------------|---------------------|------------|---------------------|------------|
| 0,30 | 2,662 | 1,65 | 1,153 | 4,0 | 0,8836 |
| 0,35 | 2,476 | 1,70 | 1,140 | 4,1 | 0,8788 |
| 0,40 | 2,318 | 1,75 | 1,128 | 4,2 | 0,8740 |
| 0,45 | 2,184 | 1,80 | 1,116 | 4,3 | 0,8694 |
| 0,50 | 2,066 | 1,85 | 1,105 | 4,4 | 0,8652 |
| 0,55 | 1,966 | 1,90 | 1,094 | 4,5 | 0,8610 |
| 0,60 | 1,877 | 1,95 | 1,084 | 4,6 | 0,8568 |
| 0,65 | 1,798 | 2,00 | 1,075 | 4,7 | 0,8530 |
| 0,70 | 1,729 | 2,1 | 1,057 | 4,8 | 0,8492 |
| 0,75 | 1,667 | 2,2 | 1,041 | 4,9 | 0,8456 |
| 0,80 | 1,612 | 2,3 | 1,026 | 5,0 | 0,8422 |
| 0,85 | 1,562 | 2,4 | 1,012 | 6 | 0,8124 |
| 0,90 | 1,517 | 2,5 | 0,9996 | 7 | 0,7896 |
| 0,95 | 1,476 | 2,6 | 0,9878 | 8 | 0,7712 |
| 1,00 | 1,439 | 2,7 | 0,9770 | 9 | 0,7556 |
| 1,05 | 1,406 | 2,8 | 0,9672 | 10 | 0,7424 |
| 1,10 | 1,375 | 2,9 | 0,9576 | 20 | 0,6640 |
| 1,15 | 1,346 | 3,0 | 0,9490 | 30 | 0,6232 |
| 1,20 | 1,320 | 3,1 | 0,9406 | 40 | 0,5960 |
| 1,25 | 1,296 | 3,2 | 0,9328 | 50 | 0,5756 |
| 1,30 | 1,273 | 3,3 | 0,9236 | 60 | 0,5596 |
| 1,35 | 1,253 | 3,4 | 0,9186 | 70 | 0,5464 |
| 1,40 | 1,233 | 3,5 | 0,9120 | 80 | 0,5352 |
| 1,45 | 1,215 | 3,6 | 0,9058 | 90 | 0,5256 |
| 1,50 | 1,198 | 3,7 | 0,8998 | 100 | 0,5130 |
| 1,55 | 1,182 | 3,8 | 0,8942 | 200 | 0,4644 |
| 1,60 | 1,167 | 3,9 | 0,8888 | 400 | 0,4170 |

ANNEXE 7 : Les enthalpies de formation des différents composés.

CHALEUR DE FORMATION : $(\Delta H_f^\circ)_{298}$ en kcal/mole (3)
(état de gaz parfait)

| | $(\Delta H_f^\circ)_{298}$ | | $(\Delta H_f^\circ)_{298}$ |
|---------------------------------|----------------------------|-------------------------------|----------------------------|
| Oxyde de carbone | -26,416 | NO | 21,6 |
| Gaz carbonique | -94,052 | N ₂ O | 19,49 |
| Eau | -57,798 | NO ₂ | 8,091 |
| Soufre diatomique | 29,860 | N ₂ O ₄ | 2,309 |
| SO ₂ | -70,960 | | |
| SO ₃ | -94,450 | Méthanol | -48,1 |
| H ₂ S | -4,815 | Ethanol | -56,24 |
| CS ₂ | 27,550 | n-propanol | -61,0 |
| COS | 32,800 | Isopropanol | -65,13 |
| Brome diatomique | 7,340 | Phénol | -23,05 |
| Iode diatomique | 14,876 | Alcool allylique | -29,73 |
| HF | -64,200 | Formol | -27,7 |
| HCl | -22,063 | Acéaldéhyde | -39,76 |
| HBr | -8,66 | Oxyde d'éthylène | -12,19 |
| HI | 6,20 | Acétone | -51,79 |
| Cyanogène | 73,6 | Cétène | -14,6 |
| Acide cyanhydrique | 31,2 | Acide formique | -90,49 |
| CH ₃ Cl | -19,58 | | |
| CH ₂ Cl ₂ | -31,48 | Méthanethiol | -5,47 |
| CHCl ₃ | -24,0 | Ethanethiol | -11,18 |
| CCl ₄ | -25,5 | Diméthylsulfure | -24,40 |

Activer Windows

| Name | Mol. form. | $\Delta_f H^\circ(c)/$ kJ mol ⁻¹ | $\Delta_f G^\circ(c)/$ kJ mol ⁻¹ | $S^\circ(c)/$ J mol ⁻¹ K ⁻¹ | $C_p(c)/$ J mol ⁻¹ K ⁻¹ | $\Delta_f H^\circ(l)/$ kJ mol ⁻¹ | $\Delta_f G^\circ(l)/$ kJ mol ⁻¹ | $S^\circ(l)/$ J mol ⁻¹ K ⁻¹ | $C_p(l)/$ J mol ⁻¹ K ⁻¹ | $\Delta_f H^\circ(g)/$ kJ mol ⁻¹ | $\Delta_f G^\circ(g)/$ kJ mol ⁻¹ | $S^\circ(g)/$ J mol ⁻¹ K ⁻¹ | $C_p(g)/$ J mol ⁻¹ K ⁻¹ |
|---------------------------|------------------------------------------------|------------------------------------------------|------------------------------------------------|---------------------------------------------------------|-----------------------------------------------------|------------------------------------------------|------------------------------------------------|---------------------------------------------------------|-----------------------------------------------------|------------------------------------------------|------------------------------------------------|---------------------------------------------------------|-----------------------------------------------------|
| N-Ethylurea | C ₂ H ₅ N ₂ O | -357,8 | | | | | | | | | | | |
| Ethyl vinyl ether | C ₄ H ₈ O | | | | | -167,4 | | | | -140,8 | | | |
| Ethynylsilane | C ₂ H ₂ Si | | | | | | | | | | | 269,4 | 72,6 |
| Europium | Eu | 0,0 | | 77,8 | 27,7 | | | | | 175,3 | 142,2 | 188,8 | 20,8 |
| Europium(III) chloride | Cl ₃ Eu | -936,0 | | | | | | | | | | | |
| Europium(II,III) oxide | Eu ₂ O ₄ | -2272,0 | -2142,0 | 205,0 | | | | | | | | | |
| Europium(III) oxide | Eu ₂ O ₃ | -1651,4 | -1556,8 | 146,0 | 122,2 | | | | | | | | |
| Fermium | Fm | 0,0 | | | | | | | | | | | |
| Fluoranthene | C ₁₆ H ₁₀ | 189,9 | | 230,6 | 230,2 | | | | | 289,0 | | | |
| 9H-Fluorene | C ₁₆ H ₁₀ | 89,9 | | 207,3 | 203,1 | | | | | 175,0 | | | 173,1 |
| Fluorine | F ₂ | | | | | | | | | 0,0 | | 202,8 | 31,3 |
| Fluorine (atomic) | F | | | | | | | | | 79,4 | 62,3 | 158,8 | 22,7 |
| Fluorine monoxide | F ₂ O | | | | | | | | | 24,5 | 41,8 | 247,5 | 43,3 |
| Fluorine oxide | FO | | | | | | | | | 109,0 | 105,3 | 216,4 | 32,0 |
| Fluorine superoxide (FOO) | FO ₂ | | | | | | | | | 25,4 | 39,4 | 259,5 | 44,5 |
| Fluoroacetylene | C ₂ HF | | | | | | | | | | | 231,7 | 52,4 |
| Fluorobenzene | C ₆ H ₅ F | | | | | -150,6 | | 205,9 | 146,4 | -115,9 | | | |
| Fluoroborane(1) | BF | | | | | | | | | -122,2 | -149,8 | 200,5 | 29,6 |
| Fluoroethane | C ₂ H ₅ F | | | | | | | | | | | 264,5 | 58,6 |
| Fluoroethene | C ₂ H ₃ F | | | | | | | | | | | | |
| Fluorogermane | FGeH ₃ | | | | | | | | | | | 252,8 | 51,6 |
| Fluoromethane | CH ₃ F | | | | | | | | | | | 222,9 | 37,5 |
| Fluoroxyborane | BFO | | | | | | | | | | | -607,0 | |
| 1-Fluoropropane | C ₃ H ₇ F | | | | | | | | | | | -285,9 | |
| 2-Fluoropropane | C ₃ H ₇ F | | | | | | | | | | | -293,5 | |
| Fluorosilane | FH ₃ Si | | | | | | | | | | | 238,4 | 47,4 |
| Fluorosilyldyne | FSi | | | | | | | | | 7,1 | -24,3 | 225,8 | 32,6 |
| 4-Fluorotoluene | C ₇ H ₇ F | | | | | -186,9 | | | 171,2 | -147,4 | | | |
| Formaldehyde | CH ₂ O | | | | | | | | | -108,6 | -102,5 | 218,8 | 35,4 |
| Formamide | CH ₃ NO | | | | | -254,0 | | | | -193,9 | | | |
| Formic acid | CH ₂ O ₂ | | | | | -425,0 | -361,4 | 129,0 | 99,0 | -378,7 | | | |
| Formyl fluoride | CHFO | | | | | | | | | | | 246,6 | 39,9 |
| Francium | Fr | 0,0 | | 95,4 | | | | | | | | | |
| β-D-Fructose | C ₆ H ₁₂ O ₆ | -1265,6 | | | | | | | | | | | |

