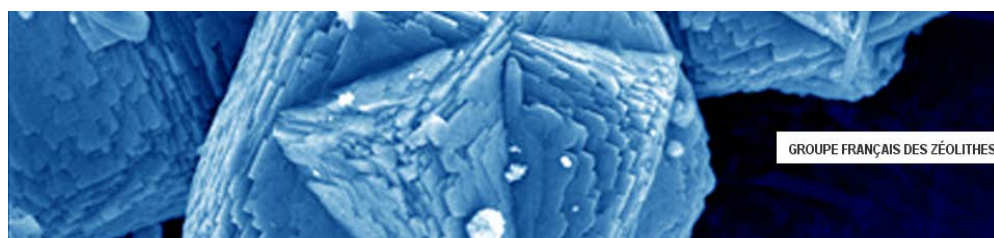


GFZ 2019



PROGRAMME



35^{ème} réunion annuelle du GFZ

Du 2 au 4 avril 2019

À l'Hôtel Club Igesa sur l'île de Porquerolles



Impression



Lundi 1^{er} avril

16h00	Accueil des participants à l'école d'été & café de bienvenue
16h30	A. Galarneau: Design of silica and zeolite monoliths with hierarchical porosity for mass transfer improvement
17h45	Pause
18h00	C. Martineau-Corcos: Applications of solid-state NMR for the study of porous solids
19h15	Pause
19h30	Apéritif & Dîner

Mardi 2 avril

08h30	G. De Weireld: Adsorption et coadsorption en phase gazeuse dans des solides microporeux
09h45	Pause café
10h00	T. Mineva: Introduction to density functional theory and its application to zeolites
11h00	Pause
11h15	G. Pirngruber: Some examples of industrial applications of zeolites
12h30	Déjeuner

16h00	Accueil des participants à la réunion GFZ, installation poster & café de bienvenue
16h30	Cérémonie d'ouverture
16h45	Plénière M. Pereira
17h30	Flash Thèmes 1 & 3, présentations exposants
18h15	Session poster
19h30	Apéritif & Dîner

Mercredi 3 avril

09h00	Plénière J. Denayer
09h45	O1.1 Peng
	O1.2 F. Lorignon
	O1.3. A. Gossard
10h30	Pause café
11h00	O1.4 K. Moukahlal
	O1.5. C. Megias-Sayago
	O1.6. H.N. Le
11h45	Flash Thème 2
12h30	Déjeuner
13h45	O2.1A. Hertz
	O2.2. S. Komaty
	O2.3. A. Bonnin
	O2.4. R. Beucher
	O2.5. Z. Mcheik
	O2.6. S. Soria Castro
15h15	Session poster & café
16h45	O3.1. B. Coasne
	O3.2. L. Treps
	O3.3. M. Debost
17h30	Plénière M. Hibert
18h15	Assemblée générale & remise des prix
19h30	Banquet

Jeudi 4 avril

09h00	Plénière G. Maurin
09h45	O3.4 H. Monnier
	O3.5 T. Hamieh
	O3.6 A. Galarneau
10h30	Clotûre de la réunion
11h00	Départ

35^{ème} réunion du GFZ 2019

Programme Scientifique de la réunion annuelle	
<i>Mardi 02 avril 2019 après midi</i>	
16h00	Accueil des participants
16h30	Ouverture du congrès
Chairmen: Christophe Bouchy et Benoit Louis	
16h45	Conférence plénière : "Zeolites: the key to control hydrocarbon chemistry and produce sustainable fuels" Marcelo Maciel Pereira (LACES)
17h30	Présentations flash Thème 1 (Elaboration et mise en forme de matériaux poreux) et Thème 3 (Modélisation et caractérisation de matériaux poreux) et présentations exposants
P1-1	Mise en forme de la zéolithe pour améliorer la diffusivité effective R. Bingre, P. Nguyen, B. Louis
P1-2	Mise en forme des zéolithes en monolithes et en particules de 1 mm par transformation pseudomorphique B. Said, Y. Didi, T. Cacciaguerra, F. Fajula, A. Galarneau
P1-3	Intercalation de l'ampicilline dans le silicate en feuillets de type magadiite A. Mokhtar, A. Djelad, M. Zahraoui, A. Bengueddach, M. Sassi
P1-4	Synthèse de membranes minérales à partir de matériaux zéolithiques: étude des propriétés de filtration et application au traitement de l'eau M.J. Yao, P. Dutournié, P. A. Ahoussou, T.J. Daou
P1-5	Etude de l'hydrophobicité des matériaux mésoporeux de type Al-FSM-16 Z. Talha, A. Bengueddach, C. Bachir, F. Villières, R. Hamacha
P3-1	A DFT investigation of the adsorption of dibenzylsulfide in Cationic-Exchanged Y Faujasites E.P. Hessou, M. Ponce-Vargas, J.-B. Mensah, F. Tielens, J.C. Santos, M. Badawi
P3-2	Importance de la polarisabilité et de l'encombrement stérique des molécules de PCDD/F sur leurs interactions avec des zéolithes dans un préleveur normalisé EN1948-1 en sortie d'incinérateur O. Schäf, L. Tortet, A. Simon-Masseron, J. Patarin, S. Defour, C. Coste, Y. Zerega
EXP-1	Présentation de la société Mercer Instruments (BEL Europe GmbH & Hiden Isochema) M. Mercer
EXP-2	Présentation de la société Courtage Analyses Services / 2S-Instrument S. Sigrist
EXP-3	Présentation de la société Micromeritics R. Dez
18h15	Session poster
19h30	<i>Apéritif de bienvenue et dîner</i>
<i>Mercredi 03 avril 2019</i>	
Chairmen: Jean Daou et Julien Reboul	
09h00	Conférence plénière : "Bio-alcohol recovery using shape selective adsorbents" Joeri Denayer (VUB)

09h45	Oral 1 Thème 1 : P. Peng, D. Stosic, X.-M. Liu, Z.-F. Yan, S. Mintova: "Strategy towards enhanced catalytic performance of zeolite: raising effective diffusion coefficient versus reducing diffusion length"
10h00	Oral 2 Thème 1 : F. Lorignon, M. Cognet, A. Gossard, M. Carboni, D. Meyer: "Monolithic assembly de MOFs from Pickering-HIPE emulsions"
10h15	Oral 3 Thème 1 : A. Gossard, N. Fabregue, A.-H. Le, A. Hertz, A. Grandjean: "Emulsions de Pickering à haute phase interne stabilisées par des particules submicroniques de zéolithe LTA comme précurseurs de matériaux à porosité hiérarchisée"
10h30	<i>Pause</i>
Chairmen: Nicolas Brun et Marcelo Maciel Pereira	
11h00	Oral 4 Thème 1 : K. Moukahal, B. Lebeau, J. Toufaily, T. Hamieh, T.J. Daou: "Elaboration de billes de zéolithes hiérarchisées de type MFI composées de nanofeuillets ZSM-5 par transformation pseudomorphique"
11h15	Oral 5 Thème 1 : C. Megías-Sayago, B. Louis: "Fluoride-mediated synthesis of ZSM-5 by using a Lewis acid precursor: impact of synthesis parameters on zeolite properties"
11h30	Oral 6 Thème 1 : N.H. Le, S. Garreau, M. Bonne, C. Megías, B. Louis, B. Lebeau, L. Balan: "Nouveaux catalyseurs verts obtenus par photo-génération de nanoparticules d'or au sein d'une silice mésoporeuse de type SBA-15"
11h45	Présentations flash Thème 2 (Applications des matériaux poreux)
P2-1	Alcohol dehydrogenation catalyzed by a defective zirconium-based metal-organic framework P. Gairola, F. Launay, P. Massiani, C. Jolival, J.-M. Krafft, Y. Millot, J. Reboul
P2-2	Adsorption de colorants sur des matériaux poreux H. Miloudi , D. Bouazza, A. Tayeb
P2-3	Metal Nanoparticles@Metal-Organic Frameworks hybrid materials for sensing and catalysis S. Daj , A. Tissot, C. Serre
P2-4	Synthesis of mesoporous-zeolite materials using Beta zeolite nanoparticles as precursors and their catalytic performance in m-xylene isomerization and disproportionation F.Z. Chaida-Chenni, F. Belhadj, M.S. Grande Casas, C. Márquez-Álvarez, R. Hamacha , A. Bengueddach, J. Pérez-Pariente
P2-5	The Use of Zeolites to Improve Potentiometric High Temperature NOx Gas-Sensors O. Schâf , L. Tortet, C. Marlot, C. Beaussac, M. Gantes
P2-6	Fe/SBA-15 Nanoparticles for Phenol Degradation and OMWW Treatment N. Raad, N. Tabaja, B. Koubaissy, T. Hamieh, J. Toufaily
P2-7	Effet du Catalyseur mésoporeux sur la synthèse de Triazoles substitué par une chaîne grasse F.Z. Abdelhadi, Z. Talha, N. Kambouche, V. Rolland, R. Hamacha, S. Bellahouel-Benzine
P2-8	Préparation et activité antibactérienne de matériaux kenyaite intercalés par des nanoparticules d'argent Z.A. Medjhouda Kebir, A. Mokhtar, M. Adjdir, A. Bengueddach, M. Sassi
P2-9	Synthèse de biodiesel par estérification d'un acide gras sur un matériau mésoporeux de type Al-SBA-15 Z. Talha, A. Bengueddach , C. Bachir, F. Villieras, R. Hamacha
P2-10	Fluorinated Ultra-microporous MOFs for Gas Separation Applications K. Adil , A. Cadiou, Y. Belmabkhout, M. Eddaoudi, G. Maurin
P2-11	Elimination de la Nicotine et de ses dérivés de l'eau de chicha à l'aide de Montmorillonite Activée (AM) Z. Ibrahim , B. Koubaissy, Y. Mohsen, T. Hamieh, T.J. Daou, H. Nouali, M.-L. Foddis, J. Toufaily
12h30	<i>Déjeuner</i>

Chair(wo)men: Charlotte Martineau-Corcoc et Gerhard Pirngruber	
13h45	Oral 1 Thème 2 : A. Hertz , A-H. Le, M. Dunand, A. Escamilla-Perez, Y. Barre, B. Zeidman, S. Hu, C. Henager, A. Grandjean: "Etude des mécanismes d'échange et de diffusion des ions dans des adsorbants à base de zéolithe LTA – Mise en œuvre pour le traitement d'effluents en colonne"
14h00	Oral 2 Thème 2 : S. Komaty , C. Anfray, M. Zaarour, S. Valable, S. Mintova: "Nanosized zeolites for gas delivery"
14h15	Oral 3 Thème 2 : A. Bonnin , V. Coupard, D. Uzio, Y. Pouilloux, L. Pinard: "Mécanisme d'aromatization de l'éthylène sur Zn/H-ZSM5"
14h30	Oral 4 Thème 2 : R. Beucher , C. Cammarano, V. Hulea: "Conversion de l'éthylène en propylène au contact d'un aluminosilicate mésoporeux de type KIT-6 par réaction catalytique en cascade"
14h45	Oral 5 Thème 2 : Z. Mcheik , L. Pinard, A. Sachse, J. Toufaily, T.J. Daou: "Influence de la taille des cristaux et de la mise en forme sur les propriétés catalytiques de la zéolithe MOR"
15h00	Oral 6 Thème 2 : S. Soria Castro , M. Cormier, B. Lebeau, T.J. Daou, J.P. Goddard: "Photocatalyse redox par des systèmes hybrides pour la synthèse organique"
15h15	<i>Pause / Session poster</i>
Chair(wo)men: Jean Daou et Anne Galarneau	
16h45	Oral 1 Thème 3 : M. Bah, E. D. Mang, P. da Costa, M. Drobek, A. Ayrat, G. Despau, E. Le Clezio, A. Julbe, B. Coasne : "Acoustic Footprint of Gas Permeation through Porous Materials"
17h00	Oral 2 Thème 3 : L. Treps , T. de Bruin, C. Chizallet: "Définition à l'échelle atomique de l'interface zéolithe/liant"
17h15	Oral 3 Thème 3 : M. Debost , J. Grand, N. Barrier, P. Boullay, S. Mintova: "CO ₂ adsorption by nanosized CHA-type zeolite"
17h30	Conférence plénière : "A l'ombre d'Eros : Chimie de l'Amour ?" Marcel Hibert (UNISTRA)
18h15	Assemblée Générale / Remise des prix thèse et poster / Renouvellement partiel du bureau du GFZ
A partir de 19h30	<i>Cérémonie des membres d'honneur / Banquet / Soirée bar</i>
Jeudi 04 avril 2019	
Chair(wo)men: Sandrine Burrelly et Guy de Weireld	
9h00	Conférence plénière : "Computational Structure prediction of MOFs for energy and environmental applications" Guillaume Maurin (ICGM)
9h45	Oral 4 Thème 3 : F. Delachaux, E.P. Hessou, C. Vallières, M. Badawi, H. Monnier : "De la validation de méthodes DFT + vdW par comparaison avec l'expérimental à la prédiction de formulations optimisées de zéolithes faujasite pour le piégeage sélectif de polluants"
10h00	Oral 5 Thème 3 : T. Hamieh , A. Ahmad, J. Toufaily: "Nouvelle Approche dans l'Etude Physique Chimique des Matériaux Poreux par Chromatographie Gazeuse Inverse"

10h15	Oral 6 Thème 3 : A. Galarneau , D. Mehlhorn, D. Minoux: "Specific surface area determination of microporous/mesoporous materials: the case of mesoporous FAU-Y zeolites"
10h30	Clôture de la réunion
11h00	Départ pour Toulon

PLENIERES



THEME

- Thème 1 : Elaboration et mise en forme de matériaux poreux
 Thème 2 : Applications des matériaux poreux
 Thème 3 : Modélisation et caractérisation de matériaux poreux

Zeolites: the key to control hydrocarbon chemistry and produce sustainable fuels

Marcelo M. Pereira

LACES, Instituto de Química, UFRJ, Rio de Janeiro, Brazil

“Catalysis” is the main way for life and industry to control the chemical reactions. Among the heterogeneous catalysts, zeolites play a fundamental role in hundreds of processes. Herein, we demonstrate the crucial role of zeolites in the chemistry of conventional¹ and renewable hydrocarbons². Figure 1 presents an integrated system of refining processes that convert biomass, with extremely high carbon and hydrogen efficiency, *i.e.*; 65-85%, into several green hydrocarbons, useful as gasoline, diesel, jet fuel, and as petrochemicals.

