

**REPUBLIQUE ALGERIENNE DEMOCRATIQUE ET POPULAIRE
MINISTRE DE L'ENSEIGNEMENT SUPERIEUR
ET DE LA RECHERCHE SCIENTIFIQUE**

UNIVERSITE SALAH BOUBNIDER CONSTANTINE 3



FACULTE DE GENIE DES PROCÉDES

DEPARTEMENT DE GENIE CHIMIQUE

N° d'ordre :... ..

Série :... ..

Mémoire de Master

Filière : **Génie des procédés**

Spécialité : **Génie chimique**

**PREDICTION DE LA SOLUBILITE DE MOLECULES D'INTERETS
PHARMACEUTIQUES AVEC LES MODELES THERMODYNAMIQUES
UNIFAC ET NRTL**

Dirigé par:

* **Mme BEZAZE Hassina**

Grade MCA

Présenté par :

* **GHARBI Lamia**

* **DERBAL Sihem**

Année Universitaire 2021/2022.

Session : (juin)

Résumé :

L'objectif de ce travail est d'étudier, et d'approfondir, l'utilisation de modèles thermodynamiques pour prédire la solubilité de molécules organiques complexes. Pour cela, cinq molécules sont prises pour référence : l'ibuprofène, le paracétamol, les acides salicyliques, benzoïques et l'anthracène.

L'occasion a aussi été saisie pour comprendre et maîtriser certains modèles thermodynamiques du calcul du coefficient d'activités telles qu'UNIFAC et NRTL, intervenant dans la modélisation des équilibres de phase liquide-solide.

Cependant pour le modèle NRTL, les paramètres d'interaction sont moléculaires et ne sont pas généralement disponibles dans la littérature et donc ils ont été calculés pour les systèmes considérés en utilisant une technique d'optimisation assez fiable basée sur les principes et étapes de la méthode Simplexe modifiée par Nelder-Mead.

Les résultats obtenus montrent la fiabilité des paramètres d'interaction déterminés pour le modèle NRTL.

Mots clés :

Modélisation thermodynamique/ Equilibre liquide –solide / UNIFAC/NRTL/Nelder Mead/.

Abstract:

The objective of this work is to study, and deepen, the use of thermodynamic models to predict the solubility of complexes of organic molecules. For this, five molecules are taken as reference: ibuprofen, paracetamol, salicylic and benzoic acids and anthracene.

The opportunity was also taken to understand and master certain thermodynamic models for calculating the activity coefficient such as UNIFAC and NRTL, involved in the modeling of liquid-solid phase equilibria.

For the NRTL model, the interaction parameters are molecular and are not generally available in the literature and therefore they have been calculated for the systems used using a fairly reliable optimization technique based on the principles and steps of the Simplex method. Modified by Nelder-Mead.

The results demonstrated the reliability of the interaction parameters determined for the NRTL model.

Key words:

Thermodynamic modeling/ Liquid-solid equilibrium / UNIFAC/NRTL/Nelder Mead/.