Activer Windows
Accédez aux

| Substance | State | $\Delta_f H^\circ(298)/$ kJ mol ⁻¹ | $S^\circ(298)/$ J mol ⁻¹ K ⁻¹ | $H^\circ(298)-H^\circ(0)/$ kJ mol ⁻¹ | Substance | State | $\Delta_f H^\circ(298)/$ kJ mol ⁻¹ | $S^\circ(298)/$ J mol ⁻¹ K ⁻¹ | $H^\circ(298)-H^\circ(0)/$ kJ mol ⁻¹ |
|------------------------------------------|---------------|--------------------------------------------------|--------------------------------------------------------|----------------------------------------------------|---------------------------------------------|---------------|--------------------------------------------------|--------------------------------------------------------|----------------------------------------------------|
| Ag | cr | 0 | 42.55 ± 0.20 | 5.745 ± 0.020 | HPO ₄ ²⁻ | aq | -1299.0 ± 1.5 | -33.3 ± 1.5 | |
| Ag | g | 284.9 ± 0.8 | 172.997 ± 0.004 | 6.197 ± 0.001 | HSO ₄ ⁻ | aq | -886.9 ± 1.0 | 131.7 ± 3.0 | |
| Ag ⁺ | aq | 105.79 ± 0.08 | 73.45 ± 0.40 | | H ₂ | g | 0 | 130.690 ± 0.003 | 8.468 ± 0.001 |
| AgCl | cr | -127.01 ± 0.05 | 96.25 ± 0.20 | 12.033 ± 0.020 | H ₂ O | l | -285.830 ± 0.040 | 69.95 ± 0.03 | 13.273 ± 0.020 |
| Al | cr | 0 | 28.30 ± 0.10 | 4.540 ± 0.020 | H ₂ O | g | -241.826 ± 0.040 | 188.835 ± 0.010 | 9.905 ± 0.005 |
| Al | g | 330.0 ± 4.0 | 164.554 ± 0.004 | 6.919 ± 0.001 | H ₂ PO ₄ ⁻ | aq | -1302.6 ± 1.5 | 92.5 ± 1.5 | |
| Al ³⁺ | aq | -538.4 ± 1.5 | -325 ± 10 | | H ₂ S | g | -20.8 ± 0.5 | 205.81 ± 0.06 | 9.957 ± 0.010 |
| AlF ₃ | cr | -1510.4 ± 1.3 | 66.5 ± 0.5 | 11.62 ± 0.04 | H ₂ S | aq, undissoc. | -38.6 ± 1.5 | 126 ± 5 | |
| Al ₂ O ₃ | cr, corundum | -1675.7 ± 1.3 | 50.92 ± 0.10 | 10.016 ± 0.020 | H ₂ BO ₃ | cr | -1094.8 ± 0.8 | 89.95 ± 0.60 | 13.52 ± 0.04 |
| Ar | g | 0 | 154.846 ± 0.003 | 6.197 ± 0.001 | H ₂ BO ₃ | aq, undissoc. | -1072.8 ± 0.8 | 162.4 ± 0.6 | |
| B | cr, rhombic | 0 | 5.90 ± 0.08 | 1.222 ± 0.008 | He | g | 0 | 126.153 ± 0.002 | 6.197 ± 0.001 |
| B | g | 565 ± 5 | 153.436 ± 0.015 | 6.316 ± 0.002 | Hg | l | 0 | 75.90 ± 0.12 | 9.342 ± 0.008 |
| BF ₃ | g | -1136.0 ± 0.8 | 254.42 ± 0.20 | 11.650 ± 0.020 | Hg | g | 61.38 ± 0.04 | 174.971 ± 0.005 | 6.197 ± 0.001 |
| B ₂ O ₃ | cr | -1273.5 ± 1.4 | 53.97 ± 0.30 | 9.301 ± 0.040 | Hg ²⁺ | aq | 170.21 ± 0.20 | -36.19 ± 0.80 | |
| Be | cr | 0 | 9.50 ± 0.08 | 1.950 ± 0.020 | HgO | cr, red | -90.79 ± 0.12 | 70.25 ± 0.30 | 9.117 ± 0.025 |
| Be | g | 324 ± 5 | 136.275 ± 0.003 | 6.197 ± 0.001 | Hg ₂ ²⁺ | aq | 166.87 ± 0.50 | 65.74 ± 0.80 | |
| BeO | cr | -609.4 ± 2.5 | 13.77 ± 0.04 | 2.837 ± 0.008 | Hg ₂ Cl ₂ | cr | -265.37 ± 0.40 | 191.6 ± 0.8 | 23.35 ± 0.20 |
| Br | aq | -121.41 ± 0.15 | 82.55 ± 0.20 | | Hg ₂ SO ₄ | cr | -743.09 ± 0.40 | 200.70 ± 0.20 | 26.070 ± 0.030 |
| Br | g | 111.87 ± 0.12 | 175.018 ± 0.004 | 6.197 ± 0.001 | I | aq | -56.78 ± 0.05 | 106.45 ± 0.30 | |
| Br ₂ | l | 0 | 152.21 ± 0.30 | 24.52 ± 0.01 | I | g | 106.76 ± 0.04 | 180.787 ± 0.004 | 6.197 ± 0.001 |
| Br ₂ | g | 30.91 ± 0.11 | 245.468 ± 0.005 | 9.725 ± 0.001 | I ₂ | cr | 0 | 116.14 ± 0.30 | 13.196 ± 0.040 |
| C | cr, graphite | 0 | 5.74 ± 0.10 | 1.050 ± 0.025 | I ₂ | g | 62.42 ± 0.08 | 280.687 ± 0.005 | 10.116 ± 0.001 |
| C | g | 716.68 ± 0.45 | 158.100 ± 0.003 | 6.536 ± 0.001 | K | cr | 0 | 64.68 ± 0.20 | 7.088 ± 0.020 |
| CO | g | -110.53 ± 0.17 | 197.660 ± 0.004 | 8.671 ± 0.001 | K | g | 89.0 ± 0.8 | 160.341 ± 0.003 | 6.197 ± 0.001 |
| CO ₂ | g | -393.51 ± 0.13 | 213.785 ± 0.010 | 9.365 ± 0.003 | K ⁺ | aq | -252.14 ± 0.08 | 101.20 ± 0.20 | |
| CO ₂ ⁺ | aq, undissoc. | -413.26 ± 0.20 | 119.36 ± 0.60 | | Kr | g | 0 | 164.085 ± 0.003 | 6.197 ± 0.001 |
| CO ₃ ²⁻ | aq | -675.23 ± 0.25 | -50.0 ± 1.0 | | Li | cr | 0 | 29.12 ± 0.20 | 4.632 ± 0.040 |
| Ca | cr | 0 | 41.59 ± 0.40 | 5.736 ± 0.040 | Li | g | 159.3 ± 1.0 | 138.782 ± 0.010 | 6.197 ± 0.001 |
| Ca | g | 177.8 ± 0.8 | 154.887 ± 0.004 | 6.197 ± 0.001 | Li ⁺ | aq | -278.47 ± 0.08 | 12.24 ± 0.15 | |
| Ca ²⁺ | aq | -543.0 ± 1.0 | -56.2 ± 1.0 | | Mg | cr | 0 | 32.67 ± 0.10 | 4.998 ± 0.030 |
| CaO | cr | -634.92 ± 0.90 | 38.1 ± 0.4 | 6.75 ± 0.06 | Mg | g | 147.1 ± 0.8 | 148.648 ± 0.003 | 6.197 ± 0.001 |
| Cd | cr | 0 | 51.80 ± 0.15 | 6.247 ± 0.015 | Mg ²⁺ | aq | -467.0 ± 0.6 | -137 ± 4 | |
| Cd | g | 111.80 ± 0.20 | 167.749 ± 0.004 | 6.197 ± 0.001 | MgF ₂ | cr | -1124.2 ± 1.2 | 57.2 ± 0.5 | 9.91 ± 0.06 |
| Cd ²⁺ | aq | -75.92 ± 0.60 | -72.8 ± 1.5 | | MgO | cr | -601.60 ± 0.30 | 26.95 ± 0.15 | 5.160 ± 0.020 |
| CdO | cr | -258.35 ± 0.40 | 54.8 ± 1.5 | 8.41 ± 0.08 | N | g | 472.68 ± 0.40 | 153.301 ± 0.003 | 6.197 ± 0.001 |
| CdSO ₄ ·(8/3)H ₂ O | cr | -1729.30 ± 0.80 | 229.65 ± 0.40 | 35.56 ± 0.04 | NH ₃ | g | -45.94 ± 0.35 | 192.77 ± 0.05 | 10.043 ± 0.010 |
| Cl | aq | -167.080 ± 0.10 | 56.60 ± 0.20 | | NH ₄ ⁺ | aq | -133.26 ± 0.25 | 111.17 ± 0.40 | |
| Cl | g | 121.301 ± 0.008 | 165.190 ± 0.004 | 6.272 ± 0.001 | NO ₂ | aq | -206.85 ± 0.40 | 146.70 ± 0.40 | |
| ClO ₄ ⁻ | aq | -128.10 ± 0.40 | 184.0 ± 1.5 | | N ₂ | g | 0 | 191.609 ± 0.004 | 8.870 ± 0.001 |
| Cl ₂ | g | 0 | 223.081 ± 0.010 | 9.181 ± 0.001 | Na | cr | 0 | 51.30 ± 0.20 | 6.460 ± 0.020 |
| Cl ₂ | cr | 0 | 85.23 ± 0.40 | 7.711 ± 0.020 | Na | g | 107.5 ± 0.7 | 153.718 ± 0.003 | 6.197 ± 0.001 |
| Cl ₃ | g | 76.5 ± 1.0 | 175.601 ± 0.003 | 6.197 ± 0.001 | Na ⁺ | aq | -240.34 ± 0.06 | 58.45 ± 0.15 | |
| Cl ₃ ⁻ | aq | -258.00 ± 0.50 | 132.1 ± 0.5 | | Ne | g | 0 | 146.328 ± 0.003 | 6.197 ± 0.001 |
| Cu | cr | 0 | 33.15 ± 0.08 | 5.004 ± 0.008 | O | g | 249.18 ± 0.10 | 161.059 ± 0.003 | 6.725 ± 0.001 |
| Cu | g | 337.4 ± 1.2 | 166.398 ± 0.004 | 6.197 ± 0.001 | OH ⁻ | aq | -230.015 ± 0.040 | -10.90 ± 0.20 | |
| Cu ²⁺ | aq | 64.9 ± 1.0 | -98 ± 4 | | O ₂ | g | 0 | 205.152 ± 0.005 | 8.880 ± 0.002 |
| CuSO ₄ | cr | -771.4 ± 1.2 | 109.2 ± 0.4 | 16.86 ± 0.08 | P | cr, white | 0 | 41.09 ± 0.25 | 5.360 ± 0.015 |
| F | aq | -335.35 ± 0.65 | -13.8 ± 0.8 | | P | g | 316.5 ± 1.0 | 163.199 ± 0.003 | 6.197 ± 0.001 |
| F | g | 79.38 ± 0.30 | 158.751 ± 0.004 | 6.518 ± 0.001 | P ₂ | g | 144.0 ± 2.0 | 218.123 ± 0.004 | 8.904 ± 0.001 |
| F ₂ | g | 0 | 202.781 ± 0.005 | 8.825 ± 0.001 | P ₄ | g | 58.9 ± 0.3 | 290.01 ± 0.50 | 14.16 ± 0.30 |