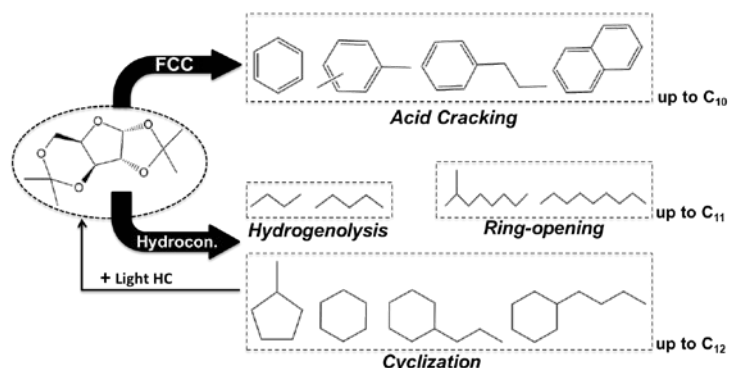


Fig. 1. Green-hydrocarbons production, fluidized catalytic cracking was carried out in the presence of an additive based on ZSM-5; hydroconversion was carried out on ZSM-5 modified by both copper and palladium.

1. Maia, A. J.; Oliveira, B. G.; Esteves, P. M.; Louis, B.; Lam, Y. L.; Pereira, M. M., Isobutane and n-butane cracking on Ni-ZSM-5 catalyst: Effect on light olefin formation. *Appl. Catal. A* 403 (2011) 58.
 2. Pinto, J. F.; Miranda, L. S. M.; Marcelo, P. M., Petroleum Refining and Oil Well Drilling. In *Problems, process and industry prospects*, Olson, K.F., Ed. Nova Science Publishers, New York (2017).



THEME

- Thème 1 : Elaboration et mise en forme de matériaux poreux
- Thème 2 : Applications des matériaux poreux
- Thème 3 : Modélisation et caractérisation de matériaux poreux

Bio-alcohol recovery using shape selective adsorbents

Benjamin Claessens and **Joeri F.M. Denayer**

Department of Chemical Engineering, Vrije Universiteit Brussel, Brussels, Belgium

The depletion of oil reserves and the increasing costs for crude oil have attracted the attention of sustainable and more environmentally-friendly alternatives for petroleum based fuels and chemicals. Bio-ethanol, bio-butanol and bio-isobutanol, produced by fermentation of renewable feedstocks (biomass), are examples of such renewable platform molecules. Typically, the yield of these fermentation processes is low, resulting in a diluted solution with a low alcohol concentration in water, especially in the case of butanol and iso-butanol. As a result, high separation costs (due to the presence of other co-products and low final concentration) prevents successful commercialization.

In this paper, various adsorptive separation strategies for the recovery of bio-alcohols are presented. A selection of relevant zeolites and MOFs (with hydrophobic/hydrophilic properties, shape/non-shape selective, potential kinetic selectivity,...), was applied for the vapor phase separation and recovery of butanol in the headspace of the fermentation chamber. Working in vapor phase offers several advantages; ABE concentrations relative to water vapor are higher, adsorbents don't suffer from stability issues (aqueous conditions and low pH) and no clogging or fouling problems due to microbial cells and inorganic salts. It is demonstrated that a smart combination of materials allows for very high product purity at high recovery.



THEME

- Thème 1 : Elaboration et mise en forme de matériaux poreux
- Thème 2 : Applications des matériaux poreux
- Thème 3 : Modélisation et caractérisation de matériaux poreux

A l'ombre d'Eros : Chimie de l'Amour ?

Marcel Hibert

*Laboratoire d'Innovation Thérapeutique, Faculté de Pharmacie, 74 route du Rhin
67400 ILLKIRCH – France*

Environ 400 ans avant JC, par une simple analyse de son environnement, Démocrite arriva à la conclusion que tout ce qui existe dans ce monde est fait d'atomes et de vide. Les êtres humains aussi. La science moderne tend à lui donner raison. La conséquence en est que toute fonction physiologique peut être considérée comme une combinaison extraordinairement complexe d'interactions moléculaires sous le contrôle de nos gènes, de notre histoire et de notre environnement. Ce concept est généralement bien accepté pour des fonctions triviales telles que la contraction d'un muscle ou une sensation de douleur. Cependant cette vision matérialiste est plus difficile à accepter pour des fonctions apparemment plus élaborées telles que la mémoire ou les états psychiques. Qu'en est-il pour la plus noble d'entre elles, l'Amour ? Il semble maintenant clairement démontré que deux hormones endogènes, la vasopressine et l'ocytocine, sont capables de moduler des fonctions classiquement définies comme l'attachement entre une mère et son enfant, entre deux individus, entre un individu et son groupe social... Nous allons passer en revue ces découvertes récentes et ouvrir le débat sur les perspectives que cela ouvre...ou ferme.



THEME

- Thème 1 : Elaboration et mise en forme de matériaux poreux
- Thème 2 : Applications des matériaux poreux
- Thème 3 : Modélisation et caractérisation de matériaux poreux

Computational Structure prediction of MOFs for energy and environmental applications

M. Wahiduzzaman & G. Maurin

Institut Charles Gerhardt Montpellier UMR 5253 CNRS ENSCM, Université de Montpellier

Metal-organic frameworks (MOFs) and other nanoporous hybrid materials have potentially widespread applications in energy and environmental domains; viz., their potential use as an alternative solid electrolyte for fuel cells and water adsorption based heat pumps which are essential components in the solar cooling systems. Porous MOFs are proving very promising adsorbent materials because of their performance in terms of reversible water absorption/desorption can be easily controllable by tuning of pore size, shape and functionalities through a rational design approach. However, the pathway from laboratory synthesis to such practical implications is substantially challenging. More specifically, the structure determination of these framework materials is often a tedious task due to their relatively poor crystallinity, low symmetry and large unit cell volumes that make the indexation of their powder X-ray patterns very complex. Inspired by the concept of Secondary Building Units (SBU) and the Automated Assembly of Structure Building Units (AASBU) method we have developed a software to facilitate the structure solution of such complex systems. In this presentation, first, we will discuss the challenges in some other computational guided MOF structure prediction approach, viz., the application of conventional reverse topological engineering and will present few example cases of structure determination novel MOF structures that have been solved by our structure prediction toolbox where *ab initio* methods were unsuccessful. We will then highlight the performances of these novel MOFs in terms of water adsorption based proton conduction, gas separation and heat reallocation performance. We will elaborate our discussion on the molecular simulations results obtained from the classical force field-based Monte Carlo and *ab initio* molecular dynamics simulations which were combined with various experiments to elucidate the microscopic mechanisms.

ORAUX



THEME

- Thème 1 : Elaboration et mise en forme de matériaux poreux
 Thème 2 : Applications des matériaux poreux
 Thème 3 : Modélisation et caractérisation de matériaux poreux

Strategy towards enhanced catalytic performance of zeolite: raising effective diffusion coefficient versus reducing diffusion length

P. Peng^{a,b}, D. Stosic^b, X.-M. Liu^a, Z.-F. Yan^{a*}, S. Mintova^{a,b*}

^a State Key Laboratory of Heavy Oil Processing, China University of Petroleum, Qingdao 266580, China

^b Laboratoire Catalyse et Spectrochimie (LCS), Normandie Univ, ENSICAEN, UNICAEN, CNRS, 14000 Caen, France

In the present study, two strategies for improving the catalyst efficiency either by (1) raising the effective diffusion coefficient or (2) reducing the diffusion length of zeolites are presented. These two strategies are exemplified by the preparation of (i) ordered mesoporous material with zeotype secondary building units and (ii) the all-zeolitic structures with additional textural mesoporosity (self-assembled nanosized zeolites).

The textural properties, acidity, and the results from the cumene cracking show that the strength and amount of Brønsted acid sites of the mesoporous molecular sieves are inferior, due to their amorphous pore walls. Even though the strength and amount of Brønsted acid sites can be improved by preserving the zeotype secondary building units into the pore walls of the ordered mesostructures, there are still restrictions for improving their catalyst effectiveness only by the effective diffusion coefficient enhancement. On the other hand, the all-zeolitic structures with additional textural mesoporosity (self-assembled nanosized zeolites) with diminished diffusion path length showed great improvement of the catalyst effectiveness by diffusion controlled reactions.

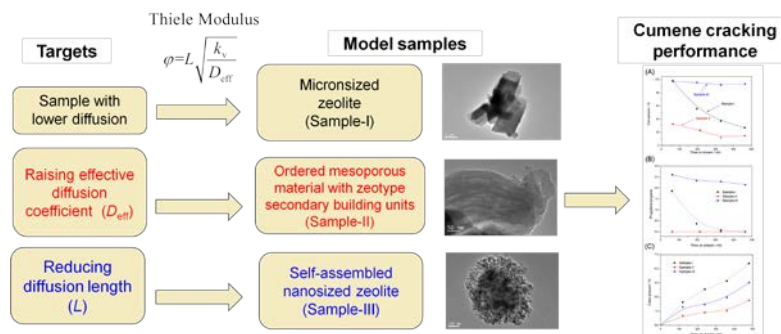


Figure 1. Strategies for enhancing catalyst effectiveness of zeolites and their cumene cracking performance; (A) conversion, (B) propylene-to-propane ratio, (C) coke content.



THEME

- Thème 1 : Elaboration et mise en forme de matériaux poreux
 Thème 2 : Applications des matériaux poreux
 Thème 3 : Modélisation et caractérisation de matériaux poreux

Monolithic assembly de MOFs from Pickering-HIPE emulsions

F. Lorignon^{a,b}, M. Cagnet^a, A. Gossard^b, M. Carboni^a, D. Meyer^a

^a Institut de Chimie Séparative de Marcoule, UMR 5257, CEA/CNRS/ENSCM/UM,F-30207 Bagnols-sur-Cèze, France

^b CEA, DEN, DE2D, SEAD, Laboratoire des Procédés Supercritiques et de Décontamination, Marcoule, F-30207 Bagnols-sur-Cèze, France

E-mail : fabrice.lorignon@cea.fr

The intensive agriculture as well as the demographic evolution contributes to the pollution of environment. Therefore, various processes are established to decontaminate air, soil and water. More specifically, the decontamination of water using solid supports is today an alternative that tends to develop subsequently in the coming years.

Metal-Organic Frameworks (MOFs) are a new class of porous materials which become promising for decontamination. These materials result from the self-assembly of a metal and an organic ligand. They are studied and appreciated for their important surface area, their adjustable pore size, their controllable properties and their chemical stability [1]. The literature has shown that using MOFs for extracting organic pollutants from water can be effective, as the UiO-66 zirconium MOFs which have revealed a significant adsorbent effect on the BTEX [2].

The MOFs used in this study come from the recycling of Li-ion batteries for environmental reasons. However, the synthesis of MOF generally leads to the production of powder, which is problematic for industrial applications. Current research is therefore accentuated on the assembly of MOFs in monolithic shape.

One possibility to make a monolith is using Pickering emulsions. Pickering emulsions are emulsions stabilized by solid particles, MOFs in this study are adsorbed at the interface between aqueous phase and organic phase. In the case of high internal phase emulsions (HIPE), the emulsion is a gel which can be used as a "template" for the synthesis of macroporous monolithic materials. The organic phase can be removed by specific treatments (supercritical CO₂ for example) also the size of droplets defines the final porosity of the monolith. [3]

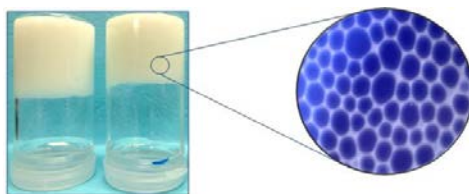


Fig. 1. Gel from Pickering-HIPE emulsion before supercritical CO₂ drying

- [1] H.Furukawa , *Science*, **vol. 341** (2013).
 [2] Amador. RN., Cirre L., Carboni M. et Meyer D., *Journal of Environmental Management*, **vol. 214**, pp. 17-22 (2018).
 [3] Zhang B. *et al*, *Scientific Reports*, **vol. 6** (2016).



THEME

- Thème 1 : Elaboration et mise en forme de matériaux poreux
- Thème 2 : Applications des matériaux poreux
- Thème 3 : Modélisation et caractérisation de matériaux poreux

Emulsions de Pickering à haute phase interne stabilisées par des particules submicroniques de zéolithe LTA comme précurseurs de matériaux à porosité hiérarchisée

A. Gossard, N. Fabregue, A.-H. Le, A. Hertz, A. Grandjean

CEA, DEN, D2ED, SEAD, LPSD, Marcoule, F-30207 Bagnols-sur-Cèze, France

Certaines familles de zéolithes sont particulièrement bien adaptées pour la décontamination nucléaire d'effluents liquides. Par exemple, des adsorbants à base de zéolithe LTA au Na sont très efficaces pour la sorption du Sr en mettant en œuvre des mécanismes sélectifs d'échanges ioniques. Cependant, l'utilisation de ces matériaux dans un procédé dynamique et compact (lit fixe) est toujours un verrou scientifique important. En effet, ces matériaux se présentent généralement sous forme de poudres alors que l'utilisation de matériaux granulaires à multi-porosité est plutôt préconisée.

Une des voies de synthèse possible de ce type de matériaux consiste à utiliser des « Pickering HIPE » (High Internal Phase Emulsion). Ces dernières sont des émulsions composées de plus de 74% volumique de phase interne huileuse stabilisées par des particules solides s'adsorbant à l'interface eau-huile. En faisant croître un squelette solide au sein de la phase continue de la HIPE (polymérisation, réaction sol-gel...), on crée un matériau dont la taille des pores correspond à la réplique des gouttelettes de la HIPE. Les murs des pores sont alors composés des particules utilisées pour stabiliser l'émulsion. Dans le cadre de ces travaux, nous avons étudié la stabilisation d'une Pickering HIPE par des particules submicroniques de zéolithe LTA. Initialement fortement hydrophiles, les particules de zéolithe ont pu être hydrophobisées grâce à l'adsorption d'un tensioactif (TTAB) sur leur surface, permettant ainsi leur adsorption à une interface eau-huile. L'influence des paramètres de formation de l'émulsion (concentration en tensioactifs et en particules, quantité d'huile, cisaillement...) sur ses propriétés (stabilité, taille des gouttelettes, rhéologie...) a été étudiée. Des résultats préliminaires d'obtention de matériaux millimétriques poreux réalisés à partir de ces Pickering HIPE sont également présentés.

