

Colloque SFGP Groupe de travail thermodynamique Les électrolytes

Table ronde

La journée s'est terminée par une table ronde animée par le Professeur Alain Gaunand. La question posée à l'assistance était : « **Quels sont les besoins pour le développement de modèles thermodynamiques fiables pour la représentation des propriétés thermo physiques utiles pour l'industrie ?** » En d'autres termes, comment les industriels traitent-ils la question des données thermodynamiques de leurs procédés (essais et modèle/outil numérique dédiés élaborés en interne, logiciels commerciaux ou versions adaptées, travaux académiques) ; quels types de demande formulent-ils, et comment la communauté scientifique peut-elle y répondre au mieux ?

A. Gaunand a tout d'abord évoqué les besoins en thermodynamique pour concevoir, et déterminer la dimension des opérations unitaires industrielles faisant intervenir les solutions d'électrolytes. Par exemple, de nombreux solides sont obtenus par cristallisation à partir de solutions aqueuses d'électrolytes. Prédire une vitesse de cristallisation dans des conditions opératoires données implique d'évaluer la sursaturation des solutions par rapport au solide, donc la limite de solubilité du solide, et les activités des différentes espèces et complexes de la solution-mère.

Jean Charles De Hemptinne a posé des questions sur les logiciels commerciaux existants et évoqué le problème du transfert de connaissances et de savoir faire entre chercheurs et industriels. Il apparaît que le monde des électrolytes est assez particulier : ce sont des fournisseurs spécifiques (dont certains noms ont été mentionnés) auxquels il est fait appel plutôt que de grands fournisseurs de logiciels de simulation de procédés. Aspen est sans doute le plus polyvalent en la matière.

Christian Sorez, du CEA de Marcoule, a ensuite parlé de l'importance des propriétés thermodynamiques des solutions d'électrolytes pour modéliser les extractions liquide-liquide appliquées aux traitements des déchets et l'extraction de l'uranium (mines de phosphate). Les recherches sont menées en coopération étroite avec Areva et des partenaires en hydrométallurgie. Des codes de calculs ont été développés en interne pour la modélisation des unités opératoires. Ces codes sont modulaires et combinent des parties dédiées aux propriétés thermodynamiques à d'autres dédiées aux transferts entre phases et à la modélisation des unités. Les systèmes étudiés sont par exemple les milieux nitriques concentrés (7.5 en molalité), les solutions de nitrate d'uranyle, les sels contenant de l'uranium, du plutonium ou du zirconium pour lesquels il manque des données.

Philippe Arpentinier, expert en thermodynamique du groupe Air Liquide, a évoqué les besoins en thermodynamique et les systèmes étudiés faisant appel aux solutions d'électrolytes par le groupe. Les applications sont la capture du CO₂, des NO_x et des SO_x, issues de fumées. Cette capture se fait avec des solutions basiques (NaOH, NaCO₃) ou avec des procédés à l'eau oxygénée. Des études expérimentales sont réalisées et les données sont traitées avec les modèles eNRTL et Pitzer.

Mr Jacques Montagnon de la société ERAMET a mentionné que le groupe utilisait essentiellement des logiciels commerciaux tels que Thermocalc. Les applications de ces logiciels sont en hydro et pyrométallurgies.

Walter Fürst, Professeur à ENSTA-ParisTech, a mis en évidence l'éloignement encore trop important entre le monde industriel et celui de la recherche académique, et l'intérêt d'évoluer vers des modèles plus complexes mais capables de traiter un grand nombre de systèmes. Il apparaît que ce changement ne se fait que lorsqu'on est 'pris à la gorge', c'est-à-dire lorsque les modèles simples ou développés en interne ne peuvent plus être adaptés par des moyens simples.

Colloque SFGP Groupe de travail thermodynamique

Les électrolytes

Jean-Pierre Simonin, professeur à l'Université Paris 6 (Jussieu) a évoqué la limitation des modèles actuels pour les problèmes industriels actuels les plus compliqués à résoudre à son sens : la définition du système étudié, le cas des mélanges de solvants et des solutions à haute température et haute pression. Les modèles simples actuels ne sont pas capables de prédire les effets de températures et de pression si des corrélations dépendant de T et P ne sont pas prises en compte pour le calcul des paramètres du modèle. Des développements théoriques restent essentiels.