



## Colloque SFGP Groupe de travail thermodynamique

### Les électrolytes

- Vous travaillez avec des solutions d'électrolytes mais manquez de base de compréhension des phénomènes ?
- Vous connaissez bien ces mélanges complexes et cherchez des partenariats industriels ?
- Vous désirez développer une nouvelle compétence ou simplement partager vos derniers résultats ?

**Dans tous les cas, nous vous attendons pour la journée thématique « électrolytes » le 13 juin 2012, à l'école des Mines de Paris:**

Malgré le grand nombre d'applications industrielles (l'hydrométallurgie, la capture du CO<sub>2</sub>, le traitement des eaux, l'agroalimentaire, etc..) les modèles thermodynamiques, indispensables pour le dimensionnement des unités évoluent lentement. Ceci est dû à la nature particulièrement complexe de ces mélanges du fait des nombreuses interactions moléculaires qui y sont présentes.

En effet, la thermodynamique a développé de nombreuses équations pour prédire le comportement des fluides que ce soient des composés purs ou des mélanges. En parallèle, la thermodynamique chimique a développé des outils efficaces permettant de prédire le comportement et les propriétés thermophysiques des solutions électrolytiques. Par exemple, nous pouvons citer le modèle de Debye Huckel. Une connaissance plus précise des interactions moléculaires et des techniques de calcul a permis de mettre au point des modèles dont la précision s'améliore au fur et à mesure que de nouveaux modèles sont développés. De même, les techniques de mesures ont beaucoup évolué : les données que l'on peut obtenir sont de plus en plus précises et permettent de mieux paramétrer les modèles.



Date : 13 juin 2012

Lieu : Paris (Mines Paristech)

### Programme prévisionnel de la journée

Horaire (à titre indicatif)	Titre	Nom
9h00 – 9h15	<b>Accueil des participants + café</b>	
	Accueil SFGP	J.C. de Hemptinne (IFPEN)
	Présentation Mines Paristech	C. Coquelet (Mines Paristech)
<b>Les électrolytes, mais qu'est ce que c'est ?</b>		
9h45	Modélisation des solutions d'électrolytes en relation avec leurs spécificités	W. Fürst (ENSTA Paritech)
10h15	Récents développements en modélisation des solutions d'électrolytes	P. Paricaud (ENSTA Paritech)
11h00	Simulation de la thermodynamique et de la structure moléculaire de solutions concentrées de sels de lanthanides(III)	P. Guilbaud (CEA)
11h45	Présentation des posters	C. Coquelet (Mines Paristech)
<b>12h00 Déjeuner + posters</b>		
Horaire (à titre indicatif)	Titre	Nom
<b>Quelques applications et exemples</b>		
13h30	Décarbonation du gaz naturel : quel outil de simulation pour les ingénieurs procédés ?	Jing Zhao (TOTAL)
14h00	Séquestration du CO <sub>2</sub>	J. Corvisier (Mines Paristech Geosciences)
<b>14h30 Pause café</b>		
14h45	Importance de la thermodynamique en métallurgie. Difficultés rencontrées pour modéliser les solutions des procédés hydrométallurgiques	J. Montagnon (ERAMET)
15h15	Les complexes d'éléments <i>f</i> avec les ions sulfates: détermination de leur stabilité thermodynamique avec la formule SIT	T. Vercouter (CEA)
<b>15h45 Table Ronde Animée par Alain Gaunand (Mines Paristech) :</b>		
<b>Quels sont les besoins pour le développement de « bons » modèles thermodynamiques pour la représentation des propriétés thermo physiques utiles pour l'industrie ?</b>		