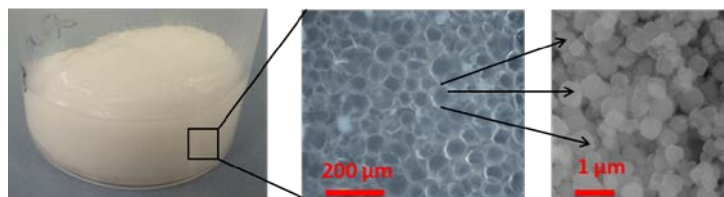


Fig. 1. Pickering HIPE stabilisée par des particules submicroniques de zéolithe LTA

**THEME**

- Thème 1 : Elaboration et mise en forme de matériaux poreux
 Thème 2 : Applications des matériaux poreux
 Thème 3 : Modélisation et caractérisation de matériaux poreux

**Elaboration de billes de zéolithes hiérarchisées de type MFI
composées de nanofeuillets ZSM-5 par transformation
pseudomorphique**

K. Moukahhal^{a,b,c}, B. Lebeau^{a,b}, J. Toufaily^c, T. Hamieh^c, T.J Daou^{a,b}

^a *Université de Haute Alsace (UHA), CNRS, Axe Matériaux à Porosité Contrôlée (MPC), Institut de Science des Matériaux de Mulhouse (IS2M), UMR 7361, 68093 Mulhouse, France*

^b *Université de Strasbourg France*

^c *Laboratoire Matériaux, Catalyse, Environnement et Méthodes Analytiques (MCEMA), Université Libanaise, Hadath, Liban*

En raison des applications multiples des zéolithes, tels que le tamisage moléculaire, l'échange ionique, l'adsorption sélective et la catalyse, une attention croissante a été portée dans le monde entier pour la préparation de zéolithe en forme appropriée pour des applications industrielles. Les billes de zéolithe sont souvent préférables pour l'adsorption et les applications catalytiques dues à une limitation des problèmes d'attrition et de colmatage et une manipulation facile.

Cependant, malgré leurs excellentes propriétés, les cristaux classiques micrométriques de zéolithe qui composent ces billes possèdent des capacités d'adsorption souvent faibles et une cinétique de diffusion relativement lente. Pour surmonter ce problème, la solution idéale est de diminuer la taille des cristaux constituant les billes au-delà de l'échelle nanométrique et créer une mésoporosité supplémentaire à l'intérieur ou entre les cristaux afin d'améliorer la diffusion et accroître la capacité d'adsorption des composés organiques volatils des billes.

La plupart des procédés de mise en forme nécessite plusieurs étapes: ajout de liants ou macrotemplates, tamisage, etc. Parmi ces techniques, la transformation pseudomorphique semble être l'alternative la plus prometteuse. À notre connaissance, elle est la seule technique permettant l'obtention directe de billes de zéolithe en une seule étape sans utiliser de liants sacrificielles ou macrotemplates. Elle consiste à changer la nature du matériau sans modifier sa morphologie macroscopique par une dissolution de la phase initiale qui sert de matière première, suivie par une précipitation simultanée de la phase ciblée [1].

Dans ce travail, le concept de la transformation pseudomorphique a été appliqué pour transformer des sphères de silice mésoporeuse amorphe avec des tailles différentes (20, 50 et 75 μm) mais ayant de tailles de pores similaires (6-8 nm) en des billes de zéolithes hiérarchisées de type MFI composées de nanofeuillets ZSM-5.

[1] J. Sinkankas, *Mineralogy*, vol. **85**, Van Nostrand Reinhold, New York, (1964) 433-449.



THÈME

- Thème 1 : Elaboration et mise en forme de matériaux poreux
 Thème 2 : Applications des matériaux poreux
 Thème 3 : Modélisation et caractérisation de matériaux poreux

Fluoride-mediated synthesis of ZSM-5 by using a Lewis acid precursor: impact of synthesis parameters on zeolite properties

C. Megías-Sayago, B. Louis

*ICPEES - Institut de Chimie et Procédés pour l'Énergie, l'Environnement et la Santé,
 UMR 7515 CNRS - Université de Strasbourg, 67087 Strasbourg, France*

The rational design of zeolites for a targeted reaction frequently remains a challenge that limits its industrial production and application. In this regard, zeolites synthesized via fluoride route gives rise to almost perfect crystals with good methanol-to-olefins (MTO) performances toward light olefins [1] fact that strongly motivates us to further research on this field. During this work, different synthesis parameters such as the Si/Al molar ratio, Si/F⁻ concentration, gel density, synthesis and ageing time have been modified aiming zeolite properties optimization in terms of light olefins selectivity improvement. In addition, a Lewis acid precursor has been used to ensure milder conditions and supply a suitable synthesis environment.

The effect of different synthesis parameters modification on zeolite crystallinity, acid site density, crystal size and morphology has been studied and correlated with the obtained results in the MTO reaction. As representative example, Table 1 summarizes the catalytic data obtained for three different zeolites with different H₂O/Si gel ratios. Differences of 10% light olefins selectivity are observed, bringing to light the importance of synthesis optimization for a proper zeolite design.

Zeolite	Conversion (%)	S (%) CH ₄ - C ₄ H ₁₀	S (%) C ₂ -C ₄	S (%) C ₅₊ aromatics
CMSZ1 H ₂ O/Si 150	100	5	70	24
CMSZ2 H ₂ O/Si 104	100	3	80	17
CMSZ3 H ₂ O/Si 75	100	3	76	21

Table 1. Methanol conversion – product selectivity for ZSM-5 zeolites. Data obtained after **1h** on stream under standardized conditions: 60 mg catalyst, 1.2h⁻¹ WHSV, 450 °C

References

- [1] P. Losch, A.B. Pinar, M.G. Willinger, K. Soukup, S. Chavan, B. Vincent, P. Pale, B. Louis, *J. of Catal.* **345**, 11 (2017)

**THEME**

- Thème 1 : Elaboration et mise en forme de matériaux poreux
 Thème 2 : Applications des matériaux poreux
 Thème 3 : Modélisation et caractérisation de matériaux poreux

Nouveaux catalyseurs verts obtenus par photo-génération de nanoparticules d'or au sein d'une silice mésoporeuse de type SBA-15

N.H. Le^{a,b}, S. Garreau^{a,b}, M. Bonne^{a,b}, C. Megías^c, B. Louis^c, B. Lebeau^{a,b}, L. Balan^{a,b}

^a Université de Haute Alsace (UHA), CNRS, IS2M UMR 7361, 68100 Mulhouse

^b Université de Strasbourg (UNISTRA), Strasbourg

^c Université de Strasbourg (UNISTRA), CNRS, ICPEES UMR 7515, Strasbourg

Actuellement, les recherches sur la catalyse ont tendance à régler les questions de développement durable en réduisant les sous-produits dangereux de l'industrie manufacturière, prévenant les conséquences des changements climatiques et de la pollution de l'environnement, et utilisant écologiquement les ressources naturelles et énergétiques. Cette tendance repose dans le monde de la catalyse sur un grand challenge et une extraordinaire opportunité qui sont non seulement de réussir à synthétiser des catalyseurs hautement actifs et sélectifs, mais aussi selon des procédés rapides, de faible coût et respectueux de l'environnement.

Les catalyseurs à base d'or ont attiré l'attention des scientifiques pour répondre à des préoccupations écologiques et environnementales croissantes. En particulier, grâce à leurs performances catalytiques élevées, ils se révèlent très efficaces pour contrôler la pollution atmosphérique/aquatique (oxydation du CO à basse température, réduction des NOx, décomposition des composés organiques volatils, oxydation voie humide de molécules organiques)¹ et valoriser la biomasse (oxydation des dérivées lignocellulosiques en composés à haute valeur ajoutée).

Nous avons développé une approche photochimique innovante, rapide et éco-efficace pour générer des nanoparticules d'or (AuNPs) confinées dans la porosité d'une silice mésoporeuse organisée, de type SBA-15. Une attention particulière a été portée aux propriétés physicochimiques du support SBA-15 ainsi qu'aux paramètres photoniques afin de contrôler de la taille des AuNPs, leur confinement et leur stabilité dans la structure SBA-15. L'influence de la concentration en précurseur d'or, de l'intensité lumineuse et de la nature du solvant sur la formation des AuNPs a été étudiée. Des nanocomposites AuNPs@SBA-15 à faible teneur en or (0.94 %m) caractérisés par des AuNPs (5 – 6 nm) bien dispersées dans la porosité de la matrice hôte SBA-15, ayant conservé une organisation régulière des canaux et une surface spécifique élevée de 392 m²/g, ont été obtenus. Ces nanocomposites ont été testés pour l'oxydation de l'alcool benzylique en phase liquide et montré une conversion et une sélectivité en benzaldéhyde remarquables de 71% et 92%, respectivement.

Référence :

[1] M.C. Daniel and D. Astruc, *Chem. Rev.* **104**, 293 – 346 (2004)

**THEME**

- Thème 1 : Elaboration et mise en forme de matériaux poreux
 Thème 2 : Applications des matériaux poreux
 Thème 3 : Modélisation et caractérisation de matériaux poreux

Etude des mécanismes d'échange et de diffusion des ions dans des adsorbants à base de zéolithe LTA – Mise en œuvre pour le traitement d'effluents en colonne

**A. Hertz,^a A.-H. Le,^a M. Dunand,^a A. Escamilla-Perez,^a Y. Barre,^a
B. Zeidman,^b S. Hu,^b C. Henager,^b A. Grandjean^a**

^a CEA, DEN, D2ED, SEAD, LPSD, Marcoule, F-30207 Bagnols-sur-Céze, France

^b PNNL Reactor Materials and Mechanical Design Group, Nuclear Science Division,
EED - P.O. Box 999, MSIN J4-55, Richland, WA, 99352, USA

L'industrie nucléaire produit différents types d'effluents contaminés en radioéléments (Cs, Sr, Co, Ag, U, Pu, Am...). Il est alors nécessaire de décontaminer ces effluents avant de pouvoir les rejeter. Le transfert par échange d'ions des radioéléments de l'effluent vers un support solide, permet la réduction du volume de déchet final à entreposer et facilite son conditionnement. La mise en œuvre efficace de ce type d'adsorbant dans un procédé dynamique et compact (lit fixe) représente, encore à l'heure actuelle, un fort enjeu pour le traitement sur site de ces effluents contaminés. L'efficacité de ce procédé est alors conditionnée à la sélectivité de l'adsorbant vis-à-vis de l'élément à traiter et à sa cinétique de sorption.

Les propriétés de sorption d'adsorbants à base de zéolithe LTA au Na (échangeur adapté à la sorption de l'ion Sr) ont été étudiées ici. L'échange entre différents ions en solution (Cs^+ , Ba^{2+} , Sr^{2+} , Ca^{2+}) et les ions Na^+ de la zéolithe LTA a été caractérisé pour comprendre les mécanismes régissant la sélectivité et la diffusion des ions dans cette structure. Les phénomènes de sorption du proton et d'hydrolyse de la zéolithe ont également été mis en évidence. D'autre part, l'influence de la microstructure de la zéolithe LTA (poudres et grains) sur les cinétiques de sorption du Sr a été évaluée. Des profils cinétiques ont été déterminés pour des poudres présentant différentes tailles de cristaux et pour des zéolithes granulaires présentant différentes tailles de grains et de macropores, puis ont été corrélés au comportement des adsorbants granulaires en colonne via la mesure de courbes de percée.

A partir de ces résultats, de nouveaux adsorbants macroscopiques à base de zéolithe LTA et présentant une microstructure idéale pour une mise en œuvre en colonne ont été préparés et sont en cours d'évaluation. Les résultats obtenus serviront également de données d'entrée pour l'implémentation d'un modèle permettant de représenter la diffusion des ions dans la structure de la zéolithe LTA. La démarche sera ensuite appliquée à d'autres échangeurs ioniques.

**THÈME**

- Thème 1 : Elaboration et mise en forme de matériaux poreux
 Thème 2 : Applications des matériaux poreux
 Thème 3 : Modélisation et caractérisation de matériaux poreux

Nanosized zeolites for gas delivery

S. Komaty,^a C. Anfray,^b M. Zaarour,^a S. Valable,^b S. Mintova^{a,*}

^a *Laboratoire Catalyse et Spectrochimie, CNRS-ENSICAEN, 14000 Caen, France*

^b *Imagerie et Stratégies Thérapeutiques des pathologies Cérébrales et Tumorales, CERVOxy Group, CNRS, CEA, 14050 Caen, France*

The special features of zeolite including large surface area, well defined internal voids and charge compensating cations render them as highly attractive for biomedical applications such as gas storage and transportation.ⁱ

Faujasite-X zeolite is tested as gas transporter of O₂ and CO₂ for the treatment of glioblastoma (GB). Ultra-small crystals (10-20 nm) were used to ensure a facile circulation in blood vessels. While the CO₂ is required to dilate the blood vessels and ensure a higher diffusion of blood, O₂ is the key factor for the reoxygenation of infected cells as a major way to fight tumor. The influence of charge compensating cation on the gas loading capacity was evaluated by exchanging sodium (Na-X) by iron (Fe-X) and gadolinium (Gd-X) where both can act as MRI (Magnetic Resonance Imaging) probes to follow the circulation of zeolite in the body.

In situ FTIR studies demonstrated the high O₂ and CO₂ loading capacity of faujasite-X (Na-X); the properties are preserved in presence of gadolinium (Gd-X), and highly enhanced in presence of iron (Fe-X). MRI studied of Fe-X and Gd-X injected in rats having GB illustrated an accumulation of nanosized zeolites specifically in the tumor and not in the surrounding healthy tissue with increase of oxygen pressure in the infected region. Finally, all the tested zeolites showed very low toxicity. Mice astrocytes and human cancer cells were used for this test; the results open the door for their safe use for bio-medical applicationsⁱⁱ.

