

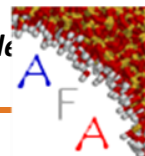
Rencontres Francophones de l'Adsorption

En distanciel

Après-midis des 29 juin, 30 juin, 1^{er} juillet 2021

Programme
Recueil des résumés





Programme détaillé des Rencontres Francophones de l'Adsorption

Mardi 29 juin 2021

14:00 - 14:10 *Introduction*

14:10 - 14:35 **Wilfried KANHOUNNON** (Université d'Abomey-Calavi, Bénin), La modélisation DFT au service de l'adsorption: le cas des résidus pharmaceutiques sur la kaolinite

14:35 - 15:00 **Guy DE WEIRELD** (Université de Mons, Belgique), L'adsorption, solution crédible à la capture du CO₂ : Applications utilisant des MOFs (H2O2-MOF4AIR)

15:00 - 15:25 **Yacine BENGUERBA** (Université Ferhat Abbas Sétif-1, Algérie), Modèles d'isothermes et modélisations moléculaires pour l'adsorption

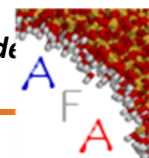
15:25 - 15:45 *Pause*

15:45 - 16:10 **Benoît COASNE** (CNRS, Laboratoire Interdisciplinaire de Physique, France), Adsorption et transport de fluides dans des angstrompores

16:10 - 16:35 **Soumahoro GUEU** (Institut National Polytechnique Félix Houphouët-Boigny, Côte d'Ivoire), Adsorption d'huile essentielle de Lippia multiflora sur deux argiles modifiées en vue de la formulation d'un biopesticide

16:35 - 17:00 **Dominique DEROME** (Université de Sherbrooke, Canada), Où sont les molécules d'eau ? Modélisation atomistique de l'adsorption et du gonflement de mélange de polymères et de composites

17:00 - 18:00 *Echanges sur « Les collaborations au sein de la francophonie: Pourquoi ? ».*
Echanges informels



La modélisation DFT au service de l'adsorption : le cas des résidus pharmaceutiques sur la kaolinite

J. W. Hounfodji^a, **W. G. Kanhounon^a**, G. Kpotin^a, G. S. Atohoun^a, J. Lainé^b, Y. Foucaud^c, M. Badawi^c

^a *Laboratoire de Chimie Théorique et de Spectroscopie Moléculaire (LACTHESMO), Université d'Abomey-Calavi, Bénin.*

^b *Laboratoire de Physique et Chimie Théoriques UMR CNRS 7019, Université de Lorraine, France.*

^c *ICSM, Univ Montpellier, CEA, CNRS, ENSCM, Marcoule, France.*

Non-negligible concentrations of chemicals products are often contained in wastewaters. Although they can be eco-toxic, they are generally poorly removed in water treatment plants. Their accumulation in the environment has become a crucial problem since they present a serious risk to the flora and the fauna [1]. An important fraction of these molecules are pharmaceuticals, including ibuprofen, paracetamol, aspirin, diclofenac –anti-inflammatory drugs, carbamazepine, and diazepam – anti epileptic medications [2]. Their adsorption onto clay minerals and particularly on kaolinite offers an efficient and cheap perspective for wastewaters depollution. In this work, we investigated the adsorption mechanisms and the eventual competition of these molecules on kaolinite by means of density functional theory calculations [3]. We show that these compounds adsorb more favorably than water on the kaolinite (0 0 1) basal aluminol-terminated surface mainly through hydrogen, π , and London interactions. Also, we show that the adsorption of these molecules on kaolinite presents no risk of generating toxic by-products and that, by heating the clay to 360 K, all these compounds can be desorbed.

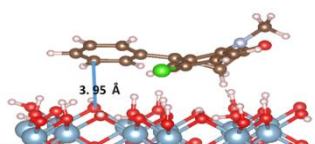
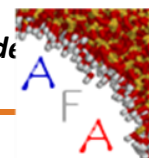


Fig. 1. Flat adsorption configuration of diazepam molecule onto the hydroxylated surface of kaolinite.

Références :

- [1] A. Yessoufou, D. Mama, F. Suanon, E.A. Alamou, B. Fayomi, C. Degbey, C.A. Dedjiho, Pharmaceuticals and Personal Care Products (PPSPS) in the Aquatic Environment: Status and Issues in the Republic of Benin, *Research Journal of Pharmaceutical Sciences*. 5 (2016) 1–15.
- [2] M. Hernando, M. Mezcu, A. Fernandezalba, D. Barcelo, Environmental risk assessment of pharmaceutical residues in wastewater effluents, surface waters and sediments, *Talanta*. 69 (2006) 334–342.
- [3] J.W. Hounfodji, W.G. Kanhounon, G. Kpotin, G.S. Atohoun, J. Lainé, Y. Foucaud, M. Badawi, Molecular insights on the adsorption of some pharmaceutical residues from wastewater on kaolinite surfaces, *Chemical Engineering Journal*. 407 (2021) 127176. <https://doi.org/10.1016/j.cej.2020.127176>.

Wilfried G. Kanhounon (gwilfried1@gmail.com) is a PhD holder in theoretical chemistry and presently assistant professor at the faculty of science and technics of the university of Abomey-Calavi in Benin. His researches focus mainly on adsorption of light molecules on materials targeting water, air and soil depollution.

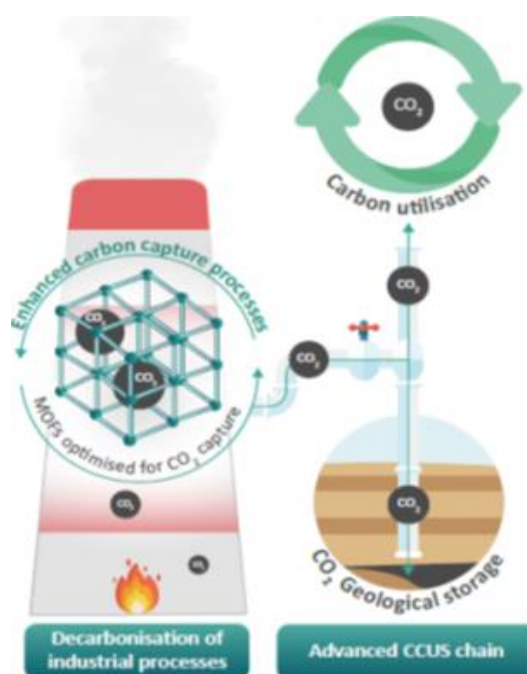


L'adsorption, solution crédible à la capture du CO₂ : Applications utilisant des MOFs (H2020-MOF4AIR)

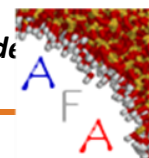
Guy De Weireld

Faculté Polytechnique de Mons, Université de Mons, 20 Place du Parc, 7000 Mons, Belgique.

