

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

UNIVERSITE CONSTANTINE 03



Faculté de Génie des Procédés Pharmaceutiques

Département de Génie Pharmaceutique

N° d'ordre....

Série

Mémoire

Pour l'obtention du diplôme de Master en Génie Pharmaceutique

Thème

**Modélisation de la Solubilité des Composés Solides dans
des Fluides Supercritiques**

Dirigé par professeur :

Mr. Meniai A-H

Présenté par :

Amiour Halima

Benaskeur Halima

Ziane Abdelghani

Année Universitaire 2014/2015

Session Juin 2015

Sommaire

| | |
|---|-----------|
| ✓ Remerciements | |
| ✓ Dédicace | |
| ✓ Liste des figures | |
| ✓ Liste des tableaux | |
| ✓ Nomenclature | |
| ✓ Sommaire | |
| ✓ Introduction générale..... | 1 |
| Chapitre I : Les fluides supercritiques: Propriétés et applications..... | 4 |
| 1. Les fluides supercritiques..... | 4 |
| 1.1. Définition..... | 4 |
| 1.2. Propriétés..... | 7 |
| 1.3 Le dioxyde de carbone..... | 8 |
| 1.4. Applications du dioxyde de carbone comme fluide supercritique..... | 9 |
| Chapitre II : Modélisation De La Solubilité Dans Les Fluides Supercritiques..... | 16 |
| 2.1 Critère d'équilibres de phases..... | 16 |
| 2.2 Les équations d'état..... | 17 |
| 2.3. Les équations d'état cubiques..... | 18 |
| 2.3.1 1a Forme générale..... | 18 |
| 2.3.2 Différents types d'équations d'état..... | 18 |
| 2.3.2a Equation de Redlich-Kwong..... | 19 |
| 2.3.2b Equation de Redlich Kwong-Soave..... | 19 |
| 2.3.2c Equation de Peng et Robinson..... | 20 |
| 2.4 Les règles de mélange..... | 20 |
| -Règle de mélange de Van der Waals à un seul paramètre..... | 21 |
| -Règle du mélange quadratique de Van der Waals à 2 paramètres..... | 21 |

| | |
|--|----|
| 2.5 Calcul du coefficient de fugacité..... | 22 |
| 2.6 Solubilité dans les fluides supercritiques..... | 23 |
| L'organigramme..... | 24 |
| Chapitre III : résultats et discussion..... | 25 |
| 3.1 Calcul du coefficient de fugacité..... | 25 |
| 3.2. Calcul de la solubilité dans le CO ₂ supercritique..... | 26 |
| 3.2.1 Les systèmes considérés..... | 26 |
| 3.3 Propriétés des solutés..... | 27 |
| 3.3.1a Flurbiprofen dans CO ₂ supercritique..... | 27 |
| 3.3.1b Solubilité du Climbazole, du Triclocarban, de l'Irgacure 2959 Photoinitiateur dans CO ₂ supercritique..... | 28 |
| 3.4 Résultats..... | 28 |
| 3.4.1 Solubilité du Climbazole, le Triclocarban et l'Irgacure 2959 Photoinitiateur.... | 28 |
| 3.4.2 Solubilité du Flurbiprofen dans le CO ₂ Supercritique..... | 44 |
| Conclusion générale..... | 54 |
| Références Bibliographiques | |
| Annexe | |
| Résumé | |

Résumé :

Ce travail est consacré à la modélisation de la solubilité dans les fluides supercritiques de solutés de nature pharmaceutique tels que le Climbazole, le Triclocarban, l'Irgacure 2959 Photoinitiateur et le Flurbiprofen dans le dioxyde de carbone à différentes conditions de température et de pression.

L'approche est basée sur l'utilisation des équations d'état telles que celle de Peng-Robinson (PR), de Redlich-Kwong (RK), de Redlich-Kwong-Soave (RKS) couplées à des règles de mélanges bien précises telles que celles de Van der Waals à un et deux paramètres.

Les résultats obtenus ont été assez encourageants dans certains cas, par comparaison avec les valeurs expérimentales, bien que de grandes déviations aient été notées pour d'autres.

Mots clés: FSC, Equilibre thermodynamique, Modélisation, Extraction supercritique; Propriétés critiques, Equation d'état, Règles de mélanges.

ملخص :

يخصص هذا العمل الى نموذج قابلية الانحلال في المائع لمواد ذات طبيعة صيدلانية مثل كليمبازول, تركلوكرابون, ارغكير 2959 فطونسياتور و فلوربروفان في ثاني اكسيد الكربون في ظروف مختلف من درجة الحرارة و الضغط.

هذا يرتكز على استعمال معادلات الوضعية مثل معادلات بنغروبينسن, ردلش كونغ و ردلش كونغ سوف مقرنة بقاعدة تمازج جد دقيقة مثل قاعدة فندر وايل أحادية أو ثنائية المتغير.

وقد كانت النتائج مشجعة للغاية في بعض الحالات بالمقارنة مع القيم التجريبية ، على الرغم من أن لوحظت انحرافات كبيرة للآخرين

الكلمات المفتاحية

التوازن الديناميكي, نمودجي, الاستخلاص فوق الحرج, الخصائص الحرجة, معادلة الحالة, قاعدة المزيج

Abstract :

The present work concerns the modeling of the solubility in supercritical fluid of solutes of pharmaceutical nature such as Climbazole, Triclocarban and Irgacure 2959 Photo initiator in carbon dioxide at different temperature and pressure conditions.

The approach was based on the use of equations of state such as those of Peng-Robinson (PR), Redlich-Kwong (RK) and Redlich-Kwong-Soave (RKS) coupled with mixing rules such as those of Van der Waals with one and two parameters.

The obtained results were encouraging in certain cases but large deviations were shown for others.

Keywords: SCF; Thermodynamic equilibrium; Modeling; Supercritical extraction; Critical properties, Equation of state; Mixing rules.