



Fabrice MUTELET

THERMODYNAMIQUE EN GENIE DES PROCEDES

MESURES DE GRANDEURS PHYSICO-CHIMIQUES
ET MODELISATION THERMODYNAMIQUE EN
GENIE DES PROCEDES

TABLES DES MATIERES

ETUDE DES INTERACTIONS ENTRE LES COMPOSES ORGANIQUES ET LES SYSTEMES COMPLEXES.....	3
I/ RAPPELS SUR LA CHROMATOGRAPHIE INVERSE EN PHASE GAZEUSE.....	4
II/ CALCUL DES PROPRIETES THERMODYNAMIQUES.....	6
III/ MODELE DE FLORY-HUGGINS.....	7
IV/ CARACTERISATION DES PHASES STATIONNAIRES A L' AIDE D'UN MODELE DE SOLVATION.....	9
V/ ETUDE DES FLUIDES PETROLIERS ET DE LEURS ASPHALTENES.....	10
V.1/ CARACTERISATION LSER DE PETROLES BRUTS.....	11
V.2/ PARAMETRE DE SOLUBILITE DES ASPHALTENES DE FLUIDES PETROLIERS.....	11
V.3/ CARACTERISATION LSER DES ASPHALTENES DE FLUIDES PETROLIERS.....	14
V.4/ RELATION ENTRE PARAMETRE DE SOLUBILITE D'HILDEBRAND ET PARAMETRES LSER.....	15
V.5/ PREDICTION DU SEUIL DE FLOCCULATION DES FLUIDES PETROLIERS A PARTIR DE DONNEES CHROMATOGRAPHIQUES.....	16
V.6/ CONCLUSIONS.....	17
VI/ ETUDE DES INTERACTIONS ENTRE COMPOSES ORGANIQUES ET LES LIQUIDES IONIQUES.....	18
VI.1/ INFLUENCE DES MECANISMES DE RETENTION SUR LES GRANDEURS THERMODYNAMIQUES.....	20
VI.2/ COMPORTEMENT GENERAL DES LIQUIDES IONIQUES.....	23
VI.3/ SELECTIVITE ET CAPACITE DES LIQUIDES IONIQUES.....	24
VI.4/ Caractérisation LSER.....	28
VI.5/ INFLUENCE DE L' ADSORPTION SUR LES PARAMETRES LSER DES LIQUIDES IONIQUES.....	31
VI.6/ LES LIQUIDES IONIQUES CONSTITUES D'UN CATION PHOSPHONIUM OU AMMONIUM.....	31
VI.7/ CONCLUSIONS.....	32
 ETUDE EXPERIMENTALE DES EQUILIBRES LIQUIDE-LIQUIDE ET LIQUIDE-VAPEUR DE SYSTEMES CONTENANT DES LIQUIDES IONIQUES.....	 33
I/ ETUDE DES EQUILIBRES LIQUIDE-LIQUIDE DE SYSTEMES CONTENANT DES COMPOSES ORGANIQUES ET DES LIQUIDES IONIQUES.....	34
I.1/ CLASSIFICATION DES EQUILIBRES LIQUIDE-LIQUIDE DES SYSTEMES TERNAIRES.....	34
I.2/ ETUDE DES INTERACTIONS ENTRE LE THIOPHENE OU LE BENZENE ET LES LIQUIDES IONIQUES.....	35
I.3/ REPRESENTATION DES EQUILIBRES LIQUIDE-LIQUIDE DE SYSTEMES TERNAIRES CONTENANT DES LIQUIDES IONIQUES.....	37
I.4/ ETUDE DES EQUILIBRES LIQUIDE-LIQUIDE DE SYSTEMES TERNAIRES { THIOPHENE OU BENZENE / N-HEPTANE / IL }.....	38
I.5/ DESULFURATION DES ESSENCES ET DIESELS – SYSTEMES SYNTHETIQUES.....	43
I.6/ EXTRACTION D' ACIDE SALICYLIQUE A L' AIDE DE LIQUIDE IONIQUE ADSORBE A LA SURFACE DE NANOPARTICULES.....	45
I.7/ CONCLUSIONS.....	48
II/ ETUDE DE LA SOLUBILITE DE GAZ A EFFET DE SERRE DANS LES LIQUIDES IONIQUES.....	48
II.1/ METHODE EXPERIMENTALE UTILISEE.....	48
II.2 / ETUDE DE LA SOLUBILITE DU DIOXYDE DE CARBONE DANS LES LIQUIDES IONIQUES.....	49
II.3/ ETUDE DE LA SOLUBILITE DU PROTOXYDE D' AZOTE DANS LES LIQUIDES IONIQUES.....	51
II.5/ LIQUIDES IONIQUES DE TYPE DI-ALKYLIMIDAZOLIUM.....	52
II.6/ LIQUIDES IONIQUES FONCTIONNALISES.....	53
II.7/ CONCLUSIONS.....	55
 CALCUL ET PREDICTION DE PROPRIETES THERMODYNAMIQUES DE FLUIDES SOUS PRESSION.....	 56
I/ PREDICTION DU COEFFICIENT DE PARTAGE SOLUTE- LIQUIDE IONIQUE A PARTIR DU MODELE LSER COUPLE A UNE METHODE DE CONTRIBUTIONS DE GROUPES : MODELE GC-LSER.....	58