Thermochem

Activer V
Accédez au

| Name | Mol. form. | $\Delta_f H^\circ(c)/$ kJ mol ⁻¹ | $\Delta_f G^\circ(c)/$ kJ mol ⁻¹ | $S^\circ(c)/$ J mol ⁻¹ K ⁻¹ | $C_p^\circ(c)/$ J mol ⁻¹ K ⁻¹ | $\Delta_f H^\circ(l)/$ kJ mol ⁻¹ | $\Delta_f G^\circ(l)/$ kJ mol ⁻¹ | $S^\circ(l)/$ J mol ⁻¹ K ⁻¹ | $C_p^\circ(l)/$ J mol ⁻¹ K ⁻¹ | $\Delta_f H^\circ(g)/$ kJ mol ⁻¹ | $\Delta_f G^\circ(g)/$ kJ mol ⁻¹ | $S^\circ(g)/$ J mol ⁻¹ K ⁻¹ | $C_p^\circ(g)/$ J mol ⁻¹ K ⁻¹ |
|------------------------------|-----------------------------------------------------------------|------------------------------------------------|------------------------------------------------|------------------------------------------------------|--------------------------------------------------------|------------------------------------------------|------------------------------------------------|------------------------------------------------------|--------------------------------------------------------|------------------------------------------------|------------------------------------------------|------------------------------------------------------|--------------------------------------------------------|
| Diuron | C ₈ H ₁₀ Cl ₂ N ₂ O | -329.0 | | | | | | | | | | | |
| cis-1,2-Divinylcyclobutane | C ₆ H ₁₀ | | | | | 124.3 | | | | 166.5 | | | |
| trans-1,2-Divinylcyclobutane | C ₆ H ₁₀ | | | | | 101.3 | | | | 143.5 | | | |
| Divinyl ether | C ₄ H ₆ O | | | | | -39.8 | | | | -13.6 | | | |
| trans-13-Docosenoic acid | C ₂₂ H ₄₀ O ₂ | -960.7 | | | | | | | | | | | |
| 3,9-Dodecadiyne | C ₁₂ H ₁₈ | | | | | 197.8 | | | | | | | |
| 5,7-Dodecadiyne | C ₁₂ H ₁₈ | | | | | 181.5 | | | | | | | |
| Dodecane | C ₁₂ H ₂₆ | | | | | -350.9 | | | 375.8 | -289.4 | | | |
| Dodecanedioic acid | C ₁₂ H ₂₀ O ₄ | -1130.0 | | | | | | | | -976.9 | | | |
| Dodecanoic acid | C ₁₂ H ₂₄ O ₂ | -774.6 | | | 404.3 | -737.9 | | | | -642.0 | | | |
| 1-Dodecanol | C ₁₂ H ₂₆ O | | | | | -528.5 | | | 438.1 | -436.6 | | | |
| 1-Dodecane | C ₁₂ H ₂₆ | | | | | -226.2 | | 484.8 | 360.7 | -165.4 | | | |
| Dotriacontane | C ₃₂ H ₆₆ | -968.3 | | | | | | | | -697.2 | | | |
| Dysprosium | Dy | 0.0 | | 75.6 | 29.2 | | | | | 290.4 | 254.4 | 196.6 | 20.8 |
| Dysprosium(III) bromide | Br ₃ Dy | -836.2 | | | | | | | | | | | |
| Dysprosium(III) chloride | Cl ₃ Dy | -1000.0 | | | | | | | | | | | |
| Dysprosium(III) iodide | I ₃ Dy | -620.5 | | | | | | | | | | | |
| Dysprosium(III) oxide | Dy ₂ O ₃ | -1863.1 | -1771.5 | 149.8 | 116.3 | | | | | | | | |
| Eicosanoic acid | C ₂₀ H ₄₀ O ₂ | -1011.9 | | | 545.1 | -940.0 | | | | -812.4 | | | |
| Einsteinium | Es | 0.0 | | | | | | | | | | | |
| Epichlorohydrin | C ₃ H ₅ ClO | | | | | -148.4 | | | 131.6 | -107.8 | | | |
| 1,2-Epoxybutane | C ₄ H ₈ O | | | | | -168.9 | | 230.9 | 147.0 | | | | |
| Erbium | Er | 0.0 | | 73.2 | 28.1 | | | | | 317.1 | 280.7 | 195.6 | 20.8 |
| Erbium chloride | Cl ₃ Er | -998.7 | | | 100.0 | | | | | | | | |
| Erbium fluoride | ErF ₃ | -1711.0 | | | | | | | | | | | |
| Erbium oxide | Er ₂ O ₃ | -1897.9 | -1808.7 | 155.6 | 108.5 | | | | | | | | |
| Ethane | C ₂ H ₆ | | | | | | | | | -84.0 | -32.0 | 229.2 | 52.5 |
| Ethanedial dioxime | C ₂ H ₄ N ₂ O ₂ | -90.5 | | | | | | | | | | | |
| 1,2-Ethanediamine | C ₂ H ₆ N ₂ | | | | | -63.0 | | | 172.6 | -18.0 | | | |
| 1,2-Ethanediol | C ₂ H ₆ O ₂ | | | | | -460.0 | | 163.2 | 148.6 | -392.2 | | 303.8 | 82.7 |
| 1,2-Ethanediol, diacetate | C ₆ H ₁₀ O ₄ | | | | | | | | 310.0 | | | | |
| Ethanedithioamide | C ₂ H ₄ N ₂ S ₂ | -20.8 | | | | | | | | 83.0 | | | |
| 1,2-Ethanedithiol | C ₂ H ₆ S ₂ | | | | | -54.3 | | | | -9.7 | | | |

Activer Win
Accédez aux pi

| Name | Mol. form. | $\Delta_f H^\circ(c)/$ kJ mol ⁻¹ | $\Delta_f G^\circ(c)/$ kJ mol ⁻¹ | $S^\circ(c)/$ J mol ⁻¹ K ⁻¹ | $C_p(c)/$ J mol ⁻¹ K ⁻¹ | $\Delta_f H^\circ(l)/$ kJ mol ⁻¹ | $\Delta_f G^\circ(l)/$ kJ mol ⁻¹ | $S^\circ(l)/$ J mol ⁻¹ K ⁻¹ | $C_p(l)/$ J mol ⁻¹ K ⁻¹ | $\Delta_f H^\circ(g)/$ kJ mol ⁻¹ | $\Delta_f G^\circ(g)/$ kJ mol ⁻¹ | $S^\circ(g)/$ J mol ⁻¹ K ⁻¹ | $C_p(g)/$ J mol ⁻¹ K ⁻¹ |
|----------------------------------------|-------------------------------------------------|------------------------------------------------|------------------------------------------------|---------------------------------------------------------|-----------------------------------------------------|------------------------------------------------|------------------------------------------------|---------------------------------------------------------|-----------------------------------------------------|------------------------------------------------|------------------------------------------------|---------------------------------------------------------|-----------------------------------------------------|
| Manganese(II) sulfide (α form) | MnS | -214.2 | -218.4 | 78.2 | 50.0 | | | | | | | | |
| D-Mannitol | C ₆ H ₁₄ O ₆ | | | | | -1314.5 | | | | | | | |
| D-Mannose | C ₆ H ₁₂ O ₆ | -1263.0 | | | | | | | | | | | |
| Mendelevium | Md | 0.0 | | | | | | | | | | | |
| Mercapto | HS | | | | | | | | | 142.7 | 113.3 | 195.7 | 32.3 |
| Mercury | Hg | | | | | 0.0 | | 75.9 | 28.0 | 61.4 | 31.8 | 175.0 | 20.8 |
| Mercury(I) bromide | Br ₂ Hg ₂ | -206.9 | -181.1 | 218.0 | | | | | | | | | |
| Mercury(II) bromide | Br ₂ Hg | -170.7 | -153.1 | 172.0 | | | | | | | | | |
| Mercury(I) carbonate | CHg ₂ O ₃ | -553.5 | -468.1 | 180.0 | | | | | | | | | |
| Mercury(I) chloride | Cl ₂ Hg ₂ | -265.4 | -210.7 | 191.6 | | | | | | | | | |
| Mercury(II) chloride | Cl ₂ Hg | -224.3 | -178.6 | 146.0 | | | | | | | | | |
| Mercury(I) iodide | Hg ₂ I ₂ | -121.3 | -111.0 | 233.5 | | | | | | | | | |
| Mercury(II) iodide (red) | HgI ₂ | -105.4 | -101.7 | 180.0 | | | | | | | | | |
| Mercury(II) oxalate | C ₂ HgO ₄ | -678.2 | | | | | | | | | | | |
| Mercury(II) oxide | HgO | -90.8 | -58.5 | 70.3 | 44.1 | | | | | | | | |
| Mercury(I) sulfate | Hg ₂ O ₄ S | -743.1 | -625.8 | 200.7 | 132.0 | | | | | | | | |
| Mercury(II) sulfate | HgO ₄ S | -707.5 | | | | | | | | | | | |
| Mercury(II) sulfide (red) | HgS | -58.2 | -50.6 | 82.4 | 48.4 | | | | | | | | |
| Mercury(II) telluride | HgTe | -42.0 | | | | | | | | | | | |
| Mesityl oxide | C ₉ H ₁₀ O | | | | | | | | 212.5 | | | | |
| Metaboric acid (β form) | BHO ₃ | -794.3 | -723.4 | 38.0 | | | | | | -561.9 | -551.0 | 240.1 | 42.2 |
| Metaphosphoric acid | HO ₃ P | -948.5 | | | | | | | | | | | |
| Metasilicic acid | H ₂ O ₃ Si | -1188.7 | -1082.4 | 134.0 | | | | | | | | | |
| Methacrylic acid | C ₄ H ₆ O ₂ | | | | | | | | 161.1 | | | | |
| Methane | CH ₄ | | | | | | | | | -74.6 | -50.5 | 186.3 | 35.7 |
| Methanethiol | CH ₃ S | | | | | -46.7 | -7.7 | 169.2 | 90.5 | -22.9 | -9.3 | 255.2 | 50.3 |
| Methanol | CH ₃ O | | | | | -239.2 | -166.6 | 126.8 | 81.1 | -201.0 | -162.3 | 239.9 | 44.1 |
| L-Methionine | C ₄ H ₉ NO ₂ S | -577.5 | | | | | | | | -413.5 | | | |
| 2-Methoxyethanol | C ₃ H ₈ O ₂ | | | | | | | | 171.1 | | | | |
| 2-Methoxyethyl acetate | C ₇ H ₁₄ O ₃ | | | | | | | | 310.0 | | | | |
| Methyl | CH ₃ | | | | | | | | | 145.7 | 147.9 | 194.2 | 38.7 |
| Methyl acetate | C ₃ H ₆ O ₂ | | | | | -445.9 | | | 141.9 | -413.3 | | 324.4 | 86.0 |

Activer Wind
Accédez aux par

ANNEXE8: Chaleur spécifique des composés organiques.