La transition vers une économie bas carbone nécessite la conception, le développement et le déploiement de solutions de capture du CO₂ industriel. Les procédés d'adsorption sont des alternatives prometteuses comparées aux solutions actuelles (absorption/régénération dans des solvant aminés) souffrant de pénalités énergétiques élevées. Parallèlement, les MOFs (*Metal Organic Framework*) sont une classe d'adsorbants poreux offrant un potentiel énorme, en raison de leur versatilité, de leur grande capacité d'adsorption du CO₂ et de leur affinité élevée pour le CO₂. Dans ce contexte, le projet MOF4AIR (<https://www.mof4air.eu>) vise à développer, valider et démontrer les performances des technologies de capture du CO₂ à base de MOF dans les centrales électriques et les industries énergivores. Les MOFs et le procédé VPSA (*Vacuum Pressure Swing Adsorption*) sont testés de l'échelle du laboratoire (synthèse) au pilote en passant par le scale up, le shaping et les tests de stabilité. Au final, 3 unités VPSA (TRL-6) seront construites afin de prouver l'intérêt et la fiabilité de la capture du CO₂ par adsorption dans les secteurs émetteurs de CO₂ : production d'électricité et raffinerie (TCM, Norvège), raffineries (Tüpras, Turquie) et incinération des déchets (SOLAMAT, France).



Guy De Weireld (Guy.deweireld@umons.ac.be) est professeur ordinaire à la Faculté Polytechnique de l'Université de Mons. Son domaine de recherche principal est l'adsorption dans les matériaux poreux et la catalyse. Ses thématiques sont la capture du CO₂, la séparation des gaz, la purification des gaz/de l'air (élimination des composés acides du gaz naturel, des COV) et de la conversion du CO₂ en carburant ainsi que des évaluations technico-économiques et environnementales des procédés CCUS. Depuis 2019, il est le coordinateur du projet H2020-MOF4AIR : *Metal Organic Frameworks for carbon dioxide Adsorption process in power production and energy Intensive industries*.



Modèles d'isothermes et modélisations moléculaires pour l'adsorption

Y. Benguerba^a, M. Khalfaoui^b

^a Laboratoire des Matériaux Polymères Multiphasiques, LMPMP, Université Ferhat ABBAS Sétif-1, 19000 Sétif, Algérie.

^b Research group in materials science, microelectronics and nanotechnologies, Higher Institute of Computer Sciences and Mathematics of Monastir, University of Monastir, Monastir 5000, Tunisie.

La compréhension des phénomènes d'adsorption est capitale dans le développement de plusieurs processus technologiques pour résoudre des problèmes actuels (environnement, énergie, ...). La modélisation des isothermes d'adsorption et la modélisation moléculaire permettent de comprendre à une échelle microscopique le phénomène physique et donc d'optimiser le système d'adsorption selon les conditions expérimentales. Dans ce contexte, des modèles théoriques basés sur la physique statistique ont été développés pour relier les paramètres physico-chimiques intervenant dans le processus d'adsorption aux propriétés des adsorbants et des adsorbats, dont certains inaccessibles expérimentalement [1]. La modélisation moléculaire vient s'imposer à travers les études *in silico* pour optimiser les systèmes moléculaires via leurs propriétés et ceci selon le domaine d'application [2].

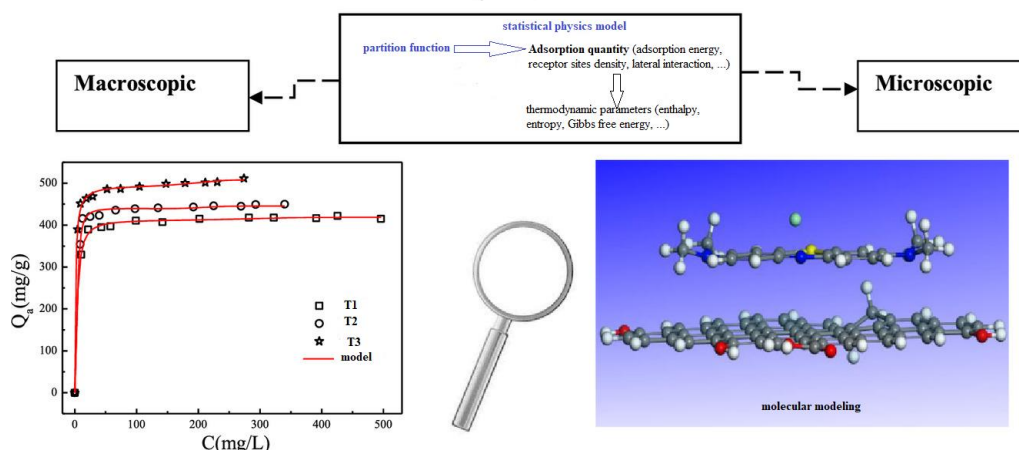
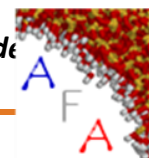


Fig. 1. Approches de modélisation pour l'adsorption

Références :

- [1] M. Khalfaoui, S. Knani, M. A. Hachicha, A. Ben Lamine, *J. Col. and interf. Sc.*, 263, 350-356 (2003).
- [2] A. Nakhli, M. Bergaoui, Kh. H. Toumi, M. Khalfaoui, Y. Benguerba, M. B. Felycia, E. S. Suryadi Ismadji, B. Ernst, A. Erto, *J. Comp. Chem. Eng.*, 140, (2020).

Yacine Benguerba (benguerbayacine@yahoo.fr) est né à Constantine, Algérie, en 1970. Il a obtenu un doctorat en génie chimique (sous la direction du Prof. Brahim DJELLOULI) de l'université de Sétif en 2011, puis son HDR (Habilitation) en 2015. Ses intérêts de recherche portent essentiellement sur la modélisation des processus physiques incluant la dynamique des fluides computationnelle (CFD), la modélisation moléculaire (MM) et l'optimisation des processus chimiques.



Adsorption et transport de fluides dans des angstrompores

B. Coasne^a

^a Lab. Interdisciplinaire de Physique, Univ. Grenoble Alpes/CNRS, Grenoble, France.

<https://www-liphy.univ-grenoble-alpes.fr/benoit-coasne/>

Les matériaux poreux sont au cœur de nombreuses applications importantes : adsorption (détection de gaz, chromatographie), énergie (stockage de l'hydrogène, piles à combustible et batteries), environnement (traitement de l'eau, stockage des déchets), etc. Dans cet exposé, je présenterai l'état de l'art sur l'adsorption et le transport dans les matériaux qui possèdent des tailles de pores à l'échelle subnanométrique : les « angstrompores » [1,2,3]. Nous aborderons tout d'abord les différents régimes d'adsorption rencontrés lorsqu'un fluide est mis en contact avec un matériau poreux : de l'adsorption irréversible/condensation capillaire pour les plus gros pores à la réversibilité/ remplissage continu pour les plus petits pores. Nous verrons qu'une modélisation thermodynamique simple permet de rationaliser ces différents régimes à condition de prendre en compte une description du déplacement du point critique du fluide confiné. Ensuite, nous montrerons comment le transport dans de tels milieux peut être décrit sans avoir à s'appuyer sur des concepts macroscopiques tels que l'hydrodynamique [4,5,6,7].

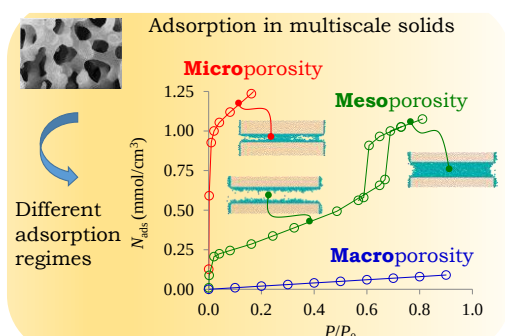


Figure 1. Adsorption dans des pores de silice de différentes tailles. Beaucoup de matériaux poreux présentent une distribution de pore large avec des cavités allant du subnanomètre à l'échelle macroscopique.