ⁱ S. Komaty, C. Anfray, M. Zaarour, H. Awala, V. Ruaux, S. Valable, S. Mintova, *Molecules* **23**, 37 (2018)

ⁱⁱ C. Anfray, B. Dong, S. Komaty, S. Mintova, S. Valable, *ACS Appl. Mater. Interfaces* **9**, 13849-13854 (2017)



THEME

- Thème 1 : Elaboration et mise en forme de matériaux poreux
- Thème 2 : Applications des matériaux poreux
- Thème 3 : Modélisation et caractérisation de matériaux poreux

Mécanisme d'aromatisation de l'éthylène sur Zn/H-ZSM5

A. Bonnin,^a V. Coupard,^b D. Uzio,^b Y. Pouilloux,^a L. Pinard^a

^a Université de Poitiers, CNRS UMR7285, Institut de Chimie des Milieux et Matériaux de Poitiers, B27, TSA 51106, 4 rue Michel Brunet, 86073 Poitiers CEDEX 9, France

^b IFPEN, Rond-point de l'échangeur de Solaize, BP 3, 69360 Solaize, France

Le mécanisme d'aromatisation d'oléfines légères sur Zn/MFI à haute température (500°C), i.e. $3 \text{ C}_2\text{H}_4 \rightarrow \text{C}_6\text{H}_6 + 3\text{H}_2$, semble à première vue bifonctionnel : la première étape serait une réaction d'oligo-cyclisation sur les sites protoniques suivie d'une déshydrogénation des naphènes sur les sites métalliques. Cependant ce mécanisme bifonctionnel implique des espèces peu probables: les ions carbénium primaires.

Récemment, un mécanisme monofonctionnel impliquant des sites $(\text{ZnOH})^+$ confinés a été établi [1]. Le rendement en aromatiques est proportionnel avec la teneur en $(\text{ZnOH})^+$, et atteint un maximum à 30% (Figure 1). Ce site catalytique est capable de faire croître une chaîne carbonée, de la cycliser (en raison du confinement) et la déshydrogéner. Par contre à haute conversion, il est aussi capable d'hydrogéner l'éthylène (Figure 2). Cette réaction secondaire limite ainsi le rendement en aromatique.

Quant à la stabilité, elle dépend de la balance entre $(\text{ZnOH})^+$ et les sites protoniques. Elle diminue avec l'augmentation du rapport $[\text{M}]/[\text{H}^+]$. Les sites acides nécessaires à la formation du site actif $(\text{ZnOH})^+$, impacte négativement la stabilité du catalyseur. Les sites acides de Brønsted résiduels catalysent en effet la formation de coke, accélérant ainsi la désactivation.

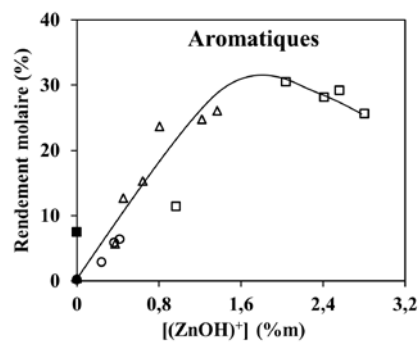


Figure 1 : Mécanisme monofonctionnel.

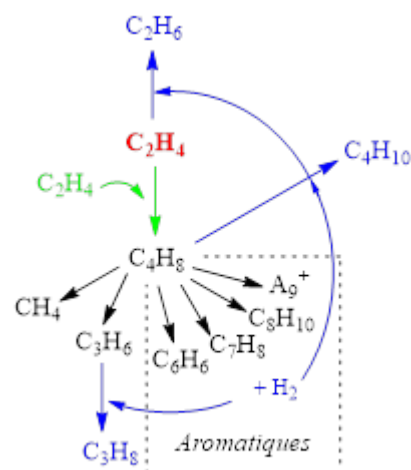


Figure 2 : Schéma réactionnel apparent de l'aromatisation de l'éthylène sur Zn /H-ZSM5.

[1] Thèse Aurélien Bonnin (en cours)



THEME

- Thème 1 : Elaboration et mise en forme de matériaux poreux
- Thème 2 : Applications des matériaux poreux
- Thème 3 : Modélisation et caractérisation de matériaux poreux

Conversion de l'éthylène en propylène au contact d'un aluminosilicate mésoporeux de type KIT-6 par réaction catalytique en cascade

R. Beucher, C. Cammarano, V. Hulea

*Institut Charles Gerhardt, UMR 5253, CNRS-UM- ENSCM, MACS,
240 Avenue du Professeur Emile Jeanbrau, 34090, Montpellier, France*

Le propylène est un intermédiaire et un monomère majeur de l'industrie. Au cours des dernières décennies, pour répondre à la demande croissante en propylène, de nouveaux procédés de production ont été développés, parmi lesquels la métathèse d'un mélange équimolaire de 2-butène et éthylène [1]. Ce dernier fait partie des molécules plateforme bio-sourcées les plus prometteuses : son procédé d'obtention par déshydratation du bio-éthanol devient économiquement viable grâce à une technologie mature capable d'en fournir de forts volumes [2], [3].

Dans cette étude, nous proposons une méthode de conversion directe de l'éthylène en propylène sans apport de 2-butène impliquant des réactions en cascade utilisant deux catalyseurs hétérogènes robustes et très actifs (Fig. 1). L'éthylène est d'abord dimérisé et isomérisé sur un catalyseur à base de Ni pour former du 2-butène qui réagit ensuite avec l'éthylène non converti sur un catalyseur à base de W pour produire sélectivement du propylène par métathèse. Le catalyseur de la première étape est un aluminosilicate mésoporeux ordonné de type Al-KIT-6 sur lequel des sites acides et métalliques sont apportés par échanges ioniques successifs (Ni-H-Al-KIT-6). Le catalyseur suivant a été obtenu par imprégnation de la même silice KIT-6 avec une solution de métatungstate d'ammonium (WO₃/KIT-6). La silice KIT-6, grâce à son réseau mésoporeux interconnecté, garantit une plus grande diffusion des réactifs à travers le matériau, permettant d'atteindre des activités, sélectivités et stabilités élevées. Différentes techniques (DRX, physisorption de N₂, désorption de NH₃ à température programmée - TPD, RMN ²⁷Al MAS et spectroscopie Raman) ont été utilisées pour évaluer les propriétés physiques et chimiques de ces catalyseurs.

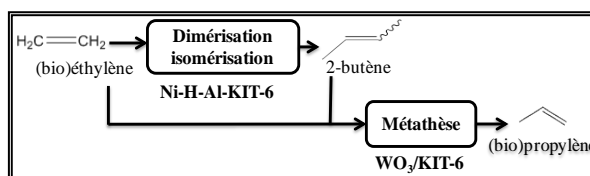


Fig 1 : Réactions en cascades de l'éthylène en propylène

- [1] R. Beucher, C. Cammarano, V. Hulea, et al. , *ACS Catal*, **8** 3636-3640, (2018).
- [2] A. Mohsenzadeh, A. Zamani, et M. J. Taherzadeh, *ChemBioEng Rev.*, **4**, p. 75-91, (2017).
- [3] V. Hulea, *ACS Catal.*,**8**, p. 3263-3279, (2018).



THEME

- Thème 1 : Elaboration et mise en forme de matériaux poreux
 Thème 2 : Applications des matériaux poreux
 Thème 3 : Modélisation et caractérisation de matériaux poreux

Influence de la taille des cristaux et de la mise en forme sur les propriétés catalytiques de la zéolithe MOR

Z.Mcheik^{a,b,c}, L.Pinard^c, A.Sachse^c, J.Toufaily^d, T.J. Daou^{a,b}

^a Université de Haute-Alsace, IS2M-CNRS UMR 7361, F-68100 Mulhouse, France

^b Université de Strasbourg, Strasbourg, France

^c Université de Poitiers, IC2MP-CNRS UMR 7285, F-86022 Poitiers, France

^d Laboratory of Materials, Catalysis, Environment and Analytical Methods (MCEMA)

Les synthèses classiques de zéolithes aboutissent à des tailles de cristaux micrométriques. Cette taille de particule n'est généralement pas pénalisante pour un grand nombre de réactions catalytiques. Cependant, les performances catalytiques de catalyseurs sensibles aux phénomènes diffusionnels pourraient potentiellement être améliorées par l'utilisation de nanocristaux ou de zéolithes hiérarchisées (micro/mésoporeuse) [1]. Une des procédures efficace et rapide pour synthétiser des zéolithes hiérarchisées nanométriques de type MOR consiste en l'utilisation d'agent organique micellaire le bromure d'hexadécyltriméthyl ammonium [2]. L'optimisation de la concentration de ce tensioactif dans le milieu réactionnel a permis le contrôle de la taille et la morphologie des cristaux en inhibant la croissance des cristaux de zéolithes pour donner naissance à des bâtonnets (MOR-Nb) et/ou des feuillets nanométrique (MOR-Nf) d'une épaisseur moyenne de 25 nm au lieu des microcristaux (MOR-M) de taille micrométrique obtenus en absence de ce tensioactif (voir figure 1). L'utilisation de ce tensioactif a permis aussi l'exaltation du volume poreux par la création de mésoporosité. Le volume poreux est multiplié par 2,3 dans le cadre des MOR-Nf comparé à l'échantillon conventionnel MOR-M. Les propriétés catalytiques de la forme acide des zéolithes synthétisées ont été ensuite testées dans la dismutation du toluène.

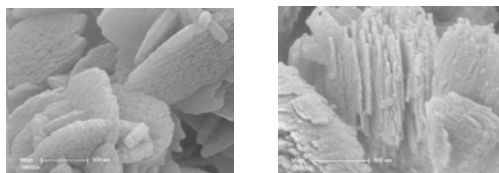


Fig. 1. Images MEB des zéolithes synthétisées : MOR-M (à gauche) MOR-Nf. (à droite)

[1] A. Sachse, J. Garcia Martinez, *J. Chem. Mater.*, **2017**, 29, 3827-3853.

[2] Y.Yuan, et al., *Chinese journal of Catalysis*, **2015**, 36, 1910-1919.



THEME

- Thème 1 : Elaboration et mise en forme de matériaux poreux
 Thème 2 : Applications des matériaux poreux
 Thème 3 : Modélisation et caractérisation de matériaux poreux

Photocatalyse redox par des systèmes hybrides pour la synthèse organique

S. Soria Castro,^{a, b} M. Cormier,^b B. Lebeau,^a T.J. Daou,^a J.-P. Goddard^b

^a Institut de Science des Matériaux de Mulhouse, Axe Matériaux à Porosité Contrôlée, CNRS UMR 7361 – UHA, Bâtiment Jean-Baptiste Donnet, 3bis rue Alfred Werner 68093 Mulhouse cedex

^b Laboratoire d'Innovation Moléculaire et Applications UMR CNRS 7042, équipe Chimie Radicalaire, Hétérocycles et Interfaces, Univ. de Haute-Alsace | Univ. De Strasbourg, 3bis rue Alfred Werner 68093 Mulhouse, France

Dans le contexte actuel où nous assistons à une prise de conscience mondiale vis-à-vis de la nécessité de préserver notre habitat, l'activité humaine doit prendre en compte son impact sur l'environnement. Arrivent alors des défis de taille qui incitent à repenser la plupart des procédés bien éprouvés par des alternatives plus respectueuses de l'environnement. Pour cela, la catalyse photoredox a été étudiée comme une nouvelle voie pour réaliser des transformations organiques en utilisant la lumière visible comme seule source d'énergie [1]. Par ailleurs, des innovations dans la chimie des matériaux poreux ont montré leur importance comme partenaires dans des procédés à hautes performances [2]. Ainsi, nous avons conçu et synthétisé les premiers photocatalyseurs hybrides zéolithe (silicalite-1) / Rose Bengal (RB) et silice mésoporeuse organisée (SBA-15) / RB liés de manière covalente par une chaîne 3-aminopropyl silyle (Fig. 1). Les propriétés physiques et spectroscopiques ont été déterminées. Sous irradiation avec une LED verte, ces catalyseurs hybrides ont permis d'obtenir des résultats particulièrement intéressants pour des transformations chimiques d'intérêt, ce qui est fortement positif pour les développements futurs.

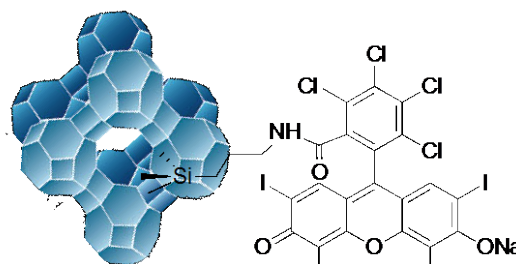


Fig. 1 Photocatalyseur hybride Silicalite-1 Nanoc.-APTES-Rose Bengal.

Références :

- [1] a) J.-P. Goddard, C. Ollivier, L. Fensterbank, *Acc. Chem. Res.*, **49**, 1924 (2016); b) O. Boubertakh, J.-P. Goddard, *Eur. J. Org. Chem.*, **15**, 2072 (2017).
 [2] a) I. Kabalan, B. Lebeau, H. Nouali, J. Toufaily, T. Hamieh, B. Koubaissy, J.-P. Bellat, T. J. Daou, *J. Phys. Chem. C*, **125**, 2688 (2016); b) M. Borel, M. Dodin, T. J. Daou, N. Bats, B. Harbuzaru, J. Patarin, *J. Crystal Growth and Design*, **17**, 1173 (2017).



THEME

- Thème 1 : Elaboration et mise en forme de matériaux poreux
- Thème 2 : Applications des matériaux poreux
- Thème 3 : Modélisation et caractérisation de matériaux poreux

Acoustic Footprint of Gas Permeation through Porous Materials

M. Bah^{a,b}, E. D. Manga^{a,b}, P. da Costa^a, M. Drobek^a, A. Ayrat^a, G. Despaux^b, E. Le Clezio^b, A. Julbe^a, **B. Coasne**^c

^a *Institut Européen des Membranes, Montpellier, France*

^b *Institut d'Electronique et des Systèmes, Montpellier, France*

^c *Univ. Grenoble Alpes, CNRS, LIPhy, Grenoble, France*

Membrane separation using zeolites or other related porous solids such as ceramic materials is an advanced and economically-viable technology used in many everyday life areas. Yet, its extension towards harsh environments raises major safety constraints, and developing on-line diagnostic tools to ensure continuous monitoring of the membrane and separation process has become urgent. Continuous acoustic emission (CAE, already used for damage detection and control of pressurized systems) is very promising to control the quality and evolution of membrane lines [1]. Here, we use CAE and transport experiments to demonstrate that gas permeation through a given porous membrane has a clear acoustic footprint. Using different gases (He, N₂, and CO₂) and porous ceramic membrane series (pore sizes ~ 0.55 nm to 10 μm), we show that acoustic emission at the resonance frequency of the membranes and its harmonics is triggered by the viscous contribution to the total flow [2]. Thanks to a model relying on the coupling between the membrane hydrodynamic mode and the support acoustic mode, we explain the frequency at which acoustic emission is observed, the effect of gas molecule, and the minimum pressure/velocity required to induce the phenomenon [2].