| Appendix E | | | | | | | | | |
|---------------------------------------------------------------------|-----------|-----------------------------------|--------|-------------|-------------|-------------|-------------|------|------|
| GAS HEAT CAPACITY FOR C ₁ TO C ₄ COMPOUNDS | | | | | | | | | |
| Carl L. Yaws Lamar University, Beaumont, Texas | | | | | | | | | |
| $C_p = A + BT + CT^2 + DT^3 + ET^4$ (C_p - joule/g-mol K, T - K) | | | | | | | | | |
| NO | FORMULA | NAME | A | B | C | D | E | TMIN | TMAX |
| 1 | CBrClF2 | BROMOCHLORODIFLUOROMETHANE | 18.387 | 2.7933E-01 | -3.7127E-04 | 2.2889E-07 | -5.3229E-11 | 100 | 1500 |
| 2 | CBrCl3 | BROMOTRICHLOROMETHANE | 24.484 | 3.2024E-01 | -4.9096E-04 | 3.3359E-07 | -8.2982E-11 | 100 | 1500 |
| 3 | CBrF3 | BROMOTRIFLUOROMETHANE | 17.208 | 2.4770E-01 | -2.9181E-04 | 1.6247E-07 | -3.4765E-11 | 100 | 1500 |
| 4 | CBr2F2 | DIBROMODIFLUOROMETHANE | 22.399 | 2.7403E-01 | -3.7433E-04 | 2.3638E-07 | -5.6067E-11 | 100 | 1500 |
| 5 | CClF3 | CHLOROTRIFLUOROMETHANE | 13.762 | 2.4951E-01 | -2.8194E-04 | 1.4962E-07 | -3.0450E-11 | 100 | 1500 |
| 6 | CCl4 | CHLORINE TETRACHLORIDE | 21.270 | 1.1915E-01 | -1.6822E-04 | 1.1457E-07 | -2.9210E-11 | 100 | 1500 |
| 7 | CCl2F2 | DICHLORODIFLUOROMETHANE | 14.877 | 2.8292E-01 | -3.6295E-04 | 2.1591E-07 | -4.8619E-11 | 100 | 1500 |
| 8 | CCl2O | PHOSGENE | 20.747 | 1.7972E-01 | -2.3242E-04 | 1.4224E-07 | -3.3087E-11 | 100 | 1500 |
| 9 | CCl3F | TRICHLOROFUOROMETHANE | 16.636 | 3.1336E-01 | -4.4426E-04 | 2.9612E-07 | -6.8556E-11 | 89 | 1500 |
| 10 | CCl4 | CARBON TETRACHLORIDE | 19.816 | 3.3311E-01 | -5.0511E-04 | 3.4057E-07 | -8.4294E-11 | 100 | 1500 |
| 11 | CF2O | CARBONYL FLUORIDE | 23.640 | 8.9853E-02 | -2.4575E-05 | -2.8140E-08 | 1.4023E-11 | 100 | 1500 |
| 12 | CF4 | CARBON TETRAFLUORIDE | 15.278 | 1.9916E-01 | -1.6369E-04 | 5.1686E-08 | -3.1820E-12 | 100 | 1500 |
| 13 | CHBr3 | TRIBROMOMETHANE | 33.356 | 1.7475E-01 | -1.9516E-04 | 1.0725E-07 | -2.3180E-11 | 100 | 1500 |
| 14 | CHClF2 | CHLORODIFLUOROMETHANE | 20.519 | 1.4746E-01 | -9.2440E-05 | 1.4379E-08 | 3.4356E-12 | 100 | 1500 |
| 15 | CHCl2F | DICHLOROFUOROMETHANE | 33.078 | 1.0473E-01 | -2.2510E-05 | -3.8822E-08 | 1.8245E-11 | 100 | 1500 |
| 16 | CHCl3 | CHLOROFORM | 22.487 | 1.9823E-01 | -2.1676E-04 | 1.1636E-07 | -2.4555E-11 | 100 | 1500 |
| 17 | CHF3 | TRIFLUOROMETHANE | 23.287 | 9.5385E-02 | 2.0049E-05 | -7.4432E-08 | 2.7428E-11 | 100 | 1500 |
| 18 | CN | HYDROGEN CYANIDE | 25.766 | 3.7969E-02 | -1.2416E-05 | -3.2240E-09 | 2.2610E-12 | 100 | 1500 |
| 19 | CH2BrCl | BROMOCHLOROMETHANE | 27.752 | 9.1021E-02 | -8.2541E-06 | -3.7449E-08 | 1.5156E-11 | 100 | 1500 |
| 20 | CH2Br2 | DIBROMOMETHANE | 28.305 | 1.0581E-01 | -4.7966E-05 | -2.6711E-09 | 5.1497E-12 | 100 | 1500 |
| 21 | CH2Cl2 | DICHLOROMETHANE | 26.694 | 8.3984E-02 | 8.9712E-06 | -5.0924E-08 | 1.8726E-11 | 100 | 1500 |
| 22 | CH2F2 | DIFLUOROMETHANE | 30.323 | 1.1176E-02 | 1.5809E-04 | -1.6323E-07 | 4.7955E-11 | 100 | 1500 |
| 23 | CH2I2 | DIIODOMETHANE | 28.918 | 1.1739E-01 | -7.3808E-05 | 1.7055E-08 | 1.2051E-14 | 100 | 1500 |
| 24 | CH2O | FORMALDEHYDE | 34.428 | -2.9779E-02 | 1.5104E-04 | -1.2733E-07 | 3.3887E-11 | 50 | 1500 |
| 25 | CH2O2 | FORMIC ACID | 31.745 | 7.4234E-03 | 1.8791E-04 | -1.9475E-07 | 5.7613E-11 | 50 | 1500 |
| 26 | CH3Br | METHYL BROMIDE | 29.146 | 2.4374E-02 | 1.0655E-04 | -1.1324E-07 | 3.3241E-11 | 100 | 1500 |
| 27 | CH3Cl | METHYL CHLORIDE | 27.385 | 2.6036E-02 | 1.0320E-04 | -1.0887E-07 | 3.1642E-11 | 100 | 1500 |
| 28 | CH3Cl3Si | METHYL TRICHLOROSILANE | 56.670 | 2.0064E-01 | -1.6721E-04 | 7.2533E-08 | -1.2684E-11 | 200 | 1500 |
| 29 | CH3F | METHYL FLUORIDE | 34.077 | -3.5019E-02 | 2.2031E-04 | -1.9564E-07 | 5.4104E-11 | 100 | 1500 |
| 30 | CH3I | METHYL IODIDE | 25.635 | 6.6836E-02 | 1.2292E-05 | -3.6742E-08 | 1.2301E-11 | 100 | 1500 |
| 31 | CH3NO | FORMAMIDE | 30.911 | 1.4363E-02 | 1.9281E-04 | -1.9805E-07 | 5.8262E-11 | 150 | 1500 |
| 32 | CH3NO2 | NITROMETHANE | 41.136 | 3.4367E-03 | 2.6380E-04 | -2.6898E-07 | 7.9503E-11 | 100 | 1500 |
| 33 | CH4 | METHANE | 34.942 | -3.9957E-02 | 1.9184E-04 | -1.5303E-07 | 3.9321E-11 | 50 | 1500 |
| 34 | CH4Cl2Si | METHYL DICHLOROSILANE | 37.250 | 2.3327E-01 | -1.9952E-04 | 9.1473E-08 | -1.7387E-11 | 200 | 1500 |
| 35 | CH4O | METHANOL | 40.046 | -3.8287E-02 | 2.4529E-04 | -2.1679E-07 | 5.9909E-11 | 100 | 1500 |
| 36 | CH4O3S | METHANESULFONIC ACID | 65.450 | -1.0363E-01 | 6.2784E-04 | -6.7194E-07 | 2.3114E-10 | 298 | 1000 |
| 37 | CH4S | METHYL MERCAPTAN | 40.307 | -3.6753E-03 | 1.8400E-04 | -1.7596E-07 | 5.0137E-11 | 100 | 1500 |
| 38 | CH5ClSi | METHYL CHLOROSILANE | 25.886 | 2.1064E-01 | -1.3055E-04 | 3.6499E-08 | -3.0118E-12 | 200 | 1500 |
| 39 | CH5N | METHYLAMINE | 40.039 | -1.5108E-02 | 2.5012E-04 | -2.3336E-07 | 6.5582E-11 | 100 | 1500 |
| 40 | CH6Si | METHYL SILANE | 25.277 | 1.2988E-01 | 5.9803E-05 | -1.2080E-07 | 4.0036E-11 | 100 | 1500 |
| 41 | CH4O8 | TETRAINITROMETHANE | 23.733 | 5.5312E-01 | -4.5854E-04 | 1.5286E-07 | -1.3967E-11 | 298 | 1500 |
| 42 | CO | CARBON MONOXIDE | 29.556 | -6.5807E-03 | 2.0130E-05 | -1.2227E-08 | 2.2617E-12 | 60 | 1500 |
| 43 | CO2 | CARBON DIOXIDE | 20.913 | 9.2794E-02 | -9.7014E-05 | 5.0943E-08 | -1.0615E-11 | 100 | 1500 |
| 44 | CO2 | CARBON DIOXIDE | 27.437 | 4.2315E-02 | -1.9555E-05 | 3.9968E-09 | -2.9872E-13 | 50 | 5000 |
| 45 | CS2 | CARBON DISULFIDE | 20.461 | 1.2299E-01 | -1.6184E-04 | 1.0199E-07 | -2.4444E-11 | 100 | 1500 |
| 46 | C2BrF3 | BROMOTRIFLUOROETHYLENE | 33.956 | 2.3803E-01 | -2.5448E-04 | 1.3108E-07 | -2.4462E-11 | 300 | 1200 |
| 47 | C2BrF2F4 | 1,2-DIBROMOTETRAFLUOROETHANE | 50.542 | 3.7777E-01 | -4.8770E-04 | 3.1054E-07 | -7.8174E-11 | 298 | 1200 |
| 48 | C2ClF3 | CHLOROTRIFLUOROETHYLENE | 28.388 | 2.5871E-01 | -2.9010E-04 | 1.5876E-07 | -3.3880E-11 | 300 | 1500 |
| 49 | C2ClF5 | CHLOROPENTAFLUROETHANE | 24.663 | 3.8598E-01 | -3.8927E-04 | 1.7751E-07 | -2.9992E-11 | 200 | 1500 |
| 50 | C2Cl2F4 | 1,2-DICHLOROTETRAFLUROETHANE | 17.183 | 4.8507E-01 | -5.9368E-04 | 3.3494E-07 | -7.1705E-11 | 273 | 1500 |
| 51 | C2Cl3F3 | 1,1,2-TRICHLOROTRIFLUOROETHANE | 42.456 | 4.0973E-01 | -5.0045E-04 | 2.8463E-07 | -6.1623E-11 | 200 | 1500 |
| 52 | C2Cl4 | TETRACHLOROETHYLENE | 34.627 | 3.1065E-01 | -4.5258E-04 | 3.2734E-07 | -9.4234E-11 | 298 | 1000 |
| 53 | C2Cl4F2 | 1,1,2,2-TETRACHLORODIFLUOROETHANE | 3.788 | 6.9339E-01 | -1.0927E-03 | 7.6080E-07 | -1.9434E-10 | 298 | 1000 |
| 54 | C2Cl4O | TRICHLOROACETYL CHLORIDE | 55.547 | 2.5821E-01 | -2.9449E-04 | 1.6054E-07 | -3.3869E-11 | 298 | 1500 |
| 55 | C2Cl6 | HEXACHLOROETHANE | 48.475 | 4.4117E-01 | -5.9638E-04 | 3.6922E-07 | -8.5631E-11 | 150 | 1500 |
| 56 | C2F4 | TETRAFLUROETHYLENE | 30.934 | 2.1587E-01 | -1.9110E-04 | 7.5713E-08 | -1.0493E-11 | 100 | 1500 |
| 57 | C2F6 | HEXAFLUROETHANE | 13.604 | 4.3503E-01 | -4.8164E-04 | 2.4841E-07 | -4.8897E-11 | 100 | 1500 |
| 58 | C2HBrClF3 | HALOTRANE | 65.307 | 1.2411E-01 | 8.8736E-05 | -1.7716E-07 | 6.3268E-11 | 100 | 1500 |
| 59 | C2HClF2 | 2-CHLORO-1,1-DIFLUOROETHYLENE | 19.530 | 2.4576E-01 | -2.5701E-04 | 1.3429E-07 | -2.7612E-11 | 298 | 1500 |
| 60 | C2HCl3 | TRICHLOROETHYLENE | 40.879 | 1.6218E-01 | -1.0399E-04 | 1.3310E-08 | 5.9103E-12 | 100 | 1500 |