Références :

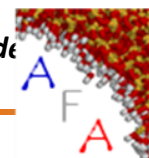
- [1] B. Coasne et al., *Chem. Soc. Rev.* **42**, 4141 (2013).
- [2] B. Coasne, *New J. Chem.* **40**, 4078 (2016).
- [3] I. Deroche et al., *Nature Comm.* **10**, 4642 (2019).
- [4] K. Falk et al., *Nature Comm.* **6**, 6949 (2015).
- [5] A. Botan et al., *Phys. Rev. E*, **91**, 032133 (2015).
- [6] T. Lee et al., *Nature Comm.* **7**, 11890 (2016).
- [7] C. Bousige et al., *Nature Comm.* **12**, 1043 (2021).

Après un doctorat (France, 2003) et un postdoctorat (USA, 2003/05), Benoit Coasne (benoit.coasne@univ-grenoble-alpes.fr) a été recruté au CNRS (2005) puis promu directeur de recherche CNRS (2015). Il a dirigé un groupe de recherche sur la modélisation multi-échelle dans le laboratoire CNRS/MIT au MIT à Boston (2012/15). Il est actuellement directeur de recherche au Lab. Interdisciplinaire de Physique à Grenoble. Il est aussi Conseiller Scientifique pour Veolia. Benoit Coasne a publié ~170 articles dont 2 *Nature Materials*, 6 *Nature Comm.*, 1 *PNAS*, 2 *Chem. Soc. Rev.*, 3 *Phys. Rev. Lett.*

Rencontres Francophones de l'Adsorption

En distanciel, Après-midis des 29 juin, 30 juin, et 1^{er} juillet 2021

<http://www.adsorption.fr/>



Adsorption d'huile essentielle de *Lippia multiflora* sur deux argiles modifiées en vue de la formulation d'un biopesticide

Soumahoro Gueu¹, Vama Etienne Tia², Danièle Bartier³, Odile Barres³ and Fatogoma Dolourou Soro²

¹Institut National Polytechnique Félix Houphouët-Boigny (INP-HB) – Laboratoire des Procédés Industriels de Synthèse, de l'Environnement et des Energies Nouvelles (LAPISEN), BP 1093 Yamoussoukro, Côte d'Ivoire.

²Université Peleforo Gon Coulibaly de Korhogo, UFR Sciences Biologiques, Département de Biochimie, BP 1328 Korhogo, Côte d'Ivoire.

³GeoRessources UMR 7359, Université de Lorraine, CNRS, Campus Aiguillettes, 54500 Vandoeuvre-lès-Nancy, France.

Dans un contexte plus général de développement durable, plusieurs travaux de recherche sont menés pour remplacer les pesticides chimiques par les biopesticides. L'efficacité de ces derniers provient des propriétés insecticides des huiles essentielles (HE). Cependant, les composants actifs des HE sont très volatils. Pour améliorer la durabilité, une formulation basée sur les propriétés adsorbantes des argiles est envisagée dans cette étude. En effet, des études antérieures ont montré que les argiles peuvent être utilisées comme adsorbants pour diverses HE telles que *Ocimum gratissimum* [1], *Xylopia aethiopica* et *Ocimum gratissimum* [2] ou huile d'origan, huile de thym et huile de basilic [3]. Néanmoins, la difficulté reste le manque d'affinité entre l'argile qui est un composé minéral et l'HE, un composé organique. Cette étude traite de l'adsorption de l'HE de *Lippia multiflora*, une HE dont les propriétés insecticides sont avérées dans la littérature [4, 5], sur deux argiles provenant de la Côte d'Ivoire. Auparavant, les deux argiles ont été modifiées avec le tensioactif trioctylméthylammonium pour créer un environnement lipophile en vue d'une meilleure adsorption de l'HE.

Références :

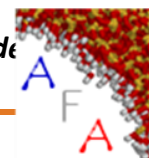
- [1] Noudem J.A., Mbouga M.N., Kaptso K.G., Khalfaoui M. & Noumi G.B. International Journal of Scientific and Technological Research, 6, 134–141 (2017).
- [2] Goletti N.M.M. Formulation of powder insecticides by adsorption of the essential oils of *Xylopia aethiopica* and *Ocimum gratissimum* on modified Cameroonian clays. PhD thesis between National School of Chemistry of Montpellier and the University of Ngaoundere (2012).
- [3] Giannakas A., Tsagkalas I., Achilias D.S. & Ladavos A. Applied Clay Science, 146, 362–370 (2017)
- [4] Bassolé I.H.N., Lamien-Meda A., Bayala B., Tirogo S., Franz C., Novak, J. et al. Molecules 15, 7825-7839 (2010); DOI: <https://doi.org/10.3390/molecules15117825>.
- [5] Tia V.E., Gueu S., Cisse M., Tuo Y., Gnago A.J., Konan E. Journal of Plant Protection Research, Vol. 61, No. 1: 103–109 (2021).

Soumahoro GUEU (gueu05@yahoo.fr), l'orateur de cette communication est un Enseignant-Chercheur à l'INP-HB au grade de Maître Assistant. La valorisation de la biomasse locale est privilégiée dans toutes les recherches qu'il mène. Ces travaux portent sur l'étude du phénomène d'adsorption des matériaux poreux et finement poreux (charbon actif et argile) et sur la fonctionnalisation de la surface de ces matériaux.

Rencontres Francophones de l'Adsorption

En distanciel, Après-midis des 29 juin, 30 juin, et 1^{er} juillet 2021

<http://www.adsorption.fr/>



Où sont les molécules d'eau ? Modélisation atomistique de l'adsorption et du gonflement de mélange de polymères et de composites

C. Zhang^a, M. Chen^a, B. Coasne^b, J. Carmeliet^a, **D. Derome**^c

^a Chair of Building Physics, ETH Zurich, Suisse

^b LIPhy, Univ. Grenoble Alpes, France.

^c Dép. génie civil et g. bâtiment, Université de Sherbrooke, Québec.

Les fortes interactions entre la paroi cellulaire du bois et l'humidité ont une incidence importante sur les comportements et les fonctions hygromécaniques du matériau bois. La modélisation atomistique permet d'élucider la relation bois-humidité à l'échelle moléculaire. Les composants polymères individuels [1], ainsi que leurs composites et interfaces [2], sont caractérisés mécaniquement dans différentes simulations distinctes, rassemblant un ensemble complet de propriétés micromécaniques, y compris la liaison hydrogène, sur toute la gamme d'hydratation [3]. Les données obtenues permettent de démasquer l'impact des interactions intermoléculaires et d'identifier le rôle des différents composants et leurs interactions avec l'eau, y compris l'hystérèse de la sorption [4]. Afin d'étudier le comportement de la couche S2, nous analysons les différentes configurations des agrégats de microfibrilles de cellulose et de la matrice S2 en utilisant des simulations de dynamique moléculaire. Nous transposons les observations en utilisant un modèle constitutif poromécanique [5]. Le phénomène d'hystérèse est capturé avec un modèle des domaines dépendants inspiré par l'ouverture et fermeture de liaisons hydrogène observée à l'échelle nanoscopique. Les facteurs les plus importants déterminant la mécanique du bois à l'échelle nanométrique sont ainsi mis en évidence.