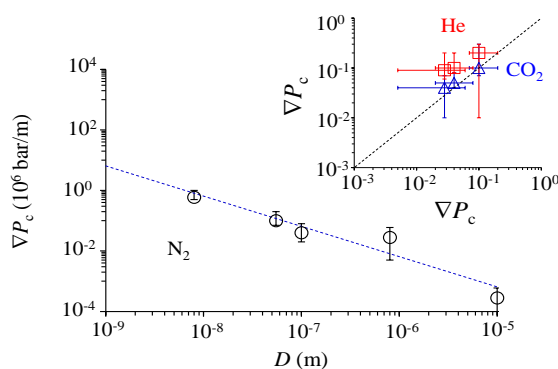


Fig. 1. Minimum pressure gradient ∇P_c above which CAE is observed upon N₂ gas permeation as a function of pore size D . The dashed blue line shows a power law scaling $\nabla P_c \sim 1/D$. The plot is obtained from the data for: $D \sim 8$ nm, 55 nm, 100 nm, $D \sim 800$ nm, and 10 μm. The insert shows the minimum pressure gradient ∇P_c observed for CO₂ (blue triangles) and He (red squares) as a function of ∇P_c observed for N₂. The black dashed line indicates $\nabla P_c(\text{CO}_2) = \nabla P_c(\text{N}_2)$ or $\nabla P_c(\text{He}) = \nabla P_c(\text{N}_2)$.

[1] E. D. Manga, H. Blasco, P. Da Costa, M. Drobek, A. Ayrat, E. Le Clezio, G. Despaux, B. Coasne, A. Julbe, *Langmuir* **30**, 10336 (2014). [2] M. Bah, E. D. Manga, H. Blasco, P. da Costa, M. Drobek, A. Ayrat, G. Despaux, B. Coasne, E. Le Clezio, A. Julbe, *J. Membrane Sci.* **555**, 88 (2018).



THEME

- Thème 1 : Elaboration et mise en forme de matériaux poreux
- Thème 2 : Applications des matériaux poreux
- Thème 3 : Modélisation et caractérisation de matériaux poreux

Définition à l'échelle atomique de l'interface zéolithe/liant

L. Treps,^a T. de Bruin,^b C. Chizallet^a

^a IFP Energies Nouvelles – Solaize, France

^b IFP Energies Nouvelles – Rueil-Malmaison, France

La mise en forme (MEF) des zéolithes dans le domaine industriel est une chimie maîtrisée de manière empirique.^[1] De récentes études sur l'impact physico-chimique des liants sur les propriétés des zéolithes montrent qu'une étude rationnelle sur les processus mis en jeu lors de la MEF permettrait de mieux maîtriser sa mise en œuvre.^[2] A ce jour, aucune étude ab initio n'a été menée sur ce sujet.

Nous étudions la ZSM-5 (MFI)^[3] et l'effet du liant sur ses propriétés via l'utilisation de modèles quantiques (VASP, DFT périodique) et de modèles de champs de force (ReaxFF champs de forces réactifs). Un modèle de surface externe de la ZSM-5 a été construit, étudié (nature de la surface, hydratation, sites acides, ...) et comparé aux expériences (RMN du proton, FT-IR, réactivité, ...) de manière à être ensuite mis au contact de modèles de liants (silice, alumine) et/ou composant du liant.

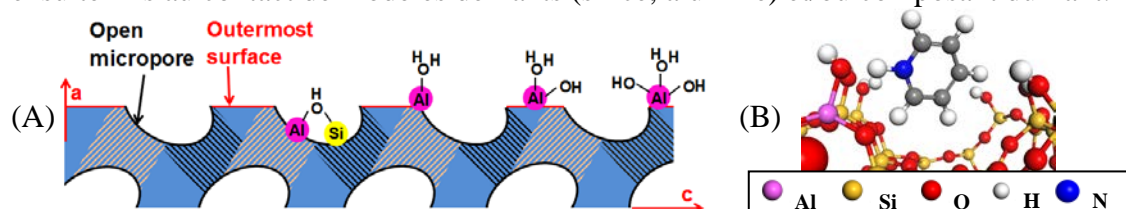


Fig. 1. (A) Sites d'alumination de la surface des zéolithes : pontant Al-OH-Si ; eau sur la surface Al-H₂O ; (B) Pyridine partiellement confinée adsorbée sur un site acide de Brønsted.

Plusieurs types de sites de surface sont mis en évidence : des Si-OH, des sites pontant Al-OH-Si, des Al-OH, et des espèces Al-H₂O (Fig. 1-A). L'acidité (simulation de l'adsorption de pyridine, Fig. 1-B) de Brønsted des pontés est la plus forte, notamment quand le confinement est élevé, et de l'acidité de Lewis est générée par déshydratation des Al-H₂O. Le calcul de l'interaction avec des composés issus des liants (modélisés par Si(OH)₄·Na⁺ - présent dans la silice - et Al(OH)₃(H₂O)) montre que l'alumine a une forte interaction avec l'aluminium de la structure et que le sodium issu de la silice empoisonne les sites acides des zéolithes, ce qui corrobore des résultats expérimentaux obtenus à IFPEN.

[1] J. J. Benbow, J. Bridgwater, *Chemical Engineering Science* **1993**, 48, 3088–3091.

[2] N.-L. Michels, S. Mitchell, J. Pérez-Ramírez, *ACS Catal.* **2014**, 4, 2409–2417.

[3] G. T. Kokotailo, S. L. Lawton, D. H. Olson, W. M. Meier, *Nature* **1978**, 272, 437–438.

**THEME**

- Thème 1 : Elaboration et mise en forme de matériaux poreux
 Thème 2 : Applications des matériaux poreux
 Thème 3 : Modélisation et caractérisation de matériaux poreux

CO₂ adsorption by nanosized CHA-type zeolite**M. Debost^{a,b}, J. Grand,^a N. Barrier^b, P. Boullay^b, S. Mintova^{a*}**

^a*Laboratoire Catalyse et Spectrochimie (LCS), Normandie Université, ENSICAEN, CNRS, 6 boulevard Maréchal Juin, 14050 Caen, France*

^b*Laboratoire de Cristallographie et Sciences des Matériaux (CRISMAT), Normandie Université, ENSICAEN, CNRS, 6 boulevard Maréchal Juin, 14050 Caen, France*

There is an increasing demand for porous materials able to separate the components of natural gas, mainly CH₄ and CO₂. Flexible small pore zeolites are interesting candidates due to their high sorption capacity and selectivity of molecules with similar sizes. This selectivity comes from their small pores, large cavities and shapes which can be control by the introduction of different extra-framework cations such as K⁺, Na⁺, Cs⁺. Indeed, the extra-framework cations in specific locations selectively provide access of molecules to pores and cages of the zeolite, depending on the nature of the molecules.

The present work reports the characterisation of nanosized low silica CHA-type zeolite during the CO₂ adsorption process. It was found that the amount and location of cations combined with the small crystallite sizes had significant influence on the sorption properties of CHA zeolite.

Additionally, the *in situ* FTIR results provide information for the amount of physisorbed vs. chemisorbed CO₂ in the CHA samples. Simultaneously the CH₄ sorption analysis was performed and no evidence for CH₄ adsorbed into the CHA cage was found. To structurally elucidate how CO₂ are adsorbed in this CHA, X-ray powder diffraction (XRPD) measurements were carried out on dehydrated and CO₂-loaded CHA samples at 623K and 298K. Different amount of CO₂ was delivered to a high temperature cell, and the change in the intensity of the Bragg peaks was followed; Rietveld analysis for each particular case was performed. The position of cations in the as prepared CHA samples and position of CO₂ molecules in the samples subjected to controlled adsorption and desorption were determined.

Further CO₂ adsorption cycles on the CHA zeolite were carried out at 298 K. The capacity of the CHA zeolite under 10 continuous cycles was fully preserved; no loss of CO₂ capacity was measured by TG. Moreover, the crystallinity is totally preserved, thus proving that the CHA zeolite has excellent stability.



THEME

- Thème 1 : Elaboration et mise en forme de matériaux poreux
- Thème 2 : Applications des matériaux poreux
- Thème 3 : Modélisation et caractérisation de matériaux poreux

De la validation de méthodes DFT + vdW par comparaison avec l'expérimental à la prédiction de formulations optimisées de zéolithes faujasite pour le piégeage sélectif de polluants

F. Delachaux^{a,c}, E.P. Hessou^{a,b}, C. Vallières^a, M. Badawi^b, **H. Monnier^c**

^a *Université de Lorraine, LRGP CNRS Nancy*

^b *Université de Lorraine, LPCT CNRS Nancy*

^c *Institut National de Recherche et de Sécurité, Nancy*

Dans la séparation des gaz par adsorption, le choix de l'adsorbant demande parfois d'effectuer un grand nombre d'expériences. La modélisation moléculaire peut être un outil précieux pour identifier plus rapidement une formulation adaptée. L'objectif de ce travail est d'évaluer plusieurs méthodes additives à la DFT récemment développées pouvant décrire les interactions de van der Waals (avec des corrections thermiques basées sur les fonctions de partition thermodynamique) en vérifiant leurs capacités à prédire avec précision les chaleurs d'adsorption isostériques q_{st} de deux molécules tests, CO₂ et N₂ dans trois faujasites Y. Les q_{st} expérimentales ont été déterminées d'une part en déterminant les isostères d'adsorption et d'autre part en utilisant la méthode des moindres carrés non linéaires basée sur l'algorithme de Levenberg-Marquardt (L-M) appliquée au modèle de Langmuir qui s'est avérée plus précise.

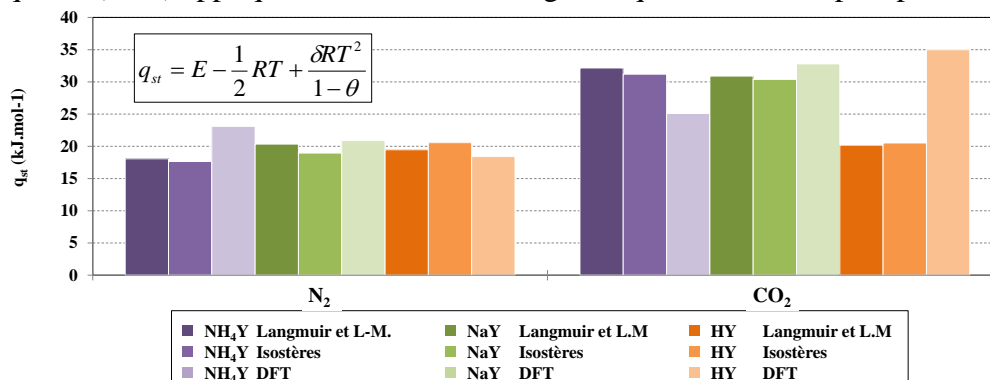


Fig. 1: q_{st} de CO₂ et N₂ pour trois faujasites Y ($\theta = 0$) – comparaison entre les méthodes

Parmi sept méthodes DFT+vdW testées, l'approche TS/Hi [2] offre un meilleur accord avec les expériences grâce à sa capacité à prendre en compte le caractère ionique des zéolithes cationiques. La méthodologie ainsi développée a été utilisée pour effectuer des criblages cationiques afin de trouver un adsorbant adapté pour la séparation de CO₂ et N₂ ainsi que pour le piégeage sélectif des NO_x et du CO.



O3-5

THEME

- Thème 1 : Elaboration et mise en forme de matériaux poreux
 Thème 2 : Applications des matériaux poreux
 Thème 3 : Modélisation et caractérisation de matériaux poreux

Nouvelle Approche dans l'Etude Physico-Chimique des Matériaux Poreux par Chromatographie Gazeuse Inverse**T. Hamieh^a, A. Ahmad^a, J. Toufaily^b**

^a *Laboratoire de Matériaux, Catalyse, Environnement et Méthodes Analytiques (MCEMA), EDST, FS, Université Libanaise, Campus Hariri, Hadath, Beyrouth, Liban*

^b *Laboratoire des Etudes Appliquées au Développement Durable et Energie Renouvelable (LEADDER), EDST, Université Libanaise, Campus Hariri, Hadath, Beyrouth, Liban*

La chromatographie gazeuse inverse (CGI) à dilution infinie est une excellente technique pour caractériser et modéliser des interactions physico-chimiques des substrats solides sur lesquels sont adsorbés des molécules modèles en vue d'améliorer le comportement de ces matériaux dans les processus d'adsorption et d'adhésion dans le cas de leur utilisation dans les différents domaines industriels des sciences environnementales, pétrochimiques, biomédicales et mécaniques.

Les propriétés acido-basiques des surfaces solides ainsi que la composante dispersive de leur énergie de surface peuvent être déterminées par chromatographie gazeuse inverse (CGI) à dilution infinie, en utilisant des liquides de propriétés connues.

L'objectif de cet article est d'appliquer la nouvelle approche que nous avons déjà élaborée et adoptée dans plusieurs études précédentes à l'étude des matériaux poreux par l'utilisation de la CGI à dilution infinie en nous servant des modèles déjà obtenus dans l'étude des équations d'état des films bidimensionnels et qui ont conduit expérimentalement une meilleure caractérisation physico-chimique des matériaux étudiés.

Nous nous intéressons aux propriétés acide-base en termes de Lewis de quelques matériaux poreux et à la détermination des enthalpies et entropies spécifiques de l'interaction des sondes polaires en appliquant le modèle Hamieh permettant d'évaluer les constantes acide-base K_A et K_D et la constante amphotère K de ces matériaux en utilisant :

$$(-\Delta H^{sp}) = K_A \cdot DN + K_D \cdot AN - K \cdot ANDN$$

Où AN et DN sont respectivement les nombres accepteur et donneur d'électrons des molécules polaires.

Cette étude nous a permis également de déterminer la probabilité w de l'adsorption spécifique de sondes polaires sur la surface solide des solides poreux.

Références

1. T. Hamieh and J. Schultz, J. Chim. Phys. 93 (1996) 1292-1331.
2. T. Hamieh, M. Rageul-Lescouet, M. Nardin, H. Haidara and J. Schultz, Colloids and Surfaces A: Physicochemical and Engineering Aspects. 125 (1997) 155-161.
3. T. Hamieh, J. Polym. Res. 18 (2011) 1159-1168.
4. T. Hamieh, Soft Materials. 9 (1) (2011) 15-31.
5. C. Saint Flour and E. Papirer, Ind. Eng. Chem. Prod. Res. Dev. 21 (1982) 337-341.
6. E. Brendlé E. and E. Papirer, J. Colloid Interface Sci. 197, 194 (1), 207-216.
7. T. Hamieh and J. Schultz, Journal of Chromatography A. 969 (1-2) (2002) 17-47.