| | | $C_p = A + BT + CT^2 + DT^3 + ET^4$ (C_p - joule/g-mol K, T - K) | | | | | | | |
|-----|-----------|---------------------------------------------------------------------|---------|-------------|-------------|-------------|-------------|------|------|
| NO | FORMULA | NAME | A | B | C | D | E | TMIN | TMAX |
| 61 | C2HCl3O | DICHLOROACETYL CHLORIDE | 38.143 | 2.3343E-01 | -1.9070E-04 | 5.6320E-08 | -2.5489E-12 | 298 | 1500 |
| 62 | C2HCl3O | TRICHLOROACETALDEHYDE | 46.176 | 2.3126E-01 | -2.3659E-04 | 1.2539E-07 | -2.7197E-11 | 298 | 1200 |
| 63 | C2HCl5 | PENTACHLOROETHANE | 28.297 | 4.3657E-01 | -5.5684E-04 | 3.3877E-07 | -7.8834E-11 | 100 | 1500 |
| 64 | C2HF3O2 | TRIFLUOROACETIC ACID | 9.274 | 3.9410E-01 | -4.3755E-04 | 2.4769E-07 | -5.7309E-11 | 298 | 1200 |
| 65 | C2HF5 | PENTAFLUOROETHANE | 40.370 | 2.0895E-01 | -4.5524E-05 | -8.2827E-08 | 3.9062E-11 | 100 | 1500 |
| 66 | C2H2 | ACETYLENE | 19.360 | 1.1519E-01 | -1.2374E-04 | 7.2370E-08 | -1.6590E-11 | 200 | 1500 |
| 67 | C2H2Br4 | 1,1,2,2-TETRABROMOETHANE | 49.111 | 2.5471E-01 | -2.1340E-04 | 7.7534E-08 | -9.0354E-12 | 150 | 1500 |
| 68 | C2H2Cl2 | 1,1-DICHLOROETHYLENE | 21.272 | 2.0394E-01 | -1.8292E-04 | 8.2561E-08 | -1.4802E-11 | 200 | 1500 |
| 69 | C2H2Cl2 | cis-1,2-DICHLOROETHYLENE | 11.376 | 2.4489E-01 | -2.5183E-04 | 1.3368E-07 | -2.8416E-11 | 200 | 1500 |
| 70 | C2H2Cl2 | trans-1,2-DICHLOROETHYLENE | 19.666 | 2.0908E-01 | -1.9503E-04 | 9.4941E-08 | -1.8848E-11 | 200 | 1500 |
| 71 | C2H2Cl2O | CHLOROACETYL CHLORIDE | 29.566 | 2.1377E-01 | -1.8076E-04 | 7.9913E-08 | -1.4782E-11 | 298 | 1500 |
| 72 | C2H2Cl2O | DICHLOROACETALDEHYDE | 39.761 | 1.3843E-01 | 9.8425E-06 | -1.0396E-07 | 4.4962E-11 | 298 | 1200 |
| 73 | C2H2Cl2O2 | DICHLOROACETIC ACID | 48.334 | 1.7165E-01 | -6.2134E-05 | -3.6029E-08 | 2.3198E-11 | 298 | 1200 |
| 74 | C2H2Cl3F | 1,1,1-TRICHLOROFLUOROETHANE | 20.183 | 3.8754E-01 | -4.6141E-04 | 2.7663E-07 | -6.5842E-11 | 298 | 1200 |
| 75 | C2H2Cl4 | 1,1,1,2-TETRACHLOROETHANE | 27.227 | 3.4932E-01 | -3.7793E-04 | 2.0496E-07 | -4.3937E-11 | 200 | 1500 |
| 76 | C2H2Cl4 | 1,1,2,2-TETRACHLOROETHANE | 20.427 | 3.6839E-01 | -4.0365E-04 | 2.2067E-07 | -4.7303E-11 | 298 | 1500 |
| 77 | C2H2F2 | 1,1-DIFLUOROETHYLENE | 24.354 | 1.2196E-01 | 1.1084E-05 | -7.9704E-08 | 3.0820E-11 | 100 | 1500 |
| 78 | C2H2F4 | 1,1,1,2-TETRAFLUOROETHANE | 8.429 | 3.4966E-01 | -3.3281E-04 | 1.5603E-07 | -2.8939E-11 | 200 | 1500 |
| 79 | C2H2O | KETENE | -14.704 | 3.1238E-01 | -4.3385E-04 | 2.9499E-07 | -7.5221E-11 | 200 | 1500 |
| 80 | C2H2O4 | OXALIC ACID | -5.565 | 1.3496E-01 | 1.3737E-05 | -1.9105E-07 | 1.1311E-10 | 298 | 1000 |
| 81 | C2H3Br | VINYL BROMIDE | 19.032 | 1.4697E-01 | -7.2736E-05 | 4.7354E-09 | 4.4305E-12 | 200 | 1500 |
| 82 | C2H3Cl | VINYL CHLORIDE | 17.193 | 1.4564E-01 | -6.4281E-05 | -3.2385E-09 | 6.7882E-12 | 200 | 1500 |
| 83 | C2H3ClF2 | 1-CHLORO-1,1-DIFLUOROETHANE | 20.964 | 2.6700E-01 | -2.0774E-04 | 7.5759E-08 | -9.7753E-12 | 200 | 1500 |
| 84 | C2H3ClO | ACETYL CHLORIDE | 37.484 | 1.0683E-01 | 1.3035E-05 | -5.7327E-08 | 1.9960E-11 | 298 | 1500 |
| 85 | C2H3ClO | CHLOROACETALDEHYDE | 25.272 | 1.5004E-01 | -3.4110E-05 | -4.1182E-08 | 2.0993E-11 | 298 | 1200 |
| 86 | C2H3ClO2 | CHLOROACETIC ACID | 9.327 | 2.9997E-01 | -2.6947E-04 | 1.2616E-07 | -2.4406E-11 | 298 | 1500 |
| 87 | C2H3ClO2 | METHYL CHLOROFORMATE | 13.353 | 2.7827E-01 | -2.0298E-04 | 3.2225E-08 | 1.9750E-11 | 298 | 900 |
| 88 | C2H3Cl3 | 1,1,1-TRICHLOROETHANE | 18.674 | 3.3443E-01 | -3.4963E-04 | 1.8764E-07 | -4.0744E-11 | 100 | 1500 |
| 89 | C2H3Cl3 | 1,1,2-TRICHLOROETHANE | 28.881 | 2.4893E-01 | -1.7639E-04 | 5.2632E-08 | -3.5668E-12 | 200 | 1500 |
| 90 | C2H3F | VINYL FLUORIDE | 27.617 | 5.4052E-02 | 1.3093E-04 | -1.6220E-07 | 5.0829E-11 | 100 | 1500 |
| 91 | C2H3F3 | 1,1,1-TRIFLUOROETHANE | 33.444 | 1.5361E-01 | 3.3402E-05 | -1.1974E-07 | 4.4424E-11 | 100 | 1500 |
| 92 | C2H3N | ACETONITRILE | 36.947 | 2.2085E-02 | 1.4661E-04 | -1.5012E-07 | 4.3482E-11 | 100 | 1500 |
| 93 | C2H3NO | METHYL ISOCYANATE | 21.328 | 8.5385E-02 | 7.8504E-05 | -1.0050E-07 | 2.9508E-11 | 298 | 1500 |
| 94 | C2H4 | ETHYLENE | 32.083 | -1.4831E-02 | 2.4774E-04 | -2.3766E-07 | 6.8274E-11 | 60 | 1500 |
