

**REPUBLIQUE ALGERIENNE DEMOCRATIQUE ET POPULAIRE**  
**MINISTERE DE L'ENSEIGNEMENT SUPERIEUR**  
**ET DE LA RECHERCHE SCIENTIFIQUE**  
**UNIVERSITE SALAH BOUBNIDER CONSTANTINE 3**



**FACULTE DE GENIE DES PROCEDES**  
**DEPARTEMENT GENIE PHARMACEUTIQUE**

N° d'ordre : ... ..

Série : ... ..

**Mémoire de Master**

**Filière : Génie des Procédés**

**Spécialité : Génie Pharmaceutique**

**Thème :**

**Modélisation micro-cinétique de la synthèse du  
méthanol sur un catalyseur à base de NiGa**

Dirigé par :

**Dr. DEHIMI Leila**

**Grade : M.C.A**

Présenté par :

**AMEUR Hayem Halima**

**BENOTMANE Zakaria Mouatassef**

Année Universitaire : **2021/2022**

Session : **(juin)**

## **TABLE DES MATIERES**

**Liste des figures**

**Liste des tableaux**

**Nomenclatures et abréviations**

**INTRODUCTION GENERALE** 1

### **CHAPITRE 1**

#### **SYNTHESE BIBLIOGRAPHIQUE**

I.1. Historique	3
I.2. Propriétés d'hydrogène	3
I.3. Synthèse d'hydrogène	4
I.3.1. Procédés thermochimiques	5
I.3.1.1. Vaporeformage du gaz naturel	5
I.3.1.2. Oxydation partielle	6
I.3.1.3. Reformage auto-thermique	6
I.3.1.4. Reformage à sec	7
I.3.2. Electrolyse de l'eau	7
I.4. Utilisation d'hydrogène	9
I.4.1. Dans le secteur du transport	9
I.4.2. Electricité	10
I.5. Pile à combustible	10
I.6. Stockage et transport	12
I.6.1. Stockage de l'hydrogène	12
I.6.1.1. Stockage sous forme de gaz pressurisé	13

I.6.1.2 Stockage sous forme cryogénique	13
I.6.1.3. Stockage sous forme solide	13
I.6.2. Transport et livraison de l'hydrogène	14
I.7. Dioxyde de carbone CO <sub>2</sub> et sa valorisation	14
I.8. Gaz de synthèse	15
I.8.1. Avantages du gaz de synthèse	15
I.8.2. Chimie du gaz de synthèse	16
I.9. Synthèse du méthanol	16
I.9.1. Historique du méthanol	16
I.9.2. Données physico-chimique et propriétés du méthanol	17
I.9.3. Utilisation du méthanol	18
I.9.4. Intérêt d'utilisation de méthanol	19
I.9.5. Production du méthanol	20
I.10. Le choix du catalyseur	22
I.10.1. Critères du choix	24
I.10.2. Désactivation des catalyseurs	24

## **CHAPITRE 2**

### **MODELISATION DE LA SYNTHÈSE DU METHANOL**

II.1. Thermodynamique de la synthèse du méthanol	26
II.2. Cinétique de la synthèse du méthanol	27
II.2.1. Modèle cinétique de Graaf	28
II.2.2. Modèle cinétique de Bussche et Froment	29
II.2.3. Modèle cinétique de Skrzypek	30
II.2.4. Modèle cinétique de Villa	30

II.2.5. Modèle cinétique de Ledakowicz	31
II.2.6. Modèle cinétique de Setinc et Levec	31
II.2.7. Modèle cinétique de V. Wedel	32
II.2.8. Modèle cinétique de Léonov	32
II.3. Modélisation micro-cinétique	32
II.3.1. Etat de l'art	32
II.3.2. Schéma mécanistique	34
II.4. Méthode de résolution	38

## **CHAPITRE 3**

### **RESULTATS ET DISCUSSION**

III.1. Effet de la température sur les performances catalytiques	40
<b>CONCLUSION GENERALE</b>	48
<b>REFERENCES BIBLIOGRAPHIQUE</b>	

## CONCLUSION GENERALE

Le but principal de ce manuscrit est d'étudier le mécanisme micro-cinétique de la synthèse du méthanol par l'hydrogénation du dioxyde de carbone sur un catalyseur à base de NiGa. Un modèle microcinétique a été développé afin d'exprimer les cinétiques élémentaires qui ont lieu durant la réaction.

L'effet de la température sur l'évolution des taux de recouvrement a été examiné et discuté. Le modèle micro-cinétique complet est constituée de 9 espèces adsorbées et 22 réactions élémentaires que sont incluses les réactions d'adsorption, désorption et les réactions de surface.

Globalement les résultats obtenus montrent qu'il y a une adsorption compétitive entre les deux réactifs :  $\text{CO}_2$  et  $\text{H}_2$ . Nous avons trouvé que la dissociation du  $\text{CO}_2^*$  est plus rapide aux faibles températures. En plus, les résultats montrent que le taux de recouvrement d' $\text{H}^*$  est proche de l'unité, et diminue avec toute augmentation de la température conduisant à la libération des sites adsorbés.

Toutefois, sur toute la gamme de températures, des réactions surfaciques jouent un rôle crucial dans la formation des produits de la réaction.

Il a été trouvé que la formation du méthanol se fait principalement par des réactions successifs d'hydrogénation des espèces adsorbées :  $\text{HCO}^*$ ,  $\text{HCOH}^*$ ,  $\text{CH}_2\text{OH}^*$ .

Enfin, pour les produits de la réaction  $\text{H}_2\text{O}^*$  et  $\text{CH}_3\text{OH}^*$ , les résultats obtenus montrent que des meilleures productions exigent l'emploi de hautes températures.