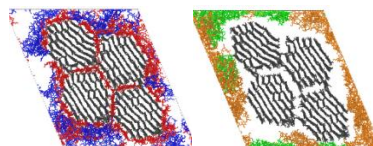
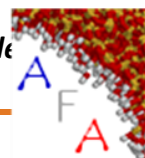


Fig. 1. Modèle de la paroi cellulaire S2 du bois, incorporant cinq polymères, cellulose cristalline, premier blend (lignine et galactoglucomannane), deuxième (lignine et xylan). [3]

Références :

- [1] Zhang C, Coasne B, Guyer R, Derome D, Carmeliet J. *Cellulose*, 27:89-99 (2020).
- [2] Zhang C, Keten S, Derome D, Carmeliet J. *Carbohydrate Polymers*, 258:117682 (2021).
- [3] Zhang C, Chen M., Keten S, Coasne B, Derome D, Carmeliet J. Hygromechanical mechanisms of wood cell wall revealed by molecular modeling and mixture rule analysis, *Sci.Adv.* under revis. (2021).
- [4] Chen M, Coasne B, Guyer R, Derome D, Carmeliet J. (2018). *Nature Comm.*, 9:3507.
- [5] Chen M, Coasne B, Derome D, Carmeliet J. *J. Mech. Phys. Solids*, 137:103830(2020).

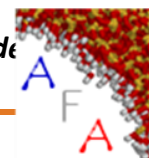
Dominique Derome (Dominique.Derome@USherbrooke.ca), professeure à l'Université de Sherbrooke et titulaire de la Chair de recherche du Canada niveau 1 en Physique du bâtiment multi-échelle, s'intéresse à la physique du bâtiment, les transferts de chaleur et de masse dans l'environnement bâti, la durabilité des matériaux et sur le confort et la santé des occupants.



Programme détaillé des Rencontres Francophones de l'Adsorption

Mercredi 30 juin 2021

-
- 14:00 - 14:25** **Ut Dong THACH** (Ton Duc Thang University, Vietnam), Développement de matériaux fonctionnels pour des applications en séparation, adsorption et biomédecine
- 14:25 - 14:50** **Joeri DENAYER** (Université Libre de Bruxelles, Belgique), Electrification des méthodes de régénération en adsorption
- 14:50 - 15:15** **Renaud DENOYEL** (CNRS, Laboratoire MADIREL, France), Transport et adsorption dans les milieux poreux.
- 15:15 - 15:45** *Pause-Café*
- 15:45 - 16:10** **Fatima BELHADJ** (Université d'Oran, Algérie), Élaboration d'un nanocomposite à base d'oxyde et de zéolithe EMT
- 16:10 - 16:35** **Dominic LARIVIERE** (Université Laval, Canada), Nouveaux matériaux fonctionnalisés pour l'extraction et la séparation des éléments de terres rares
- 16:35 - 17:30** *Echanges sur « Les collaborations au sein de la francophonie: Comment ? ». Echanges informels*



Développement de matériaux fonctionnels pour des applications en séparation, adsorption et biomédecine

Ut Dong Thach^a, Bich Hang Do^a, Phuoc Dien Pham^a, Hiep Dinh Nguyen^a, Tran-Thi Nhu-Trang^b, Minh Huy Do^b, Khanh Van Thi Khuat^c

^a Faculté de Pharmacie, Ton Duc Thang Université, Ho Chi Minh ville, Vietnam.

^b Faculty of Environmental and Food Engineering, Nguyen Tat Thanh Université, Ho Chi Minh ville, Vietnam.

^c Faculté de Chimie, Université de Science -VUN-HCM, Ho Chi Minh ville, Vietnam.

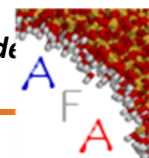
Les récentes activités de recherche de notre groupe concernent au développement de matériaux fonctionnels pour des applications en séparation, adsorption et biomédecine. La synthèse des polymères à empreintes de ciprofloxacine (CIP), un antibiotique très utilisé dans l'aquaculture au Vietnam, par l'approche de multi-monomères fonctionnalisés sera discuté. L'acide méthacrylique (MAA) et le 2-vinylpyridine (2-VP), qui présentent des interactions complémentaires avec la ciprofloxacine, ont été utilisés en tant que les monomères fonctionnalisés. Ces polymères à empreintes obtenus ont été utilisés comme la phase solide sélective pour l'extraction de la ciprofloxacine dans des milieux aqueux. Ensuite, la synthèse de liquide ionique greffé de cellulose via la réaction de silanisation de la cellulose microcristalline et du chlorure de 1- (triméthoxysilylpropyl) -3-méthylimidazolium en utilisant du tétraéthyl orthosilicate et de l'ammoniac comme agent de couplage et catalyseur de base, respectivement, sera présenté.¹ Le matériau résultant a été utilisé comme matériau d'échange d'anions efficaces de méthylorange. Enfin, nous rapportons la synthèse de la cellulose (acide) aminée en deux étapes par la tosylation hétérogène de la cellulose en milieu NaOH/urée et du tensioactif décyl glucoside suivi par une réaction de substitution nucléophile avec des amines ou des dérivés d'acides aminés. Les propriétés antimicrobiennes et cytotoxiques de ces celluloses (acides) aminés ont été étudiées pour des applications biomédicales.

Mots-clés : polymère à empreinte ciprofloxacine, cellulose microcristalline, cellulose (acide) aminée

Références :

[1] U. D.Thach *et al*, *Science & Technology Development Journal*, **2019**, 22(2):228-234

Ut Dong Thach (thachutdong@tdtu.edu.vn) est titulaire d'un doctorat en chimie et physico-chimie de matériaux de l'Université de Montpellier, France (2016). En 2017, il a effectué un post-doctorant avec Dr. Tran-Thi Nhu-Trang à l'Académie de Science et Technologie du Vietnam. En 2018, il devient enseignant à la Faculté de Pharmacie, Ton Duc Thang University, Vietnam. Ses intérêts de recherche sont les polymères à empreinte moléculaire, la chimie de cellulose et son application dans la préparation des matériaux pour des applications biomédicales et environnementales.



Electrification des méthodes de régénération en adsorption

Brieuc Veroughstraete, Chanakya Ranga, Yamid Ali Gomez Rueda, Mohsen Gholami, Tom Van Assche, **Joeri F.M. Denayer**

Department of Chemical Engineering, Vrije Universiteit Brussel, Bruxelles, Belgique.

L'électrification des procédés dans l'industrie chimique est considérée comme l'une des approches nécessaires pour réduire les émissions de CO₂. Pour des procédés tels que le vapocraquage et la production d'ammoniac, le remplacement des méthodes de chauffage conventionnelles par un chauffage électrifié devrait avoir un impact important sur les émissions de CO₂.