II/ METHODE DE CONTRIBUTIONS DE GROUPES POUR L'ESTIMATION DES CONSTANTES DE HENRY DU DIOXYDE DE CARBONE DANS LES LIQUIDES IONIQUES	62
III/ REPRESENTATION DES PROPRIETES DE CORPS PURS A PARTIR DE L'EQUATION SAFT	64
IV/ CALCUL DES DIAGRAMMES D'EQUILIBRES ENTRE PHASES - MODELE PPR78.....	67
IV.1/ LE MODELE PPR78	68
IV.2/ QUELQUES RESULTATS DU MODELE PPR78 SUR LES MELANGES D'HYDROCARBURES	70
IV.3/ EXTENSION DU MODELE PPR78 AUX MELANGES {CO ₂ + LIQUIDE IONIQUE}.....	75
IV.4/ EXTENSION DU MODELE PPR78 AUX MELANGES {NO ₂ + LIQUIDE IONIQUE}	78
IV.5/ CONCLUSIONS.....	79
BILAN ET PERSPECTIVES SCIENTIFIQUES	81
BIBLIOGRAPHIE.....	83

Le dimensionnement et l'optimisation énergétique des procédés de séparation dépendent fortement de la connaissance des propriétés thermodynamiques des différentes phases en équilibre. L'étude des équilibres présente un grand intérêt aussi bien du point de vue académique que du point de vue des applications industrielles pour lesquelles leur connaissance est indispensable. Ce travail présente diverses techniques expérimentales permettant la mesure de propriétés physico-chimiques et de diagrammes de phases ainsi que la modélisation des propriétés thermodynamiques de systèmes tels que les fluides pétroliers et les liquides ioniques. Dans un premier temps, une étude chromatographique présente les interactions entre composés organiques et systèmes complexes. Ensuite, l'étude des équilibres entre phases de systèmes contenant des liquides ioniques a permis d'évaluer leurs performances dans différents problèmes de séparation (désulfuration de carburants et capture de gaz à effet de serre). Enfin, nous présentons différents modèles thermodynamiques prédictifs basés soit sur les méthodes de contributions de groupes, soit sur un modèle de solvation.

Fabrice MUTELET



Fabrice Mutelet est Maître de conférences à l'Ecole Supérieure des Industries Chimiques où il enseigne la thermodynamique et la chimie analytique. Ses travaux de recherche l'ont conduit à s'intéresser aux comportements de systèmes complexes tels que les fluides ioniques et les liquides ioniques.



9 786131 565557 978-613-1-56555-7

CEAC