| 95 | C2H4Br2 | 1,1-DIBROMOETHANE | 21.084 | 2.5090E-01 | -2.0060E-04 | 8.4960E-08 | -1.5026E-11 | 200 | 1500 |
| 96 | C2H4Br2 | 1,2-DIBROMOETHANE | 47.739 | 1.3553E-01 | 1.0414E-05 | -6.8462E-08 | 2.5192E-11 | 200 | 1500 |
| 97 | C2H4Cl2 | 1,1-DICHLOROETHANE | 15.750 | 2.6124E-01 | -2.1489E-04 | 9.5761E-08 | -1.8004E-11 | 200 | 1500 |
| 98 | C2H4Cl2 | 1,2-DICHLOROETHANE | 37.275 | 1.4362E-01 | 1.0378E-05 | -7.8305E-08 | 2.8872E-11 | 200 | 1500 |
| 99 | C2H4Cl2O | BIS(CHLOROMETHYL)ETHER | 3.763 | 3.6729E-01 | -3.5749E-04 | 1.8325E-07 | -3.7910E-11 | 298 | 1500 |
| 100 | C2H4F2 | 1,1-DIFLUOROETHANE | 36.271 | 7.8276E-02 | 1.6310E-04 | -2.0396E-07 | 6.3814E-11 | 100 | 1500 |
| 101 | C2H4F2 | 1,2-DIFLUOROETHANE | 18.309 | 2.0288E-01 | -6.1613E-05 | -3.8781E-08 | 2.0688E-11 | 200 | 1500 |
| 102 | C2H4O | ACETALDEHYDE | 34.140 | 4.0020E-02 | 1.5634E-04 | -1.6445E-07 | 4.7248E-11 | 100 | 1500 |
| 103 | C2H4O | ETHYLENE OXIDE | 30.827 | -7.6041E-03 | 3.2347E-04 | -3.2747E-07 | 9.7271E-11 | 50 | 1500 |
| 104 | C2H4O2 | ACETIC ACID | 34.850 | 3.7626E-02 | 2.8311E-04 | -3.0767E-07 | 9.2646E-11 | 50 | 1500 |
| 105 | C2H4O2 | METHYL FORMATE | 5.795 | 2.5072E-01 | -1.7515E-04 | 6.0565E-08 | -8.1015E-12 | 250 | 1500 |
| 106 | C2H5Br | BROMOETHANE | 26.552 | 1.1837E-01 | 6.7525E-05 | -1.1655E-07 | 3.7186E-11 | 100 | 1500 |
| 107 | C2H5Cl | ETHYL CHLORIDE | 35.946 | 5.2294E-02 | 2.0321E-04 | -2.2795E-07 | 6.9123E-11 | 100 | 1500 |
| 108 | C2H5ClO | 2-CHLOROETHANOL | 12.997 | 2.5587E-01 | -1.6553E-04 | 5.2292E-08 | -6.5812E-12 | 298 | 1500 |
| 109 | C2H5F | ETHYL FLUORIDE | 21.452 | 1.2080E-01 | 7.8409E-05 | -1.2578E-07 | 3.9184E-11 | 150 | 1500 |
| 110 | C2H5I | ETHYL IODIDE | 27.759 | 1.1915E-01 | 5.9726E-05 | -1.0756E-07 | 3.4157E-11 | 100 | 1500 |
| 111 | C2H5N | ETHYLENIMINE | 12.316 | 1.1833E-01 | 1.2598E-04 | -1.8322E-07 | 5.8831E-11 | 150 | 1500 |
| 112 | C2H5NO | ACETANIDE | 17.748 | 1.3627E-01 | 1.0668E-04 | -1.8647E-07 | 6.2842E-11 | 100 | 1500 |
| 113 | C2H5NO | N-METHYLFORMAMIDE | 43.449 | -1.0054E-01 | 7.2412E-04 | -8.6224E-07 | 3.2724E-10 | 298 | 1000 |
| 114 | C2H5NO2 | NITROETHANE | 17.726 | 2.2334E-01 | -2.1690E-05 | -8.0809E-08 | 3.2223E-11 | 200 | 1500 |
| 115 | C2H6 | ETHANE | 28.146 | 4.3447E-02 | 1.8946E-04 | -1.9082E-07 | 5.3349E-11 | 100 | 1500 |
| 116 | C2H6AlCl | DIMETHYALUMINUM CHLORIDE | 13.870 | 3.1526E-01 | -2.4008E-04 | 9.9159E-08 | -1.7228E-11 | 298 | 1500 |
| 117 | C2H6O | DIMETHYL ETHER | 34.668 | 7.0293E-02 | 1.6530E-04 | -1.7675E-07 | 4.9313E-11 | 100 | 1500 |
| 118 | C2H6O | ETHANOL | 27.091 | 1.1055E-01 | 1.0957E-04 | -1.5046E-07 | 4.6601E-11 | 100 | 1500 |
| 119 | C2H6O5 | DIMETHYL SULFOKIDE | 27.816 | 2.4839E-01 | -1.3176E-04 | 2.3843E-08 | 1.6501E-12 | 200 | 1500 |
| 120 | C2H6O2 | ETHYLENE GLYCOL | 48.218 | 1.9073E-01 | -6.6117E-05 | -1.8834E-08 | 1.2555E-11 | 200 | 1500 |
| 121 | C2H6O4S | DIMETHYL SULFATE | 23.800 | 3.7920E-01 | -2.0385E-04 | 2.4893E-08 | 8.1594E-12 | 200 | 1500 |
| 122 | C2H6S | DIMETHYL SULFIDE | 35.994 | 1.2381E-01 | 5.0871E-05 | -9.1708E-08 | 2.8274E-11 | 200 | 1500 |
| 123 | C2H6S | ETHYL MERCAPTAN | 47.034 | 4.1940E-02 | 2.3486E-04 | -2.5035E-07 | 7.4049E-11 | 100 | 1500 |
| 124 | C2H6S2 | DIMETHYL DISULFIDE | 50.010 | 1.4793E-01 | 4.2325E-05 | -9.9087E-08 | 3.2173E-11 | 200 | 1500 |
| 125 | C2H7N | DIMETHYLAMINE | 30.638 | 1.0737E-01 | 1.5824E-04 | -1.9418E-07 | 5.8509E-11 | 200 | 1500 |
| 126 | C2H7N | ETHYLAMINE | 30.983 | 1.2458E-01 | 1.0966E-04 | -1.5256E-07 | 4.6640E-11 | 200 | 1500 |
| 127 | C2H7NO | MONOETHANOLAMINE | -0.555 | 3.7003E-01 | -3.1976E-04 | 1.5834E-07 | -3.2344E-11 | 298 | 1500 |
| 128 | C2H8N2 | ETHYLENEDIAMINE | 10.429 | 3.2490E-01 | -1.9912E-04 | 6.3557E-08 | -8.7124E-12 | 298 | 1500 |
| 129 | C2H8Si | DIMETHYL SILANE | 27.940 | 2.2419E-01 | -4.0022E-06 | -9.9567E-08 | 3.6936E-11 | 100 | 1500 |
| 130 | C2N2 | CYANOGEN | 22.445 | 1.6837E-01 | -2.3212E-04 | 1.5784E-07 | -4.0479E-11 | 100 | 1500 |
| 131 | C3F6 | HEXAFLUOROPROPYLENE | -3.108 | 5.2270E-01 | -4.6521E-04 | 1.9228E-07 | -2.9928E-11 | 200 | 1500 |
| 132 | C3F6O | HEXAFLUOROACETONE | 0.451 | 5.2201E-01 | -4.5370E-04 | 1.6725E-07 | -1.9476E-11 | 200 | 1500 |