De même, dans le domaine des technologies basées sur l'adsorption, l'utilisation du chauffage électrique dans les procédés d'adsorption à oscillation thermique (thermal swing adsorption) pourrait offrir divers avantages. Un inconvénient important des procédés d'adsorption à oscillation thermique par rapport à l'adsorption à pression modulée est la longue durée du cycle et donc l'important stock d'adsorbant nécessaire, en raison de la lenteur du chauffage et du refroidissement de l'adsorbant.

Dans ce travail, nous discutons de quelques approches alternatives pour réduire le temps de cycle. Nous avons évalué l'utilisation du chauffage par induction et par micro-ondes pour les processus de capture du CO₂. Ces méthodes permettent un chauffage direct et local de l'adsorbant. Nous présenterons également certains résultats de nos recherches sur l'adsorption avec régénération électrothermique par effet Joule.

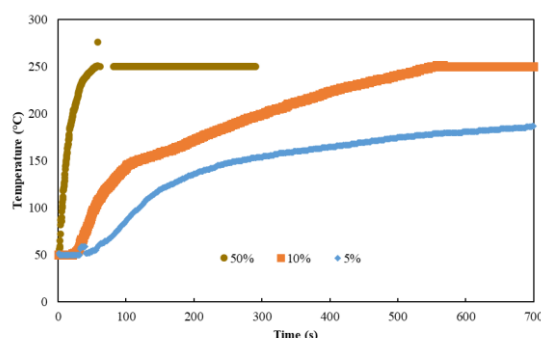
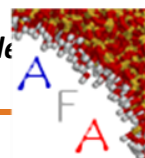


Fig. 1. Augmentation de la température de l'adsorbant composite sous chauffage par induction.

Joeri Denayer (Joeri.Denayer@vub.ac.be) is professor at the Department of Chemical Engineering at the Vrije Universiteit Brussel, Belgium. The team at Brussels aims at developing creative solutions to challenging problems in the field of separation by exploiting the new possibilities in materials engineering and nanotechnology. Intensification of separation processes is a major goal with respect to the development of a sustainable chemistry. Joeri Denayer is co-author of more than 200 publications in international peer-reviewed scientific journals.



Transport et Adsorption dans les milieux poreux

V. Wernert et **R. Denoyel**

Laboratoire MADIREL, Aix-Marseille Université, CNRS, France.

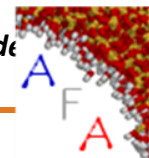
L'étude du transport en milieu poreux est particulièrement compliquée du fait de l'existence de plusieurs phénomènes concomitants, adsorption-diffusion- convection, dont le couplage est difficile à mettre en évidence et qui dépendent aussi de la morphologie du milieu. En utilisant des supports chromatographiques qui constituent des systèmes poreux hiérarchisés, notre approche consiste à séparer les différentes composantes en réalisant des expériences en conditions adsorbantes ou non adsorbantes et en utilisant des sondes de tailles variables qui explorent plus ou moins le matériau poreux. Des méthodes dynamiques ou statiques (dites de « peak parking ») sont utilisées pour accéder aux coefficients de diffusion apparents dans les différents domaines poreux. La prise en compte de la morphologie est faite à partir d'un paramètre unique, la tortuosité, qui peut être déterminée à la fois à partir des coefficients de diffusion et de mesures électriques en pouvant séparer les échelles dans certains cas. Les différences d'étalement des pics chromatographiques en présence et absence d'adsorption permettent de mettre en évidence un phénomène de diffusion de surface dont l'évolution avec l'interaction sonde/surface peut-être ici analysée grâce au choix d'une série de polymères dont on peut moduler l'adsorption en modifiant la qualité du solvant. Les résultats sont exploités par différents modèles : General rate Model classiquement utilisé en chromatographie, modèles de milieux effectifs, simulations « random walk ».

Renaud Denoyel (renaud.denoyel@univ-amu.fr) est Directeur de Recherche au CNRS et Directeur du laboratoire MADIREL. Il a développé des méthodes expérimentales et théoriques pour caractériser les propriétés des matériaux poreux en termes d'aire spécifique, de taille des pores et de mouillabilité de surface en s'intéressant à la fois aux interfaces solide-gaz et solide-liquide. Plus récemment il s'est intéressé aux propriétés de transport dans les milieux poreux en lien avec leur topologie en développant des mesures électriques de la tortuosité qui sont ensuite introduites dans des modèles de transport appliqués aux méthodes chromatographiques. Il a publié environ 200 articles dans ces différents domaines.

Rencontres Francophones de l'Adsorption

En distanciel, Après-midis des 29 juin, 30 juin, et 1^{er} juillet 2021

<http://www.adsorption.fr/>



Elaboration of nanocomposite with zinc oxide and zeolite: Effect of the concentration

Fatima Belhadj^{1,2*}, Rachida Hamacha²

¹ *Département de Chimie, Faculté des Sciences et Informatique, Université Hassiba Ben Bouali, Chlef, Algérie.*

² *Laboratoire de chimie des matériaux (LCM), B.P 152, El M'Naoue -Oran, Algérie.*

We have investigated the encapsulation of zinc oxide (ZnO) in the pores of the zeolite EMT homologue of the Y zeolite [1,2]. In this work, EMT@ZnO nanocomposites were prepared. The effect of concentration of the Zn²⁺ precursors was evaluated. As a result, EMT@ ZnO nanocomposites were obtained and characterized by powder X-ray diffraction (XRD) and FTIR spectroscopy.

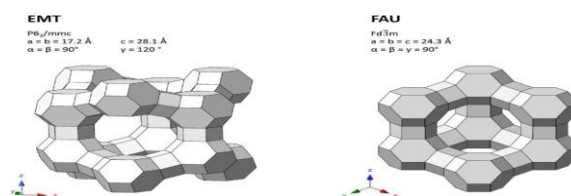


Fig. 1: Ideal cell parameters of the structure EMT (*left*) and FAU (*right*) with b-cages and D6R units[1,]

The XRD analysis proved the encapsulation of ZnO nanoparticles with a high dispersion within the zeolite matrix. The current results suggest that nanocrystallites of ZnO are embedded in nanosized EMT zeolite. The particle size of the nanocomposites ranged from 8 to 15 nm according to Scherrer's formula. In addition, the FTIR spectra showed the characteristic bands for the metal oxide bonds, and the increase of their intensities with increasing concentration in the ion exchange reaction.

Keywords: nanoparticles ; nanocomposites ; zeolite EMT ; ZnO

References:

[1] S.L. Burkett, M.E. Davis, Structure-directing effects in the crown ether-mediated syntheses of FAU and EMT zeolites, *Microporous Mater.*(**1993**), 1 (4) ,265–282.