**THEME**

- Thème 1 : Elaboration et mise en forme de matériaux poreux
 Thème 2 : Applications des matériaux poreux
 Thème 3 : Modélisation et caractérisation de matériaux poreux

Specific surface area determination of microporous/mesoporous materials: the case of mesoporous FAU-Y zeolites

A. Galarneau,^a D. Mehlhorn,^a D. Minoux^b

^a ICGM UMR 5253 CNRS - Univ Montpellier - ENSCM, ENSCM 240 Av Pr E. Jeanbrau, 34296 Montpellier cedex 5, France

^b Total Research&Technology Feluy, Belgium

A methodology has been developed to decouple micropore, mesopore, and external surface areas of hierarchical microporous/mesoporous materials using N₂ adsorption isotherms at 77 K. For microporous materials as FAU-Y, the microporous surface calculated by BET equation using the Rouquerol criterium was in accordance with the geometrical calculation of the surface done by chord length distribution, which allows to calculate total surface areas (S_{BET}) of microporous/mesoporous materials. Mechanical mixtures of MCM-41 and FAU-Y powders of known mesopore and micropore surface areas, respectively, were used to calculate the micropore and the mesopore surface areas of the microporous/mesoporous mixtures by weighted linear combination. These calculated surface areas were compared to the ones calculated the t-plot method. The first slope of the t-plot was used to determined the mesopore + external surface areas ($S_{\text{mes+ext}}$), taking into account for the linear fit the points above $p/p_0 > 0.1$, where all micropores are filled, generally for $0.01 < p/p_0 < 0.17$. Underestimation of micropore volume and overestimation of $S_{\text{mes+ext}}$ were evidenced and corrections were provided [1,2]. External surface areas (S_{ext}) were calculated from the second slope of the t-plot, no overestimation of S_{ext} was noticed. Mesopore surface areas (S_{mes}) were calculated by difference of $S_{\text{mes+ext}}$ with S_{ext} . Micropore surface areas were calculated by difference of total surface area S_{BET} with $S_{\text{mes+ext}}$. As an example, this methodology was applied to characterize a family of hierarchical microporous/mesoporous FAU-Y (FAUmes) synthesized from H-FAU-Y (H-Y, Si/Al = 15) with C18TAB surfactant and different NaOH/Si ratio ($0.05 < \text{NaOH/Si} < 0.25$). By increasing the NaOH/Si ratio in synthesis of FAUmes, it was shown that the micropore surface area decreases, the mesopore surface area increases, while the micropore + mesopore surface area remains constant. This methodology allows to fully characterize the micropore and mesopore surface areas of microporous/mesoporous materials.

[1] A. Galarneau, F. Villemot, J. Rodriguez et al., *Langmuir*. **30**, 13266 - 13274 (2014).

[2] A. Galarneau, D. Mehlhorn et al., *Langmuir*. **34**, 14134 - 14142 (2018).

POSTERS

THEME 1

**THEME**

- Thème 1 : Elaboration et mise en forme de matériaux poreux
 Thème 2 : Applications des matériaux poreux
 Thème 3 : Modélisation et caractérisation de matériaux poreux

Mise en forme de la zéolithe pour améliorer la diffusivité effective

R. Bingre,^a P. Nguyen,^b B. Louis^a

^a ICPEES – Institut de Chimie et Procédés pour l’Energie, l’Environnement et la Santé, Energy and Fuels for a Sustainable Environment Team, UMR 7515 CNRS – Université de Strasbourg, 25 rue Becquerel, F-67087 Strasbourg Cedex 2, France

^b Saint-Gobain C.R.E.E., 550 Avenue Alphonse Jauffret, BP 224, 84306 Cavaillon Cedex, France

Les zéolithes sont le catalyseur hétérogène le plus utilisé dans l’industrie pétrochimique et dans les processus d’adsorption. Ce matériau est obtenu sous forme de poudre, ce qui signifie que son utilisation dans les équipements industriels peut causer des dommages et une perte de charge élevée. Il est donc nécessaire d’extruder la zéolithe avec un liant (par exemple, de la boehmite) en granulés ou en extrudés de quelques centimètres pour conférer une stabilité à contrainte élevée. Plusieurs études ont montré que la présence de ce liant peut provoquer un blocage des pores [1], entraînant une diminution de la diffusivité effective et, par conséquent, une perte de conversion, de sélectivité ou de durée de vie du catalyseur.

Avec cette communication, notre objectif est de présenter notre stratégie pour augmenter le transport de masse. Des agents poreux ont été introduits alors de l’étape d’extrusion afin de créer des mésopores et des macropores dans le liant, afin de faciliter la diffusion des molécules vers et depuis la structure zéolithique. Par des techniques de caractérisation de diffusion, il a été déterminé une amélioration de la diffusivité effective de plusieurs échantillons après l’ajout d’agents poreux par rapport au processus d’extrusion traditionnel. [2] De plus, ces échantillons ont été testés dans la réaction méthanol-to-oléfines, montrant une capacité à maintenir la conversion à 100% pendant plus longtemps.

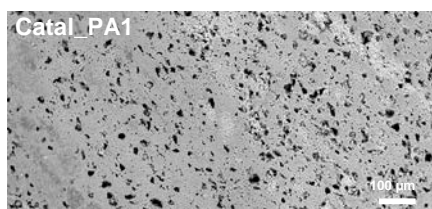


Fig. 1. Échantillon avec des macropores

[1] N.-L. Michels, S. Mitchell, J. Pérez-Ramírez, *ACS Catalysis* **4**, 2409-2417 (2014).

[2] R. Bingre, B. Vincent, Q. Wang, P. Nguyen, B. Louis, *J. Phys. Chem. C* **123**, 637-643 (2019).



THEME

- Thème 1 : Elaboration et mise en forme de matériaux poreux
- Thème 2 : Applications des matériaux poreux
- Thème 3 : Modélisation et caractérisation de matériaux poreux

Mise en forme des zéolithes en monolithes et en particules de 1 mm par transformation pseudomorphique

B. Said, Y. Didi, T. Cacciaguerra, F. Fajula, A. Galarneau

Institut Charles Gerhardt Montpellier, ENSCM, 240 Avenue du Professeur Emile Jeanbrau, 34296, Montpellier Cedex 05, France

Les zéolithes sont généralement obtenues sous forme de cristaux micrométriques, donc sous forme de poudre. Pour leur utilisation en industrie, une étape de mise en forme est nécessaire pour obtenir des objets millimétriques (extrudés). Les zéolithes peuvent être aussi déposées sur des monolithes céramiques, ce qui conduit à une faible quantité de phase active. Pour augmenter la part de phase active, de nouvelles voies de synthèses de monolithes zéolithiques utilisent le freeze-casting ou l'impression 3D. La synthèse de ces monolithes ainsi que celle des extrudés utilisent des liants inorganiques qui diminuent les capacités catalytiques et d'adsorption par rapport à de la zéolithe pure. La présente étude propose un procédé de mise en forme des zéolithes sans ajout de liant, par transformation pseudomorphique d'objets siliciques déjà formés : particules millimétriques et monolithes macro/mésoporeux obtenus par décomposition spinodale idéale pour le transfert de matière. Le principe de la transformation pseudomorphique est d'adapter la vitesse de dissolution de la silice à la vitesse de cristallisation de la zéolithe permettant ainsi de conserver la morphologie initiale. Des particules et des monolithes de zéolithes (SOD, LTA,...) ont ainsi été obtenus permettant l'utilisation de ces zéolithes en flux continu pour l'intensification des procédés d'adsorption et de catalyse [1-3]. Un contrôle précis des conditions de synthèse permet de changer la phase zéolithique et d'obtenir des cristaux nanométriques pour augmenter les cinétiques des réactions [4].

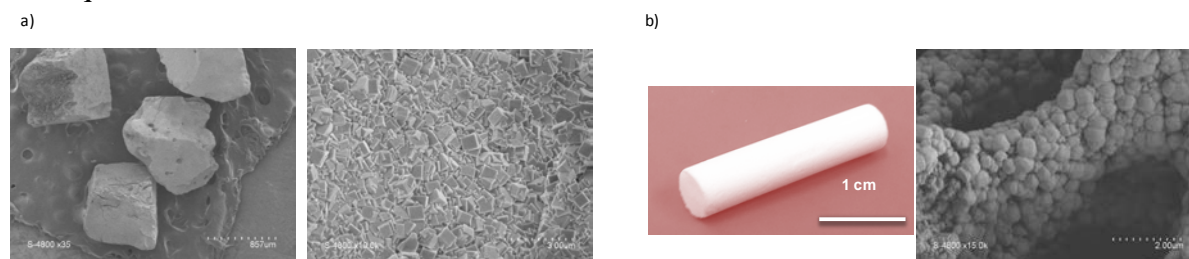


Fig. 1. Particules (a) et monolithe à porosité hiérarchique (b) de LTA obtenus par transformation pseudomorphique

- [1] M. Manko, J. Vittenet, A. Galarneau et al., *Microporous Mesoporous Mater.* **176**, 145-154 (2013).
- [2] A. Sachse, A. Galarneau et al., *Chem. Mater.* **22**, 4123-4125 (2010).
- [3] B.Said, A. Galarneau et al., *Microporous Mesoporous Mater.* **227**, 176-190 (2016).
- [4] B.Said, A. Galarneau et al., *Microporous Mesoporous Mater.* **232**, 39-52 (2016).



THEME

- Thème 1 : Elaboration et mise en forme de matériaux poreux
- Thème 2 : Applications des matériaux poreux
- Thème 3 : Modélisation et caractérisation de matériaux poreux

Intercalation de l'ampicilline dans le silicate en feuillets de type magadiite

A. Mokhtar^a, A. Djelad^a, M. Zahraoui^a, A. Bengueddach^a, M.Sassi^a

^a *Laboratoire de Chimie des Matériaux, Faculté des sciences Exactes et Appliquées, Université Oran1. BP 1524 El-Menaouer -31000- Oran, Algérie*

Les molécules d'ampicilline sont intercalées dans le matériau magadiite-H ($H_2Si_{14}O_{29}, nH_2O$), à partir de solutions aqueuses de cet antibiotique. Les matériaux de départ Na-magadiite et H-magadiite et le matériau magadiite intercalée avec de l'ampicilline (magadiite-Amp) ainsi que l'ampicilline seule sont caractérisés par diffraction de rayons X (XRD), par spectroscopie infrarouge à transformée de Fourier (FTIR) et par analyse thermogravimétrique (TG). La morphologie des solides a été déterminée par analyse au microscope électronique à balayage (SEM). Toutes les techniques de caractérisation montrent que les molécules d'ampicilline sont intercalées dans l'espace interfoliaire de la magadiite et qu'elle sont probablement fortement liées au feuillet silicate par le biais de fortes liaisons hydrogène avec les groupements silanols, $\equiv SiOH$, terminaux. Sur la base des résultats obtenus, un modèle structurel a été proposé (Figure 1). Ce matériau magadiite-Amp-peut constituer un nouveau système d'administration de médicament ou peut également être utilisé comme matériau antibactérien.

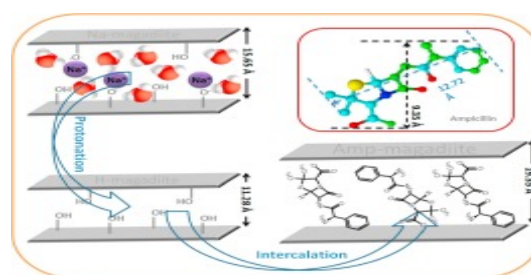


Figure 1: Représentation schématique de l'intercalation de l'ampicilline dans la magadiite-H

**THEME**

- Thème 1 : Élaboration et mise en forme de matériaux poreux
 Thème 2 : Applications des matériaux poreux
 Thème 3 : Modélisation et caractérisation de matériaux poreux

**Synthèse de membranes minérales à partir de matériaux
zéolithiques: étude des propriétés de filtration et application au
traitement de l'eau**

M. J. Yao^{a,b}, P. Dutournié^a, P. A. Ahoussou^b, T. J. Daou^a

^a *Université de Haute-Alsace, CNRS, Institut de Science des Matériaux de Mulhouse (IS2M), UMR 7361, F-68093 Mulhouse, France*

^b *Université Félix Houphouët Boigny, UFR-SSMT, Laboratoire de Chimie-Physique, 22 BP 582 Abidjan 22, Côte d'Ivoire*

Les procédés de filtration membranaire sont des technologies innovantes et efficaces de séparation de plus en plus utilisés dans nos industries. En effet, cette technologie consomme peu d'énergie, ne nécessite pas de traitement chimique et est très facile à mettre en œuvre. Elle a beaucoup d'applications telles que le dessalement d'eau de mer, l'épuration de solutés spécifiques et le traitement d'effluents aqueux, la purification de molécules à haute valeur ajoutée, l'ultrafiltration du lait, ... Un des enjeux actuels est le développement de matériaux membranaires spécifiques alliant plusieurs propriétés et fonctionnalités. Dans cette optique, les membranes zéolithiques sont des candidates prometteuses pour la filtration de solutions aqueuses, du fait de leurs petites tailles de pores, leur composition chimique et leur stabilité thermique. Les membranes céramiques sont dans l'industrie principalement utilisées sous forme tubulaire afin de limiter le volume du système. Cependant, cette géométrie ne permet pas de caractériser la surface de la couche filtrante de manière non destructive. Nous avons donc élaboré des films mono et bicouche de zéolithe ZSM-5 de type structural MFI sur des substrats macroporeux plans en alumine alpha. Les films sont formés expérimentalement en utilisant un procédé de synthèse en 3 étapes ^[1]. Ce procédé nous a permis d'obtenir une couche de zéolithe continue, dense et sans fissure d'une épaisseur de 14 μm (membrane monocouche) et 28 μm (membrane bicouche). De plus l'orientation du support lors du traitement hydrothermal a permis de mettre en contribution les ions Al^{3+} du substrat en alumine dans la formation de la charpente minérale de la zéolithe ZSM-5 formée et donc de réduire considérablement le ratio Si/Al de cette charpente minérale. Les membranes obtenues ont fait l'objet de nombreuses caractérisations physico-chimiques et structurales. La sélectivité et les performances de filtration de ces membranes ont été testées sur des solutions modèles.