ANNEXE9: Chaleur spécifique des composés inorganiques.

| | | $C_p = A + B T + C T^2 + D T^3 + E T^4$ (C_p - joule/g-mol K, T - K) | | | | | | | | |
|-----|---------|-------------------------------------------------------------------------|---------|-------------|-------------|-------------|-------------|------|------|--------|
| NO | FORMULA | NAME | A | B | C | D | E | TMIN | TMAX | PHASE |
| 126 | H2 | HYDROGEN | 25.399 | 2.0178E-02 | -3.8549E-05 | 3.1880E-08 | -8.7585E-12 | 250 | 1500 | gas |
| 127 | H2O | WATER | 33.933 | -8.4186E-03 | 2.9906E-05 | -1.7825E-08 | 3.6934E-12 | 100 | 1500 | gas |
| 128 | H2O2 | HYDROGEN PEROXIDE | 36.181 | 8.2657E-03 | 6.6420E-05 | -6.9944E-08 | 2.0951E-11 | 100 | 1500 | gas |
| 129 | H2S | HYDROGEN SULFIDE | 33.878 | -1.1216E-02 | 5.2578E-05 | -3.8397E-08 | 9.0281E-12 | 100 | 1500 | gas |
| 130 | H2SO4 | SULFURIC ACID | 9.486 | 3.3795E-01 | -3.8078E-04 | 2.1308E-07 | -4.6878E-11 | 100 | 1500 | gas |
| 131 | H2S2 | HYDROGEN DISULFIDE* | 58.617 | -1.1216E-02 | 5.2578E-05 | -3.8397E-08 | 9.0281E-12 | 100 | 1500 | gas |
| 132 | H2Se | HYDROGEN SELENIDE* | 34.878 | -1.1216E-02 | 5.2578E-05 | -3.8397E-08 | 9.0281E-12 | 100 | 1500 | gas |
| 133 | H2Te | HYDROGEN TELLURIDE* | 34.878 | -1.1216E-02 | 5.2578E-05 | -3.8397E-08 | 9.0281E-12 | 100 | 1500 | gas |
| 134 | H3NO3S | SULFAMIC ACID | 129.000 | 0.0000E+00 | 0.0000E+00 | 0.0000E+00 | 0.0000E+00 | 293 | 303 | solid |
| 135 | He | HELIUM-3 | 20.786 | 0.0000E+00 | 0.0000E+00 | 0.0000E+00 | 0.0000E+00 | 100 | 1500 | gas |
| 136 | He | HELIUM-4 | 20.786 | 0.0000E+00 | 0.0000E+00 | 0.0000E+00 | 0.0000E+00 | 100 | 1500 | gas |
| 137 | Hf | HAFFNIUM | 25.703 | 0.0000E+00 | 0.0000E+00 | 0.0000E+00 | 0.0000E+00 | 298 | 308 | solid |
| 138 | Hg | MERCURY | 31.106 | -1.4350E-02 | 1.2908E-05 | 0.0000E+00 | 0.0000E+00 | 234 | 630 | liquid |
| 139 | HgBr2 | MERCURIC BROMIDE | 66.584 | 2.9288E-02 | 6.0558E-12 | -1.0022E-14 | 6.1505E-18 | 298 | 514 | solid |
| 140 | HgCl2 | MERCURIC CHLORIDE | 52.426 | 1.3494E-01 | -3.1212E-04 | 3.9829E-07 | -1.9638E-10 | 298 | 550 | solid |
| 141 | HgI2 | MERCURIC IODIDE | 56.286 | 3.4249E-01 | -8.7036E-04 | 1.0951E-06 | -5.3193E-10 | 298 | 563 | solid |
| 142 | IF7 | IODINE HEPTAFLUORIDE | 38.537 | 5.0269E-01 | -7.1344E-04 | 4.5817E-07 | -1.0835E-10 | 298 | 1500 | gas |
| 143 | I2 | IODINE | 34.150 | 1.3931E-02 | -2.0953E-05 | 1.4362E-08 | -3.5950E-12 | 100 | 1500 | gas |
| 144 | In | INDIUM | 21.506 | 1.7573E-02 | -2.4686E-11 | 4.5400E-14 | -3.1151E-17 | 298 | 429 | solid |
| 145 | Ir | IRIDIUM | 23.347 | 5.7739E-03 | -3.4328E-17 | 2.3440E-20 | -5.5160E-24 | 298 | 1809 | solid |
| 146 | K | POTASSIUM | 7.837 | 7.1983E-02 | --- | --- | --- | 298 | 336 | solid |
| 147 | KBr | POTASSIUM BROMIDE | 34.390 | 1.1766E-01 | -2.9798E-04 | 2.6546E-07 | -8.5845E-11 | 298 | 1007 | solid |
| 148 | KCl | POTASSIUM CHLORIDE | 39.680 | 5.8380E-02 | -8.1210E-05 | 5.0100E-08 | 0.0000E+00 | 200 | 1000 | solid |
| 149 | KF | POTASSIUM FLUORIDE | 45.982 | 1.4422E-02 | 3.8443E-15 | -3.7237E-18 | 1.2824E-21 | 298 | 1130 | solid |
| 150 | KI | POTASSIUM IODIDE | 66.603 | -1.0541E-01 | 2.6297E-04 | -2.3479E-07 | 7.9064E-11 | 298 | 954 | solid |
| 151 | KOH | POTASSIUM HYDROXIDE | -4.100 | 4.6870E-01 | -1.0706E-03 | 9.4200E-07 | 0.0000E+00 | 50 | 522 | liquid |
| 152 | Kr | KRYPTON | 20.786 | 0.0000E+00 | 0.0000E+00 | 0.0000E+00 | 0.0000E+00 | 100 | 6200 | gas |
| 153 | La | LANTHANUM | 25.815 | 6.6944E-03 | -2.6336E-16 | 2.4699E-19 | -8.2601E-23 | 298 | 1141 | solid |
| 154 | Li | LITHIUM | -8.997 | 3.3378E-01 | -1.3341E-03 | 2.4813E-06 | -1.6521E-09 | 100 | 454 | solid |
| 155 | LiBr | LITHIUM BROMIDE | 68.390 | -1.5919E-01 | 4.3042E-04 | -4.2500E-07 | 1.5943E-10 | 298 | 823 | solid |
| 156 | LiCl | LITHIUM CHLORIDE | 41.417 | 2.3397E-02 | -1.3477E-14 | 1.5769E-17 | -6.6511E-21 | 298 | 883 | solid |
| 157 | LiF | LITHIUM FLUORIDE | 16.725 | 1.3208E-01 | -2.0239E-04 | 1.6126E-07 | -4.8053E-11 | 298 | 1121 | solid |
| 158 | LiI | LITHIUM IODIDE | 41.903 | 2.8091E-02 | 6.6308E-14 | -8.7334E-17 | 4.1888E-20 | 298 | 742 | solid |
| 159 | Lu | LUTECIUM | 25.104 | 6.2760E-03 | -6.3338E-17 | 4.0169E-20 | -8.7163E-24 | 298 | 2000 | solid |
| 160 | Mg | MAGNESIUM | 19.801 | 2.2549E-02 | -2.4620E-05 | 2.2489E-08 | -7.7607E-12 | 298 | 923 | solid |
| 161 | MgCl2 | MAGNESIUM CHLORIDE | 31.946 | 2.2965E-01 | -4.2858E-04 | 3.7372E-07 | -1.2269E-10 | 298 | 987 | solid |
| 162 | MgO | MAGNESIUM OXIDE | -8.000 | 2.4690E-01 | -3.7660E-04 | 1.9830E-07 | 0.0000E+00 | 200 | 800 | solid |
| 163 | Mn | MANGANESE | 15.292 | 5.4688E-02 | -7.7529E-05 | 6.7461E-08 | -2.2097E-11 | 298 | 990 | solid |
| 164 | MnCl2 | MANGANESE CHLORIDE | 42.233 | 1.7706E-01 | -3.2746E-04 | 2.9913E-07 | -1.0323E-10 | 298 | 923 | solid |
| 165 | Mo | MOLYBDENUM | 21.715 | 6.9371E-03 | 6.4610E-17 | -2.9498E-20 | 4.5417E-24 | 298 | 2890 | solid |
| 166 | MoF6 | MOLYBDENUM FLUORIDE | 41.680 | 4.1131E-01 | -6.0261E-04 | 4.0311E-07 | -1.0025E-10 | 298 | 1500 | gas |
| 167 | MoO3 | MOLYBDENUM OXIDE | 30.322 | 2.3631E-01 | -3.7096E-04 | 3.0598E-07 | -9.4632E-11 | 298 | 1068 | solid |
| 168 | NCI3 | NITROGEN TRICHLORIDE | 30.253 | 1.7432E-01 | -2.1734E-04 | 1.1642E-07 | -2.2436E-11 | 100 | 2000 | gas |
| 169 | ND3 | HEAVY AMMONIA* | 34.574 | -1.2581E-02 | 8.8906E-05 | -7.1783E-08 | 1.8569E-11 | 100 | 1500 | gas |
| 170 | NF3 | NITROGEN TRIFLUORIDE | 18.732 | 1.5505E-01 | -1.4305E-04 | 5.3741E-08 | -5.8443E-12 | 100 | 1500 | gas |
| 171 | NH3 | AMMONIA | 33.573 | -1.2581E-02 | 8.8906E-05 | -7.1783E-08 | 1.8569E-11 | 100 | 1500 | gas |
| 172 | NH3O | HYDROXYLAMINE | 21.935 | 1.0340E-01 | -5.8693E-05 | 1.0557E-08 | 1.5150E-12 | 200 | 1500 | gas |
| 173 | NH4Br | AMMONIUM BROMIDE | 95.159 | -2.5788E-03 | 1.3674E-05 | -3.2219E-08 | 2.8462E-11 | 273 | 293 | solid |
| 174 | NH4Cl | AMMONIUM CHLORIDE | 34.757 | 1.1150E-01 | 0.0000E+00 | 0.0000E+00 | 0.0000E+00 | 458 | 700 | solid |
| 175 | NH4I | AMMONIUM IODIDE | 60.291 | 7.1764E-02 | -7.8705E-14 | 9.6400E-17 | -4.2746E-20 | 298 | 824 | solid |
| 176 | NH5O | AMMONIUM HYDROXIDE | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | liquid |
| 177 | NH5S | AMMONIUM HYDROGENSULFIDE | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | solid |
| 178 | NO | NITRIC OXIDE | 33.227 | -2.3626E-02 | 5.3156E-05 | -3.7858E-08 | 9.1197E-12 | 50 | 1500 | gas |
| 179 | NOCl | NITROSYL CHLORIDE | 28.551 | 7.5899E-02 | -9.4410E-05 | 6.0476E-08 | -1.5054E-11 | 100 | 1500 | gas |
| 180 | NOF | NITROSYL FLUORIDE* | 27.551 | -7.5899E-02 | -9.4410E-05 | 6.0476E-08 | -1.5054E-11 | 100 | 1500 | gas |
| 181 | NO2 | NITROGEN DIOXIDE | 32.791 | -4.5294E-04 | 8.1722E-05 | -8.2872E-08 | 2.4424E-11 | 50 | 1500 | gas |
| 182 | N2 | NITROGEN | 29.414 | -4.5993E-03 | 1.3004E-05 | -5.4759E-09 | 2.9239E-13 | 50 | 1500 | gas |
| 183 | N2F4 | TETRAFLUOROHYDRAZINE | 12.422 | 3.0609E-01 | -3.1077E-04 | 1.3914E-07 | -2.2235E-11 | 100 | 1500 | gas |
| 184 | N2H4 | HYDRAZINE | 23.630 | 9.1270E-02 | 2.9042E-05 | -7.1858E-08 | 2.5093E-11 | 100 | 1500 | gas |
| 185 | N2H4C | AMMONIUM CYANIDE* | 52.812 | 9.1270E-02 | 2.9042E-05 | -7.1858E-08 | 2.5093E-11 | 100 | 1500 | gas |
| 186 | N2H6CO2 | AMMONIUM CARBAMATE | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | solid |
| 187 | N2O | NITROUS OXIDE | 23.219 | 6.1984E-02 | -3.7989E-05 | 6.9671E-09 | 8.1421E-13 | 100 | 1500 | gas |
| 188 | N2O3 | NITROGEN TRIOXIDE | 28.509 | 1.6895E-01 | -1.8161E-04 | 9.9662E-08 | -2.1975E-11 | 100 | 1500 | gas |
| 189 | N2O4 | NITROGEN TETRAOXIDE | 29.587 | 2.2719E-01 | -2.2740E-04 | 1.0698E-07 | -1.9223E-11 | 50 | 1500 | gas |
| 190 | N2O5 | NITROGEN PENTOXIDE | 63.710 | 1.2317E-01 | -5.9937E-05 | 1.1842E-08 | -8.1522E-13 | 200 | 6000 | gas |
| 191 | Na | SODIUM | 14.791 | 4.4228E-02 | 4.6243E-09 | -9.2264E-12 | 6.8903E-15 | 298 | 371 | solid |
| 192 | NaBr | SODIUM BROMIDE | 41.654 | 4.4400E-02 | -4.6524E-05 | 2.1650E-08 | 0.0000E+00 | 200 | 1000 | solid |

** A computer program, containing data for all compounds, is available for a nominal fee (Carl L. Yaws, Box 10053, Lamar University, Beaumont, TX 77710, phone/FAX 409-880-8787). The computer program is in ASCII which can be accessed by other software.

$$C_p = A + B T + C T^2 + D T^3 + E T^4 \quad (C_p - \text{joule/g-mol } K, T - K)$$