Dr. Fatima Belhadj: Associate professor at Mohammed Boudiaf University (USTO, Algerian). She was awarded her Phd thesis in materials engineering from Mohamed Boudiaf University Oran-2011 after a doctoral research internship from 2007-2009 in Laboratoire de Spectrochimie Infrarouge et Raman in France. She is engaged in the synthesis of zeolites and porous materials and the study of their catalytic properties, as well as in photoinduced ionization of polyaromatics in zeolites. She can be contacted at: f.belhadj@univ-chlef-dz / [linkedin.com/in/fatima-belhadj-8420b158](https://www.linkedin.com/in/fatima-belhadj-8420b158)

Nouveaux matériaux fonctionnalisés pour l'extraction et la séparation des éléments de terres rares

Y. Hu^{a,b}, J. Florek^c, F.G. Fontaine^b, F. Kleitz^c, **D. Larivière^a**

^a *Laboratoire de radioécologie, Département de chimie, Université Laval, Québec.*

^b *Chaire de recherche du Canada en catalyse verte et procédés sans métaux, Département de chimie, Université Laval, Québec.*

^c *Institute of Inorganic Chemistry, Université de Vienne, Autriche.*

La séparation et la préconcentration des éléments de terres rares (ETR) des concentrés minéraux d'une manière économiquement et écologiquement durable sont des tâches difficiles en raison de leurs propriétés physico-chimiques similaires. Dans le cadre de divers projets subventionnés, une série de ligands ont été synthétisés et greffés sur de la silice mésoporeuse [1-5].

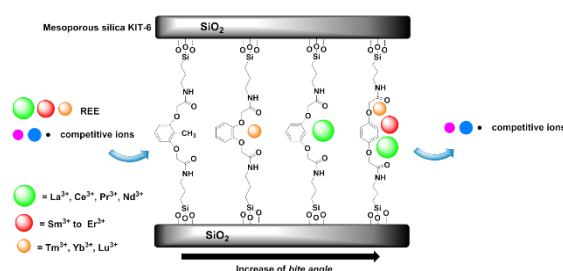


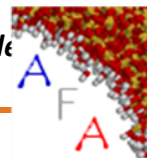
Fig. 1. des exemples de ligand sélectif pour les ETR greffés sur une surface de silice mésoporeuse. [3]

Via l'extraction en phase solide, les adsorbants hybrides permettent une séparation sélective de la taille des ETR sur la base des angles de morsure des ligands. La réutilisation de ces adsorbants ainsi que leurs capacités pour l'extraction des ETR de sources marginales (recyclage des déchets électroniques, résidus miniers, etc.) ont été étudiés et seront présentés.

Références :

- [1] J. Florek et al., *Dalt. Transac.* **45**, 14832-14854 (2016)
- [2] J. Florek et al., *RSC Adv.*, **5**, 103782-103789. (2015)
- [3] Y. Hu et al., *ACS Appl. Mater. Interf.*, **9**, 38584-38593. (2017)
- [4] Y. Hu et al., *Chem. Record*, **18**, 1261-1276. (2018)
- [5] Y. Hu et al., *ACS Appl. Mater. Interf.*, **11**, 23681-23691. (2019)

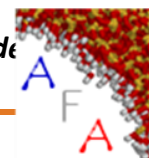
Dominic Larivière (Dominic.Lariviere@chm.ulaval.ca) est professeur titulaire en chimie et directeur du laboratoire de radioécologie à l'Université Laval (Québec, Canada) depuis 2008. Ses travaux portent sur la spéciation, la sorption et la détection des contaminants environnementaux inorganiques (*p. ex.* radionucléides, métaux critiques) à l'aide de nouveaux matériaux et techniques analytiques innovantes. Depuis son arrivée à UL, il a supervisé plus de 50 PHQ, publié plus de 85 articles et collaboré avec succès des initiatives de R&D avec plus de 10 partenaires industriels.



Programme détaillé des Rencontres Francophones de l'Adsorption

Jeudi 1er juillet 2021

-
- 14:00 - 14:25** **Tayssir HAMIEH** (Université Libanaise, Liban), Etude critique des propriétés physico-chimiques et de l'énergie dispersive des surfaces de matériaux à charpente métal-organique par chromatographie en phase gazeuse inverse: application à la détermination des propriétés de surface des cristaux UiO-66
- 14:25 - 14:50** **Bénédicte PRELOT** (CNRS, Institut Charles Gerhardt Montpellier, France), Calorimétrie d'adsorption de polluants (colorants, métaux lourds, radionucléides) sur des matériaux nanostructurés
- 14:50 - 15:15** **Taissire BENAMOR** (Centre de Recherches et Technologies des Eaux, Tunisie), Adsorption des polluants des eaux par des matériaux naturels et Synthétiques
- 15:15 - 15:45** *Pause-Café*
- 15:45 - 16:10** **Lucie AFFOUE BEDE** (Université Félix Houphouët-Boigny, Côte d'Ivoire), Evaluation DFT du mécanisme d'adsorption du benzothiazole et dérivés sur les zéolithes cationiques Y
- 16:10 - 16:35** **Jean-Pierre BELLAT** (Université de Bourgogne, France), Adsorption dans les solides nanoporeux et effets entropiques
- 16:35 - 17:30** *Echanges sur « Les collaborations au sein de la francophonie: En pratique ? ».*
Conclusion.
Echanges informels



Etude critique des propriétés physico-chimiques et de l'énergie dispersive des surfaces de matériaux à charpente métal-organique par chromatographie en phase gazeuse inverse : application à la détermination des propriétés de surface des cristaux UiO-66

T. Hamieh^a, Ali Ali-Ahmad^{a,b,c}, T. Roques-Carmes^b, M. Hmadeh^c, J. Toufaily^a

^a Laboratoires MCEMA et LEADDER, Faculté des Sciences, EDST, Université Libanaise, Liban.

^b Laboratoire Réactions et Génie des Procédés, Université de Lorraine, France.

^c Department of Chemistry, American University of Beirut, Liban.

L'étude des propriétés de surface des cristaux est d'une importance cruciale pour la compréhension et la conception des matériaux pour de nombreuses applications industrielles. La chromatographie gazeuse inverse à dilution infinie [1,2] a été utilisée dans cette étude pour déterminer les propriétés physico-chimiques de surface des MOF, en particulier, les paramètres de surface thermodynamiques dispersifs et non dispersifs et de quantifier les constantes acide-base de Lewis du catalyseur. Plusieurs modèles ont été utilisés pour déterminer les constantes acide-base K_A et K_D des différents MOFs étudiés (Fig.1).

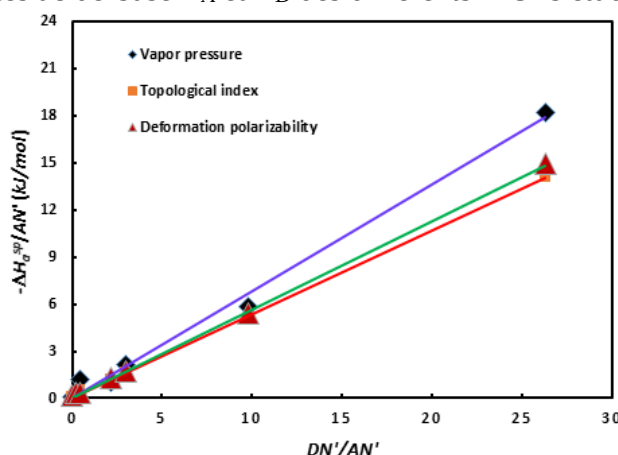


Fig. 1. Variations de $\left(\frac{-\Delta H_a^{SP}}{AN'}\right)$ des sondes adsorbées en fonction de leurs rapports $\left(\frac{DN'}{AN'}\right)$.

Références :

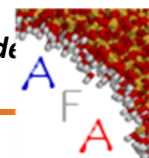
- [1] T Hamieh, A. A. Ahmad, T Roques-Carmes, J Toufaily, *Scientific Reports*, 10 (1), 1-27, (2020).
- [2] T Hamieh, *Journal of Chromatography A*, 1627, 461372, (2020).