^[1] T.J. Daou, N. Lauridant, G. Arnold, H. Nouali, J. Patarin, D. Faye, Chem. E. Journal., **234**, 66–73 (2013).

**THEME**

- Thème 1 : Elaboration et mise en forme de matériaux poreux
 Thème 2 : Applications des matériaux poreux
 Thème 3 : Modélisation et caractérisation de matériaux poreux

Etude de l'hydrophobicité des matériaux mésoporeux de type Al-FSM-16

Z. Talha^a, A. Bengueddach^a, C. Bachir^b, F. Villières^c, R. Hamacha^a

^a *Laboratoire de Chimie des Matériaux L.C.M., Université d'Oran 1 Ahmed Ben Bella, Algérie*

^b *Laboratoire de Chimie Appliquée LAC, C.U. Aïn-Témouchent, , Algérie*

^c *Laboratoire Interdisciplinaire des Environnements Continentaux, UMR 7360 CNRS - Université de Lorraine, Nancy, France*

Les premiers travaux sur les solides mésoporeux organisés datent depuis 1990 avec les travaux de Yanagisawa et al, qui publient la synthèse de matériau FSM-16 (Folded-Sheet mesoporous Material). Ce matériau est préparé à partir de la kanémite comme source de silice, avec une synthèse basée sur l'intercalation de tensioactifs entre les feuillets de la kanémite. Bien que possédant une structure hexagonale comme la MCM-41, la FSM-16 présente un mécanisme de formation différent. Elle possède une stabilité hydrothermique plus importante que la famille des M41S à en raison de la présence des groupements silanols. Présentant peu de groupements silanols, la FSM-16 présente surtout des ponts siloxanes Si-O-Si qui ont un caractère hydrophobe.

Dans ce travail nous nous sommes intéressés à la fonctionnalisation de la FSM-16 par l'incorporation d'aluminium pour différents rapports SiO₂/Al₂O₃. Cette incorporation va conférer aux matériaux mésoporeux siliciques des propriétés très intéressantes sur le plan de catalyse.

L'objectif principal de cette étude est de voir l'effet de l'hydrophobicité sur la variation du rapport SiO₂/Al₂O₃ (50, 75, 100 et ∞) de ces matériaux mésoporeux de type Al-FSM-16. Ces matériaux ont été caractérisés par différentes techniques : DRX, adsorption d'azote à 77 K, Analyse chimique, MET, Zétamétrie et hydrophobicité par adsorption des vapeurs d'eau.

Les résultats obtenus montrent que l'hydrophobicité augmente avec l'augmentation de la teneur en aluminium qui est elle-même due à la diminution de la concentration des groupes silanols.



THEME

- Thème 1 : Elaboration et mise en forme de matériaux poreux
 Thème 2 : Applications des matériaux poreux
 Thème 3 : Modélisation et caractérisation de matériaux poreux

Ionothermal synthesis of silicoaluminophosphates

W. Fortas^{a,b}, M.A. Hasnaoui^a, A. Bengueddach^a

^a *Materials Chemistry Laboratory BP 1524 El Menouar 31000 university Oran 1 Ahmed Ben Bella Algeria*

^b *Centre of Scientific and Technical Analyses Physico-Chemical. BP 384, Bou-Ismaïl Industrial Zone Tipaza Algeria*

In this work, we report a novel method (ionothermal synthesis) for preparing molecular sieves developed by Morris and co-workers [1], which involves the use of ionic liquid as structural directing agent and solvent. We will present also the results concerning the characterization of SAPO-5, SAPO-11 and SAPO-34 phases obtained. The reaction conditions have been studied, namely the composition of the reaction gel, the aging time, the crystallization time and the temperature were examined.

The results revealed that the same structure-directing agent leads to different phases by passing from the hydrothermal medium to the ionothermal medium. Similarly the size of crystallites decreased considerably, using the unconventional medium.

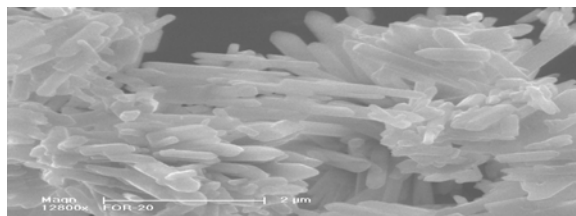


Fig. 1. SEM image of a sample obtained by ionic liquid system

	Al ₂ O ₃	P ₂ O ₅	IL	HF	SiO ₂	H ₂ O
FOR-190	1	1	10	1	1	10
FOR-200	1	1	20	1	1	10
FOR-140	1	1	40	1	1	10

Table 1. Molar composition of samples prepared with ionic liquid

[1] Musa M, Dawson D M, Sharon E, Ashbrook E, Morris E R. Ionothermal synthesis and characterization of CoAPO-34 molecular sieve. *J Microporous and Mesoporous Materials*. 239, 336-341 (2017).



THEME

- Thème 1 : Elaboration et mise en forme de matériaux poreux
 Thème 2 : Applications des matériaux poreux
 Thème 3 : Modélisation et caractérisation de matériaux poreux

Recovery of cadmium by MCM-41 silica impregnated with organophosphorus acids

K. Mersellem,^a **D. Bouazza,**^{b,*} H. Miloudi,^b P. Maireles Torres,^c A. Tayeb^a

^a LSOA, Univ. Oran1 – B.P 1524 El M'naouer Oran, Algeria

^b LCM, Univ. Oran1 – B.P 1524 El M'naouer Oran, Algeria

^c Department of Inorganic Chemistry, Crystallography and Mineralogy, Univ. Malaga – 29071 Cerventes Malaga, Spain

*bouaza_dj@yahoo.fr

MCM-41 is among the most support used in solid-liquid extraction for organic and inorganic pollutants during these recent years. The aim of our work is to impregnate the mesoporous silica (MCM-41) by two isomeric organophosphorus acids: Cyanex 272 (bis (2, 4, 4-trimethylpentyl) phosphinic acid) and the DIOPA (diisooctyl phosphinic acid) for the extraction of cadmium. The prepared solids were characterized with several analysis techniques: X-ray diffraction, Thermogravimetric analysis, Fourier Transformed Infrared (FTIR) and N₂-sorption at 77 K. The effect of pH, equilibrium time and kinetic on cadmium extraction was carried out. The equilibrium pH of cadmium extraction was 6 for the both solids under the same conditions.



THEME

- Thème 1 : Elaboration et mise en forme de matériaux poreux
 Thème 2 : Applications des matériaux poreux
 Thème 3 : Modélisation et caractérisation de matériaux poreux

Synthèse et caractérisation de composites TiO₂ – SiO₂ pour des applications en (photo)catalyse

B. Lebeau,^a L. Michelin,^a M. Bonne,^a I. Naboulsi,^b J.-L. Blin,^b R. Dorin Andrei,^c V. Hulea,^c C. Linares,^d S. Brunet^d

^a*Institut de Science des Matériaux de Mulhouse (IS2M), CNRS-UHA UMR 7361, Mulhouse, France*

^b*Laboratoire Lorrain de Chimie Moléculaire (L2CM), , CNRS-UL UMR 7053, Vandoeuvre-lès-Nancy, France*

^c*Institut Charles Gerhardt Montpellier (ICGM), CNRS-UM-ENSCM UMR 5253, Montpellier, France*

^d*Institut de Chimie des Milieux et Matériaux de Poitiers (IC2MP), CNRS-UP UMR 7285, Poitiers, France*

Les oxydes de titane possèdent des caractéristiques intéressantes pour des applications en (photo)catalyse ou dans le domaine des nanotechnologies. Dans cette étude, des composites TiO₂– SiO₂ ont été préparés à différents taux de TiO₂ dans des matrices mésoporeuses siliciques de type SBA-15.

Dans une première étude, la photodégradation du méthyle orange en présence des composites a été étudiée. La caractérisation des composites par spectroscopies Infra Rouge et Raman, ainsi que la quantification d'anatase par diffraction de rayons X dans chaque échantillon ont été corrélées aux résultats obtenus par photocatalyse [1].

Les performances catalytiques des composites ont été testées pour des réactions d'oxydation de sulfures dans une seconde étude [2]. En effet, les composites de type TiO₂-SiO₂ sont des catalyseurs très étudiés dans ce domaine, due à la forte interaction des TiO₂ et SiO₂ qui se crée grâce aux ponts Ti-O-Si formés. La quantité de TiO₂ incorporée, la nature du solvant et l'influence de la température ont été étudiées lors de la sulfoxydation de composés de grande taille tels que le diphényle sulfure, le dibenzothiophène ...

L'influence des propriétés acido-basiques des composites a également été étudiée dans l'hydrodésulfuration du 4,6 diméthylidibenzothiophène. Les caractéristiques structurales et texturales des composites ainsi que la quantité de sites acides de Lewis et acides de Bronsted ont été corrélées aux résultats catalytiques.

[1] M. Besançon, L. Michelin, L. Josien, L. Vidal, K. Assaker, M. Bonne, B. Lebeau, J.L. Blin, *New J. Chem.* **40** 4386-4397 (2016).

[2] R. D. Andrei, N. Cambuzzi, M. Bonne, B. Lebeau, V. Hulea, *J. Porous Mater.*, DOI: 10.1007/s10934-018-0640-1

**THEME**

- Thème 1 : Elaboration et mise en forme de matériaux poreux
 Thème 2 : Applications des matériaux poreux
 Thème 3 : Modélisation et caractérisation de matériaux poreux

Nickel-alumina catalysts derived from metal-organic framework: a new approach towards high activity and stability in methane dry reforming

J. Reboul,^a L. Karam,^{a,b} P. Massiani,^a Ni. El Hassan^b

^a *Laboratoire de Réactivité de Surface, Sorbonne Université, Campus Pierre et Marie Curie, 4 Place Jussieu, 75005, Paris, France*

^b *Department of Chemical Engineering, Faculty of Engineering, University of Balamand, P.O. Box 33, Amioun, El Koura, Lebanon*

Dry reforming of methane is a pivotal catalytic alternative for energy production overcoming fossil fuels depletion. This reaction uses CH₄ that is an essential element in natural gas and CO₂ a major component of greenhouse gases. However, the catalysts with most used and non-expensive active phase (Ni) still encounter major drawbacks (sintering and carbon deposition).[1]

In this contribution, an Al-containing MIL-53 metal-organic framework with very high surface area was used as sacrificial template to prepare a nickel-alumina-based catalyst particularly active and stable in the reaction of dry reforming of methane (DRM). The impregnation of the activated (solvent free) MIL-53 sample with a nickel precursor solution followed by the calcination of the material to remove the organic linkers and a subsequent reduction form the reduced nickel active phase. The calcined material is a highly porous spinel phase with Ni nanospecies embedded in the alumina-based matrix, as deduced from XRD, TPR and TEM analyses. Reduction step leads to a porous lamellar γ -Al₂O₃ material with small Ni⁰ nanoparticles homogeneously dispersed and stabilized within the support (Figure 1). The performances of this catalyst in DRM are remarkably better than those of two reference Ni@alumina catalysts prepared by conventional nickel impregnation of two preformed alumina supports.

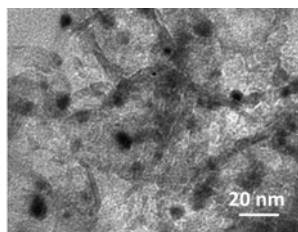


Fig. 1. TEM image of the Ni@ γ -Al₂O₃ MOF-derived catalyst

[1] Jang, W. J.; Shim, J. O.; Kim, H. M.; Roh, H. S. *Catal. Today* 0-1 (2018).

**THEME**

- Thème 1 : Elaboration et mise en forme de matériaux poreux
 Thème 2 : Applications des matériaux poreux
 Thème 3 : Modélisation et caractérisation de matériaux poreux

Elaboration de matériaux zéolithiques pour la décontamination moléculaire en orbite

M. Diboune,^{a,b,c} G. Rioland,^c H. Nouali,^{a,b} D. Faye,^c J. Patarin,^{a,b,d} T.J. Daou^{a,b}

^a *Institut de Science des Matériaux de Mulhouse (IS2M), Axe Matériaux à Porosité Contrôlée (MPC), UMR 7361 CNRS, Université de Haute-Alsace (UHA), 3 bis rue Alfred Werner, 68093 Mulhouse Cedex, France*

^b *Université de Strasbourg, France*

^c *Centre National d'Etudes Spatiales (CNES), 31401 Toulouse*

^d *Zéphir Alsace, 68200 Mulhouse*

L'exigence quant au maintien des performances des instruments embarqués à bord des satellites s'est accrue au cours des dernières décennies notamment en raison des risques de contamination moléculaire. En effet, en orbite, certaines molécules organiques provenant du dégazage sous vide des matériaux constitutifs du satellite viennent se déposer sur les surfaces sensibles (équipements optiques et électroniques, détecteurs, surfaces de contrôle thermique) entraînant ainsi une baisse de leurs performances. Parmi les matériaux poreux testés pour l'adsorption de ces polluants organiques, les zéolithes s'avèrent être les plus efficaces de par leur capacité à piéger ces molécules présentes à de très faibles concentrations dans les conditions spatiales [1-3]. Par contre, la synthèse de ces zéolithes conduit généralement à des poudres qui seraient elles-mêmes source de contamination particulaire. C'est pourquoi une mise en forme de ces zéolithes est nécessaire.

Dans le cadre de ce projet, deux mises en forme du matériau zéolithique ont été sélectionnées : les pastilles et les billes. Afin d'améliorer leurs propriétés mécaniques, deux types de liants (organiques et inorganiques) ont été utilisés dans la formulation à hauteur de 5 % en masse. L'ajout d'un liant a permis d'augmenter la tenue mécanique de ces objets zéolithiques sans pour autant altérer leurs propriétés d'adsorption [4-7]. L'une des pastilles zéolithiques a été utilisée pour le piégeage de ces polluants organiques afin de réduire la contamination moléculaire de l'instrument ChemCam du rover Curiosity envoyé sur Mars.