| NO | FORMULA | NAME | A | B | C | D | E | TMIN | TMAX | PHASE |
|-----|---------|------------------------------------|---------|-------------|-------------|-------------|-------------|------|------|-------|
| 193 | NaCN | SODIUM CYANIDE | 68.399 | 7.7953E-04 | 0.0000E+00 | 0.0000E+00 | 0.0000E+00 | 298 | 835 | solid |
| 194 | NaCl | SODIUM CHLORIDE | 36.710 | 6.2770E-02 | -6.6670E-05 | 2.8000E-08 | 0.0000E+00 | 200 | 1074 | solid |
| 195 | NaF | SODIUM FLUORIDE | 18.360 | 1.6682E-01 | -3.1756E-04 | 2.7570E-07 | -8.3700E-11 | 200 | 1200 | solid |
| 196 | NaI | SODIUM IODIDE | 48.877 | 1.2054E-02 | -3.1542E-15 | 3.5205E-18 | -1.4126E-21 | 298 | 933 | solid |
| 197 | NaOH | SODIUM HYDROXIDE | -31.800 | 8.4550E-01 | -3.0665E-03 | 5.0706E-06 | -2.9200E-09 | 60 | 592 | solid |
| 198 | Na2SO4 | SODIUM SULFATE | -8.040 | 9.3400E-01 | -2.2370E-03 | 2.1350E-06 | 0.0000E+00 | 59 | 458 | solid |
| 199 | Nb | NIOBIUM | 23.723 | 4.0166E-03 | -2.2179E-17 | 1.0763E-20 | -1.7590E-24 | 298 | 2740 | solid |
| 200 | Nd | NEODYMIUM | 36.372 | -6.8306E-02 | 1.6672E-04 | -1.3166E-07 | 3.8858E-11 | 298 | 1135 | solid |
| 201 | Ne | NEON | 20.786 | 0.0000E+00 | 0.0000E+00 | 0.0000E+00 | 0.0000E+00 | 100 | 1500 | gas |
| 202 | Ni | NICKEL | -13.157 | 2.7626E-01 | -7.0013E-04 | 8.2194E-07 | -3.7096E-10 | 298 | 630 | solid |
| 203 | NiC4O4 | NICKEL CARBONYL* | 69.830 | 8.9853E-02 | -2.4575E-05 | -2.8140E-08 | 1.4023E-11 | 100 | 1500 | gas |
| 204 | NiF2 | NICKEL FLUORIDE | 72.258 | 1.0293E-02 | 5.2390E-17 | -2.7624E-20 | 4.9116E-24 | 298 | 1723 | solid |
| 205 | Np | NEPTUNIUM | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | solid |
| 206 | O2 | OXYGEN | 29.526 | -8.8999E-03 | 3.8083E-05 | -3.2629E-08 | 8.8607E-12 | 50 | 1500 | gas |
| 207 | O3 | OZONE | 31.467 | 1.4982E-02 | 6.7966E-05 | -8.4157E-08 | 2.7205E-11 | 50 | 1500 | gas |
| 208 | Os | OSMIUM | 23.556 | 3.8493E-03 | 4.0482E-17 | -2.6647E-20 | 6.0441E-24 | 298 | 1877 | solid |
| 209 | OsO5 | OSMIUM OXIDE PENTAFLUORIDE | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | gas |
| 210 | OsO4 | OSMIUM TETROXIDE - YELLOW | 24.585 | 2.4934E-01 | -3.3236E-04 | 2.1344E-07 | -5.0476E-11 | 298 | 1500 | gas |
| 211 | OsO4 | OSMIUM TETROXIDE - WHITE | 24.585 | 2.4934E-01 | -3.3236E-04 | 2.1344E-07 | -5.0476E-11 | 298 | 1500 | gas |
| 212 | P | PHOSPHORUS - WHITE | 4.400 | 1.2200E-01 | -2.5300E-04 | 2.2765E-07 | -7.1400E-11 | 31 | 317 | solid |
| 213 | PBr3 | PHOSPHORUS TRIBROMIDE | 56.758 | 1.0427E-01 | -1.6430E-04 | 1.1542E-07 | -2.9670E-11 | 298 | 1500 | gas |
| 214 | PCl2F3 | PHOSPHORUS DICHLORIDE TRIFLUORIDE* | 20.696 | 4.7099E-01 | -7.8406E-04 | 5.6105E-07 | -1.4442E-10 | 100 | 1500 | gas |
| 215 | PCl3 | PHOSPHORUS TRICHLORIDE | 27.213 | 2.4066E-01 | -3.9532E-04 | 2.8032E-07 | -7.1695E-11 | 100 | 1500 | gas |
| 216 | PCl5 | PHOSPHORUS PENTACHLORIDE | 25.701 | 4.7099E-01 | -7.8406E-04 | 5.6105E-07 | -1.4442E-10 | 100 | 1500 | gas |
| 217 | PH3 | PHOSPHINE | 32.964 | -1.4201E-02 | 1.3216E-04 | -1.1915E-07 | 3.2843E-11 | 100 | 1500 | gas |
| 218 | PH4Br | PHOSPHONIUM BROMIDE* | 62.034 | -1.4201E-02 | 1.3216E-04 | -1.1915E-07 | 3.2843E-11 | 100 | 1500 | gas |
| 219 | PH4Cl | PHOSPHONIUM CHLORIDE* | 61.942 | -1.4201E-02 | 1.3216E-04 | -1.1915E-07 | 3.2843E-11 | 100 | 1500 | gas |
| 220 | PH4I | PHOSPHONIUM IODIDE* | 62.037 | -1.4201E-02 | 1.3216E-04 | -1.1915E-07 | 3.2843E-11 | 100 | 1500 | gas |
| 221 | POCl3 | PHOSPHORUS OXYCHLORIDE | 23.911 | 3.2446E-01 | -5.0571E-04 | 3.4836E-07 | -8.7607E-11 | 40 | 1500 | gas |
| 222 | PSBr3 | PHOSPHORUS TRIBROMIDE | 63.322 | 1.6822E-01 | -2.5688E-04 | 1.7681E-07 | -4.4843E-11 | 298 | 1500 | gas |
| 223 | PSCl3 | PHOSPHORUS TRICHLORIDE | 27.454 | 3.3554E-01 | -5.4132E-04 | 3.7986E-07 | -9.6538E-11 | 100 | 1500 | gas |
| 224 | P4O6 | PHOSPHORUS TRIOXIDE | -26.248 | 8.7466E-01 | -1.2429E-03 | 8.1470E-07 | -1.9988E-10 | 298 | 1500 | gas |
| 225 | P4O10 | PHOSPHORUS PENTOXIDE | 9.600 | 5.9230E-01 | 1.3880E-03 | -3.6600E-06 | 0.0000E+00 | 20 | 325 | solid |
| 226 | P4S10 | PHOSPHORUS PENTASULFIDE | -25.525 | 2.3950E+00 | -6.9192E-03 | 9.9713E-06 | -5.3678E-09 | 30 | 560 | solid |
| 227 | Pb | LEAD | 23.552 | 9.7404E-03 | -2.9945E-14 | 4.4267E-17 | -2.4109E-20 | 298 | 601 | solid |
| 228 | PbBr2 | LEAD BROMIDE | 77.781 | 9.2048E-03 | 2.1995E-13 | -3.1856E-16 | 1.6938E-19 | 298 | 640 | solid |
| 229 | PbCl2 | LEAD CHLORIDE | 60.760 | 4.1535E-02 | 1.4883E-14 | -1.9009E-17 | 8.8300E-21 | 298 | 768 | solid |
| 230 | PbF2 | LEAD FLUORIDE | 54.940 | 6.4425E-02 | -9.8385E-13 | 1.4615E-15 | -7.9884E-19 | 298 | 613 | solid |
| 231 | PbI2 | LEAD IODIDE | 75.312 | 1.9665E-02 | -3.7105E-13 | 5.1367E-16 | -2.6034E-19 | 298 | 680 | solid |
| 232 | PbO | LEAD OXIDE | 41.455 | 1.5330E-02 | 6.9602E-14 | -8.9876E-17 | 4.2208E-20 | 298 | 762 | solid |
| 233 | PbS | LEAD SULFIDE | 46.434 | 1.0263E-02 | -3.9829E-16 | 3.2805E-19 | -9.5043E-23 | 298 | 1387 | solid |
| 234 | Pd | PALLADIUM | 24.225 | 5.7488E-03 | -7.4914E-17 | 5.1613E-20 | -1.2204E-23 | 298 | 1823 | solid |
| 235 | Po | POLONIUM | 20.292 | 2.0418E-02 | 2.7009E-12 | -4.4052E-15 | 2.6616E-18 | 298 | 527 | solid |
| 236 | Pt | PLATINUM | 24.250 | 5.3764E-03 | -9.8794E-17 | 6.0617E-20 | -1.2748E-23 | 298 | 2043 | solid |
| 237 | Ra | RADIUM | 20.920 | 2.0920E-02 | -3.7799E-15 | 4.0654E-18 | -1.5696E-21 | 298 | 973 | solid |
| 238 | Rb | RUBIDIUM | 13.736 | 5.6681E-02 | 3.5243E-06 | -7.7226E-09 | 6.3452E-12 | 298 | 312 | solid |
| 239 | RbBr | RUBIDIUM BROMIDE | 48.534 | 1.0669E-02 | -5.0051E-15 | 5.6215E-18 | -2.2585E-21 | 283 | 953 | solid |
| 240 | RbCl | RUBIDIUM CHLORIDE | 48.116 | 1.0418E-02 | -4.8316E-15 | 5.2698E-18 | -2.0526E-21 | 283 | 988 | solid |
| 241 | RbF | RUBIDIUM FLUORIDE | 59.623 | -8.2079E-02 | 2.2230E-04 | -1.8584E-07 | 5.8308E-11 | 298 | 1048 | solid |
| 242 | RbI | RUBIDIUM IODIDE | 48.534 | 1.1004E-02 | -8.4558E-16 | 1.0369E-18 | -4.5189E-22 | 283 | 913 | solid |
| 243 | Re | RHENIUM | 24.695 | 2.7522E-03 | 2.2393E-06 | -7.2768E-10 | 8.3708E-14 | 298 | 3453 | solid |
| 244 | Re2O7 | RHENIUM HEPTOXIDE | 113.266 | 6.8782E-01 | -3.3492E-03 | 7.2466E-06 | -5.8789E-09 | 298 | 318 | solid |
| 245 | Rh | RHODIUM | 21.966 | 1.0042E-02 | 2.6411E-17 | -1.5094E-20 | 2.9416E-24 | 298 | 2239 | solid |
| 246 | Rn | RADON | 20.794 | -3.9576E-15 | 4.4438E-18 | -1.9112E-21 | 2.7806E-25 | 298 | 3000 | gas |
| 247 | Ru | RUTHENIUM | 21.966 | 6.2760E-03 | 5.4587E-16 | -4.7849E-19 | 1.4756E-22 | 298 | 1308 | solid |
| 248 | RuF5 | RUTHENIUM PENTAFLUORIDE | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | solid |
| 249 | S | SULFUR | 25.639 | -7.9870E-03 | 4.7860E-06 | -9.5700E-10 | 0.0000E+00 | 273 | 1500 | gas |
| 250 | SF4 | SULFUR TETRAFLUORIDE | 15.486 | 3.1315E-01 | -4.4453E-04 | 2.9083E-07 | -7.1213E-11 | 298 | 1500 | gas |
| 251 | SF6 | SULFUR HEXAFLUORIDE | -7.934 | 5.1224E-01 | -6.4878E-04 | 3.7509E-07 | -8.1524E-11 | 100 | 1500 | gas |
| 252 | SOBr2 | THIONYL BROMIDE | 48.491 | 1.0815E-01 | -1.4791E-04 | 9.4987E-08 | -2.2463E-11 | 298 | 1500 | gas |
| 253 | SOCl2 | THIONYL CHLORIDE | 34.838 | 1.4750E-01 | -1.7837E-04 | 9.4399E-08 | -1.8111E-11 | 100 | 2000 | gas |
| 254 | SOF2 | SULFUROUS OXYFLUORIDE | 18.639 | 1.9505E-01 | -2.5689E-04 | 1.5983E-07 | -3.7838E-11 | 298 | 1500 | gas |
| 255 | SO2 | SULFUR DIOXIDE | 29.637 | 3.4735E-02 | 9.2903E-06 | -2.9885E-08 | 1.0937E-11 | 100 | 1500 | gas |
| 256 | SO2Cl2 | SULFURYL CHLORIDE | 18.553 | 2.9713E-01 | -4.2391E-04 | 2.7784E-07 | -6.7857E-11 | 100 | 1500 | gas |
| 257 | SO3 | SULFUR TRIOXIDE | 22.466 | 1.1981E-01 | -9.0842E-05 | 2.5503E-08 | -7.9208E-13 | 100 | 1500 | gas |
| 258 | S2Cl2 | SULFUR MONOCHLORIDE | 51.240 | 1.1549E-01 | -1.6270E-04 | 1.0449E-07 | -2.4709E-11 | 298 | 1500 | gas |
| 259 | Sb | ANTIMONY | 22.343 | 8.9538E-03 | -8.4656E-15 | 9.6707E-18 | -3.9802E-21 | 298 | 903 | solid |

** A computer program, containing data for all compounds, is available for a nominal fee (Carl L. Yaws, Box 10053, Lamar University, Beaumont, TX 77710, phone/FAX 409-880-8787). The computer program is in ASCII which can be accessed by other software.