Prof. Tayssir Hamieh (tayssir.hamieh@ul.edu.lb), Dr en chimie-physique et Dr en mathématiques, Directeur du laboratoire MCEMA, ancien Doyen de la faculté d'agronomie à l'université libanaise, enseignant-chercheur à l'IS2M de 1983 à 2012, coordinateur de deux collaborations franco-libanaises avec l'université de Haute-Alsace (depuis 1994) et l'université de Lorraine (depuis 2009). Auteur de 450 publications et communications. Président et éditeur d'une vingtaine des conférences internationales.

Rencontres Francophones de l'Adsorption

En distanciel, Après-midis des 29 juin, 30 juin, et 1^{er} juillet 2021

<http://www.adsorption.fr/>



Calorimétrie d'adsorption de polluants (colorants, métaux lourds, radionucléides) sur des matériaux nanostructurés

B. Prélot, G. Martin-Gassin, C. Charnay, F. Salles, J. Zajac, F. Marchandau, A. Geneste, M. Assaf, G. Darmograi, D. Alby, M. Araïssi

^a *Institute Charles Gerhardt de Montpellier, UMR 5253, Université de Montpellier, CNRS, ENSCM, Montpellier Cedex 5, 34095, France.*

Les matériaux nanostructurés font partie de la large gamme de matériaux mis au point pour les procédés de dépollution. Les phénomènes d'adsorption sont liés non seulement à la chimie de surface, mais aussi à l'ensemble des propriétés texturales. Ces caractéristiques affectent non seulement les capacités de rétention, mais aussi les cinétiques et les affinités vis-à-vis de la surface. A l'interface solide / liquide, il faut aussi rajouter l'effet du solvant, et on parlera alors de déplacement. D'un point de vue thermodynamique, plutôt que des mesures à différentes températures, nous développons à l'ICGM des approches calorimétriques pour évaluer directement les différentes contributions enthalpiques à l'adsorption / échange. Plusieurs exemples seront décrits durant l'exposé, avec tout d'abord des matériaux lamellaires. Des manganates lamellaires ont été utilisés pour le traitement d'eau potentiellement contaminée par des radionucléides. Grâce aux mesures en ITC (Isotherm Titration Calorimetry), il a été possible d'expliquer la compétition entre Sr^{2+} et Ca^{2+} [1]. Pour des échangeurs anioniques comme les hydroxydes doubles lamellaires (HDL), les données obtenues pour la sorption de mélanges multicomposants de colorants et d'oxoanions ont là aussi permis d'associer des contributions enthalpiques aux adsorptions préférentielles [2]. Les matériaux zéolithiques sont aussi très couramment utilisés. Dans le cas de la sorption de métaux lourds sur les LTA, nous avons mis en évidence l'additivité de contributions enthalpiques établies à partir de systèmes mono-composants [3]. Enfin dernièrement, des travaux à l'échelle macroscopique (ITC) et locale (en SHS, pour Second Harmonic Scattering) sur la sorption de colorants sur des Faujasites hiérarchiques ont montré les effets du confinement [4].

[1] D., Alby, F. Salles et al., *J. Haz Mat.* **368**, 661-669 (2019).

[2] G. Darmograi, B. Prélot et al., *J. Phys. Chem. C* **120**, 10410–10418 (2016)

[3] B. Prélot, M. Araïssi et al., *Thermochimica Acta* **664**, 39-47 (2018)

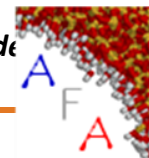
[4] M. Assaf, G. Gassin et al. In Prep.

Bénédicte PRELOT (benedicte.prelot@umontpellier.fr) est Directrice de Recherches au CNRS, et à l'ICGM depuis 2003. Ingénieure de l'ENSG (Géologie - Nancy), elle a poursuivi en recherche, et plus particulièrement en physicochimie des interfaces. Elle développe ses activités dans le domaine de la rétention de polluants sur une gamme étendue matériaux (organiques, minéraux, hybrides, nanostructurés ...). Elle combine des approches fondamentales basées sur des outils calorimétriques en lien avec le design de nouveaux matériaux pour l'adsorption compétitive. Depuis 2 ans, elle est aussi responsable du Plateau Technique de l'ICGM l'une des composantes de la Plateforme d'Analyses et de Caractérisation Chimie Balard.

Rencontres Francophones de l'Adsorption

En distanciel, Après-midis des 29 juin, 30 juin, et 1^{er} juillet 2021

<http://www.adsorption.fr/>



Adsorption des polluants des eaux par des matériaux naturels et synthétiques

T. Ben Amor, R. Lafi, A. Hafiane

Laboratoire Eau, Membrane et Biotechnologies de l'Environnement, Centre de Recherches et Technologies des Eaux, Technopole de Borj-cédria, Tunisie.

En Tunisie, l'eau occupe une place prépondérante dans les plans de développement socio-économique. Les ressources hydriques sont faibles, en raison de la taille modeste des bassins hydrologiques, et des précipitations limitées. En outre de sa rareté, l'approvisionnement en eau de bonne qualité devient de plus en plus difficile. La qualité d'eau ne cesse de se dégrader par la pollution causée des activités agricoles et industrielles. Dans cette optique nous considérons impératif d'entamer une étude qui vise à dépolluer l'eau. Notre projet de recherche vise à adopter toutes avancées en chimie des matériaux pour l'élaboration d'adsorbants ayant des propriétés spécifiques comme :

- La synthèse des matériaux à base de carbone (charbon actif, graphène...), de silice [1] ou des nanomatériaux à base de TiO_2 , ZnO et Fe_3O_4
- Les argiles naturelles [2] ou synthétiques ayant subi des modifications chimique et/ou physique.

Une étude d'optimisation des paramètres expérimentaux d'adsorption sur les différents adsorbants sera réalisée sur des eaux synthétiques en mode statique et dynamique puis sur eau réelle polluée. Une étude cinétique et thermodynamique afin de déterminer le mécanisme d'adsorption propre à chaque polluant sera menée.

Références :

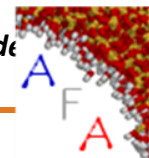
- [1] T. Ben Amor, I. Dhaouadi, B. Lebeau, M. Tlili, M. Ben Amor, Desalination. **15**, 82-87 (2014).
[2] T. Ben Amor, M. Kassem, W. Hajjaji, F. Jamoussi, M. Ben Amor, A. Hafiane, Clays and Clay Minerals, **66**, 493-499 (2018).

Dr Taissire Ben Amor (taissire.benamor@gmail.com), Maître de conférences au Centre de Recherches et Technologies de Eaux depuis 2013. Diplômée en Chimie fondamentale (2007) de l'Université Tunis El Manar. Master de recherche en Chimie des interfaces et matériaux (2008) de l'Université de Bourgogne à Dijon. Doctorat en Chimie des Matériaux (2011) de l'Université de Haute Alsace, IS2M pôle MPC à Mulhouse. HDR en Chimie (2018) de l'Université Tunis El Manar. Ses intérêts de recherche comprennent la synthèse et la caractérisation des matériaux ainsi que le traitement des eaux naturelles.

Rencontres Francophones de l'Adsorption

En distanciel, Après-midis des 29 juin, 30 juin, et 1^{er} juillet 2021

<http://www.adsorption.fr/>



Evaluation DFT du mécanisme d'adsorption du benzothiazole sur les zéolithes cationiques Y

Affoué Lucie Bédé^a, Etienne Paul Hessou^{b,c}, Michael Badawi^b

^aLaboratoire de Constitution et Réaction de la Matière, Université Félix Houphouët-Boigny, Côte d'Ivoire.

^bLaboratoire de Physique et Chimie Théoriques, Université de Lorraine-CNRS, France.

^cLaboratoire de Chimie Théorique et de Spectroscopie Moléculaire, Université d'Abomey-Calavi, Bénin.

Le benzothiazole (BT) et dérivés sont classés comme polluants environnementaux émergents à volume de production élevé. Leur élimination est donc un défi urgent pour la protection de l'environnement et de la santé humaine. Les adsorbants inorganiques tels que les zéolites sont une solution prometteuse pour résoudre ce problème. Dans ce sens, ce travail élucide le processus d'adsorption du benzothiazole dans les zéolites. En utilisant des calculs DFT périodiques, nous avons étudié l'interaction entre la faujasite à échange de cations et le benzothiazole. Plusieurs modes d'adsorption ont été explorés: via l'azote, le soufre et le centre du noyau aromatique. Les valeurs des énergies d'adsorption sont comprises entre -124.7 (LiY) et -183.8 kJ/mol (CuY) via azote; -81.1 (LiY) et -124.2 kJ/mol (AgY) via le soufre; -92.3 (LiY) et -161.2 kJ/mol (CuY) via le cycle aromatique. La zéolite LiY est de loin l'adsorbant qui interagit le moins avec ce composé. En calculant la variation des longueurs de liaison avant et après l'adsorption, nous avons évalué la tendance de l'adsorbant à réagir; car un étirement important conduirait à l'activation de la liaison. Les interactions via l'azote (N) et le soufre (S) semblent ne pas activer les molécules lors de l'adsorption dans le CuY.

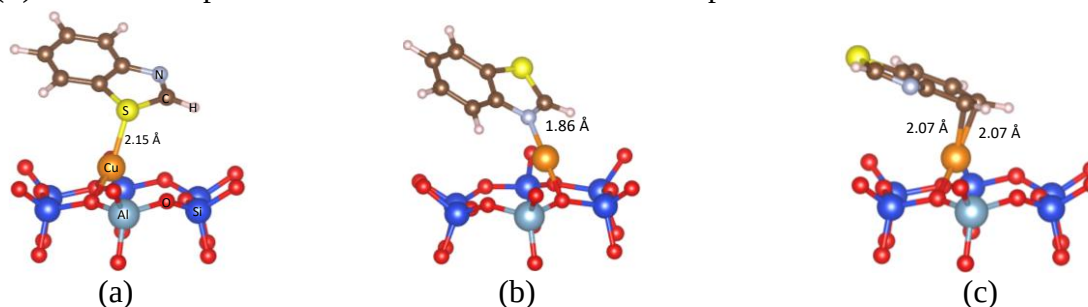


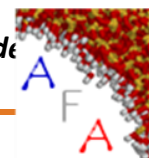
Figure: Configurations d'adsorption les plus stables du benzothiazole dans CuY via: (a) le soufre, (b) l'azote, et (c) le noyau aromatique. Les distances entre le cation Cu^+ et les sites d'interaction sont également indiquées.

Références :

[1] C. Liao, U.J. Kim, K. Kannan, *Environ. Sci. Technol.* 52, 5007–5026 (2018).

[2] J. Asheim, K. Vike-Jonas, *Science of the Total Environment*, 649, 703–711, (2019).

Affoué Lucie BEDE épouse BAGAYOKO (affoue.bede62@ufhb.edu.ci) est Enseignant-Chercheur au Laboratoire de Constitution et Réaction de la Matière à l'Université Félix Houphouët-Boigny de Côte d'Ivoire. Ses travaux portent sur l'analyse structurale et la réactivité moléculaire ; et sont déclinés en trois thèmes de recherche: stabilité et réactivité moléculaire, étude théorique de la relation structure-activité et étude par les méthodes quantiques de la dépollution de l'environnement.



Adsorption dans les solides nanoporeux et effets entropiques

J.P. Bellat, I. Bezverkhyy, J.M. Salazar, J.M. Simon, G. Weber

Laboratoire Interdisciplinaire Carnot de Bourgogne ICB UMR6303 CNRS

Université de Bourgogne Franche-Comté

9 A. Savary BP 47870 21078 France.

Les zéolithes sont, grâce à leur microporosité parfaitement bien contrôlée, des adsorbants de choix pour la séparation des gaz par adsorption sélective. Dans ces matériaux la séparation est finalement rarement la conséquence d'un véritable tamisage moléculaire. Très souvent, les molécules à séparer peuvent toutes accéder à la microporosité et se sont les différences d'enthalpies libres d'adsorption des constituants qui rendent le processus sélectif. Les effets de confinement jouent un rôle important dans ces processus de coadsorption, notamment à fort remplissage, quand les molécules à séparer sont de grosse taille ou encore quand la température est très basse (< 77 K). Des phénomènes de réarrangement moléculaire peuvent alors se produire et conduire à des processus de séparation qui sont gouvernés par des effets entropiques plutôt que par des différences d'interactions gaz-zéolithe. Ces phénomènes de séparation par effet entropiques sont illustrés à l'aide de quelques exemples tirés d'études sur la coadsorption d'hydrocarbures dans les faujasites et d'isotopes de l'hydrogène dans la chabasite.

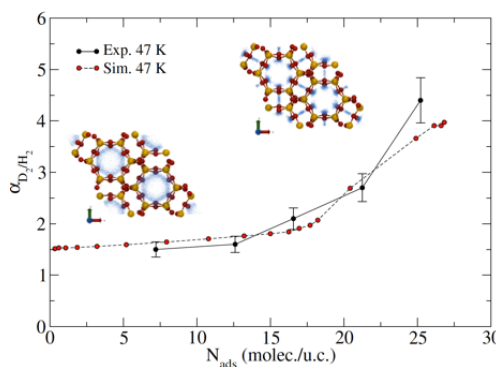


Fig. 1. Augmentation de la sélectivité d'adsorption du deutérium par rapport à l'hydrogène consécutif à un réarrangement moléculaire de la phase adsorbée dans la zéolithe CHA [1].

Références :

[1] B. Radola, I. Bezverkhyy, J.M. Simon, J.M. Salazar, M. Macaud and J.P. Bellat, Chem. Com. 56, 5564 (2020).

Jean-Pierre Bellat (jean-pierre.bellat@u-bourgogne.fr) est Professeur de Chimie-Physique à l'Université de Bourgogne de Dijon. Il dirige, au sein de l'ICB le groupe « Adsorption sur Solides Poreux » qui est spécialisé dans l'étude des phénomènes d'adsorption et de transfert de gaz dans divers matériaux tant à l'échelle macroscopique qu'à l'échelle moléculaire.

Rencontres Francophones de l'Adsorption

En distanciel, Après-midis des 29 juin, 30 juin, et 1^{er} juillet 2021

<http://www.adsorption.fr/>