[1] H. Kirsch-Rodeschini, *Thèse*, Université de Haute-Alsace (2006)

[2] A. Jakob, *Thèse*, Université de Haute-Alsace (2009)

[3] N. Lauridant, *Thèse*, Université de Haute-Alsace (2012)

[4] G. Rioland, *Thèse*, Université de Haute-Alsace (2016)

[5] G. Rioland, L. Bullot, T. J. Daou, A. Simon-Masseron, G. Chaplais, D. Faye, E. Fiani, J. Patarin, *RSC Adv.* **6**, 2470-2478 (2016)

[6] G. Rioland, T. J. Daou, D. Faye, J. Patarin, *Microporous Mesoporous Mater.* **221**, 167-174 (2016)

[7] G. Rioland, H. Nouali, T. J. Daou, D. Faye, J. Patarin, *Adsorption* **23**, 395-403 (2017)

**THEME**

- Thème 1 : Elaboration et mise en forme de matériaux poreux
 Thème 2 : Applications des matériaux poreux
 Thème 3 : Modélisation et caractérisation de matériaux poreux

Recristallisation de faujasite en milieu alcalin

**R. Benabdallah Benarmas,^{a,b} T. Cacciaguerra,^c
A. Bengueddach,^b C. Gérardin,^c F. Di Renzo^c**

^a *Faculté de Chimie, USTO, Oran, Algérie*

^b *Laboratoire de Chimie des Matériaux, Université Oran 1, Oran, Algérie*

^c *Institut Charles Gerhardt, UMR 5253 CNRS-UM-ENSCM, Montpellier, France*

Depuis plusieurs années, des traitements de dissolution-recristallisation par solutions alcalines sont utilisés pour améliorer l'accessibilité de faujasites désaluminées.^{1,2} La formation d'une porosité hiérarchique a lieu par extraction de silice et réarrangement in-situ des tétraèdres AlO_4 et SiO_4 restants, avec formation d'une zéolithe à composition plus silicique. Les limites de stabilité de formation de la faujasite entraînent deux effets qui modifient profondément les résultats du processus : 1) dans le cas de dépassement des conditions de recristallisation, la formation de matériaux amorphes à composition variable, autour de la mésoporosité pre-existante ou dans l'ensemble du matériau ; 2) une perte de silice importante, qui peut diminuer le rendement en matière du traitement jusqu'à une masse finale du 15% de la masse initiale. La sévérité du traitement conditionne de façon déterminante le résultat obtenu. L'utilisation de cations organiques, moins agressifs que les alcalins vis-à-vis de la partie siliceuse du matériau, a été souvent utilisée pour augmenter le rendement du processus. La distribution de taille de la mésoporosité obtenue a été contrôlée par l'utilisation de cations ammoniums à longue chaîne. Dans ce cas, le matériau obtenu est le résultat de la formation d'un matériau mésoporeux ordonné, structuré en milieu micellaire. Dans cette communication, l'action de solutions alcalines sur des faujasites de rapport Si/Al de 1.5 à 21 a été étudié, l'éventuelle mésoporosité initiale étant le résultat de procédés préalables de désalumination. Dans le domaine entre les compositions de la zéolithe X et de la zéolithe Y, un changement continu de rapport Si/Al dans la zéolithe a été observé, sans formation de mésoporosité. Dans les matériaux plus siliciques, à mésoporosité plus importante, les traitements ont entraîné, en une échelle croissante de sévérité, (a) la dissolution partielle de la zéolithe initiale, avec formation de faujasite plus aluminique ; (b) la formation de matériaux amorphes, à composition variable avec la sévérité du traitement ; (c) la formation de phase zéolithiques différentes de la faujasite, avec une perte importante de matériau siliceux.

[1] K.P. de Jong, J. Zecevic, H. Friedrich, P. E. de Jongh, M. Bulut, S. van Donk, R. Kenmogne, A. Finiels, V. Hulea, F. Fajula, *Angew. Chem. Int. Ed.* **49**, 10074-10078 (2010)

[2] M. Manko, R. Chal, P. Trens, D. Minoux, C. Gérardin, W. Makowski, *Microporous Mesoporous Mat.* **170**, 243-250 (2013)

POSTERS

THEME 2



THEME

- Thème 1 : Elaboration et mise en forme de matériaux poreux
 Thème 2 : Applications des matériaux poreux
 Thème 3 : Modélisation et caractérisation de matériaux poreux

Alcohol dehydrogenation catalyzed by a defective zirconium-based metal-organic framework

P. Gairola, F. Launay, P. Massiani, C. Jolival, J.-M. Krafft, Y. Millot, **J. Reboul**

Laboratoire de Réactivité de Surface, Sorbonne Université-CNRS, Paris, France

Oxidation of alcohols is a critical step for the transformation of biomass-derived molecules. Such reactions are associated with the use of relatively expensive and toxic redox active transition metals, which commonly requires temperatures above the ambient and generate significant amounts of wastes. An alternative to the above mentioned issues is the use of new porous heterogeneous catalysts that are able to work efficiently into polar medium and under mild temperature. Herein, we report the use of a defective zirconium-based Metal-Organic Framework (MOF), UiO-66, as a new heterogeneous catalytic system devoted to alcohol oxidation under mild reaction conditions. Missing linkers in the structure of this material is the origin of the formation of defects in the form of under-coordinated zirconium sites at inorganic nodes. The Lewis acidity of these sites associated to a subtle balance of Brønsted acidity and basicity occurring nearby within the inorganic nodes was recently demonstrated to make UiO-66 active for acid-base catalysis [1]. We systematically varied the number of defects located both at the external surfaces of the crystals by modulating the size of the UiO-66 crystal (Fig1A and B) and within the bulk structure. This systematic modulation allowed us to optimize the catalytic activity of these MOFs for alcohol oxidation. A clear correlation was observed between activity and number of defects confirming the role of defects as active sites, and particularly that of defects located on the external surfaces of the crystals (Fig1C and D). An insight about the defect site evolution and the mechanism of the oxidation obtained by DRIFT and $^1\text{H}/^{13}\text{C}$ (CP) MAS NMR spectroscopy will also be discussed.

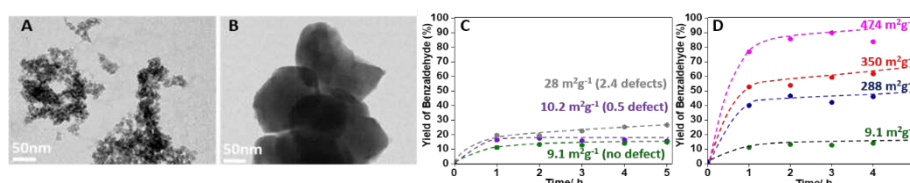


Figure 1. TEM images of (A) small and (B) large UiO-66 nanocrystals. Effect of (C) the number of defects in large particles and (D) external surface area on yields of benzaldehyde as a function of time for the oxidation of benzyl alcohol in the presence of TBHP.

[1] J. Hajek, B. Bueken, M. Waroquier *et al.* *ChemCatChem* **9**, 2203 (2017) .

**THEME**

- Thème 1 : Elaboration et mise en forme de matériaux poreux
 Thème 2 : Applications des matériaux poreux
 Thème 3 : Modélisation et caractérisation de matériaux poreux

Adsorption de colorants sur des matériaux poreux

H. Miloudi, D. Bouazza, A. Tayeb

*Laboratoire de chimie des matériaux, Université Oran 1 Ahmed Benbella, BP 1524,
El M'Naouer Oran-Algérie*

Les problèmes liés à la pollution sont aujourd'hui la préoccupation majeure de toute la planète et particulièrement les pays en pleine expansion industrielle. Il faut donc trouver des solutions pour préserver et contrôler notre environnement et notre santé.

C'est dans ce sens que nous nous sommes intéressés à l'élimination de colorants contenus dans des solutions aqueuses par le procédé de l'adsorption sur des matériaux poreux. Les matériaux choisis sont les silices mésoporeuses et les hydroxydes doubles lamellaires qui ont été synthétisés et caractérisés par différentes techniques physico-chimiques (DRX, Adsorption d'azote, FTIR, ATD-TG, MEB et MET). Ces matériaux ont été appliqués à la récupération de colorants anioniques et cationiques séparément: carmin d'indigo et le bleu de méthylène. Les paramètres étudiés sont : le pH de la phase aqueuse, le temps, la capacité d'adsorption et la température. L'étude cinétique a été également étudiée. Les résultats sont prometteurs.

Mots clés : Matériaux poreux, adsorption, carmin d'indigo, bleu de méthylène.

Références

1. D. Bouazza, A. Boos, A. Tayeb, A. Bengueddach, J. Mater. Environ. Sci. **5**, 2499 (2014).
2. D. Bouazza, H. Miloudi, M. Sassi, A. Boos, G. Goetz, A. Tayeb, A. Bengueddach, J. Phy. Chem. Sol. **67**, 1032 (2006).
3. H. Miloudi, A. Tayeb, A. Boos, Z. Mehyou, G. Goetz-Grandmont, A. Bengueddach, Arab. J. Chem. **10**, 1731 (2017).
4. H. Lessehal-Miloudi, A. Tayeb, A. Boos, G. Goetz-Grandmont, A. Bengueddach, J. Mater. Environ. Sci. **5**, 2590 (2014).
5. D. Bouazza, H. Miloudi, M. Adjdir, A. Tayeb, A. Boos, App. Clay Sci. **151**, 118 (2018).



THEME

- Thème 1 : Elaboration et mise en forme de matériaux poreux
- Thème 2 : Applications des matériaux poreux
- Thème 3 : Modélisation et caractérisation de matériaux poreux

Metal Nanoparticles@Metal-Organic Frameworks hybrid materials for sensing and catalysis

S. Dai, A. Tissot, C. Serre

Institut des Matériaux Poreux de Paris, FRE 2000 CNRS, Ecole Normale Supérieure, Ecole Supérieure de Physique et de Chimie Industrielles de Paris, PSL Research Université, 75005 Paris, France

Metal-organic frameworks (MOFs) are the porous crystalline materials, which are assembled from metal ions and organic linker. Since it appeared, it has been attracting a lot of attention from all over the world. However, since the harsh synthetic condition (high temperature, high pressure, highly-toxic solvents) of Zr-MOFs that were intensively used, many applications could be vastly limited. In this case, I mainly focus on the facile and green new approach to synthesize Zr-based MOFs and its derivatives at room temperature. A series of active guest complex has been tried to incorporate into MOFs afterwards, including Noble metal nanoparticles and fluorescent complex, which will be potentially used in and vapor-phase /membrane sensing and also as the catalysis materials. [1] [2]

Références:

[1] Lu, Guang, et al. *Nature chemistry* 4.4 (2012): 310.

[2] Bai, Yan, et al. *Chemical Society Reviews* 45.8 (2016): 2327-2367.

**THEME**

- Thème 1 : Elaboration et mise en forme de matériaux poreux
 Thème 2 : Applications des matériaux poreux
 Thème 3 : Modélisation et caractérisation de matériaux poreux

Synthesis of mesoporous-zeolite materials using Beta zeolite nanoparticles as precursors and their catalytic performance in m-xylene isomerization and disproportionation

F. Zohra Chaïda-Chenni,^a F. Belhadj,^b M. Soledad Grande Casas,^c C. Márquez-Álvarez,^c **R. Hamacha,**^a A. Bengueddach,^a J. Pérez-Pariente,^{c*}

^a *Laboratoire de Chimie des Matériaux, Université Oran1, BP 1524, El-Mnaouer, Algérie*

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

^c *Instituto de Catálisis y Petroleoquímica, ICP-CSIC, C/Marie Curie 2, 28049 Madrid, Spain*

Hierarchical β nanozeolites with the properties of both β nanozeolite and mesoporous material were prepared by two different methods: (1) Direct Hydrothermal Method (DHM) by the assembly of nanocrystals of preformed Beta seeds in the presence of the surfactant P123 under hydrothermal conditions, (2) Acidification of β seeds suspension. The obtained materials were characterized using different methods as : N_2 sorption measurements, thermogravimetric analysis (TGA), X-ray diffraction (XRD)..... The characterization results show that acidification of β seeds suspension leads to best structured nano-Beta (Beta nanoparticles). However, with the DHM method physical mixtures of β nanoparticles and mesoporous SBA-15 phases were obtained.

The m-xylene isomerization/disproportionation reaction in gas-phase shows was carried out over all the synthesized solids in order to explore their catalytic properties. It was found that the m-xylene conversion and isomerization/disproportionation ratio were closely related to the crystallization time of β zeolite precursors, mesopores creation in hierarchical β zeolite nanoparticles and the method used to produce the extra meso-porosity.

Keywords : Hierarchical β , β zeolite, β nanoparticles, micro-mesoporous materials, m-xylene isomerization.



THEME

- Thème 1 : Elaboration et mise en forme de matériaux poreux
- Thème 2 : Applications des matériaux poreux
- Thème 3 : Modélisation et caractérisation de matériaux poreux

The Use of Zeolites to Improve Potentiometric High Temperature NO_x Gas-Sensors

O. Schäf^a, L. Tortet^a, C. Marlot^b, C. Beaussac^b, M. Gantes^b

^a Aix-Marseille Université-CNRS UMR7246, Laboratoire MADIREL, Centre de St Jérôme, 13397 Marseille, France

^b Société SETNAG, Technopole de Château-Gombert, 22-26 rue Maynard-Keynes, 13013 Marseille, France

Although in use for more than 50 years, gas sensors are still under development. With respect to medical applications, gaseous NO in breath is a marker for some chronic diseases. Gas sensors for NO, however, should allow its detection down to very low concentrations (far less than 1 ppm). Despite all efforts until now, NO_x sensor sensitivities remain too low for this type of application. They could be improved by using special materials to better capture and detect the molecules of interest. The remarkable properties of zeolites from this point of view have already been tested in some potentiometric sensors [1] [2] [3], but progress is still required to reach their full potential.

Sensor elements with symmetric Pt-electrodes are produced by SETNAG, France, and modified using different zeolite structure types according to the set-up shown in Fig. 1:

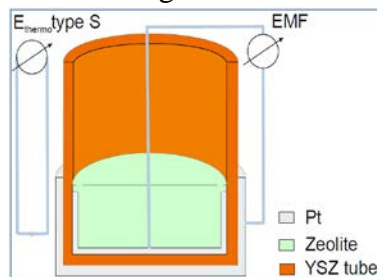


Fig. 1

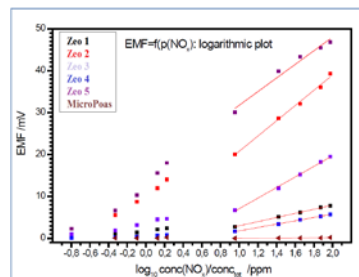


Fig. 2

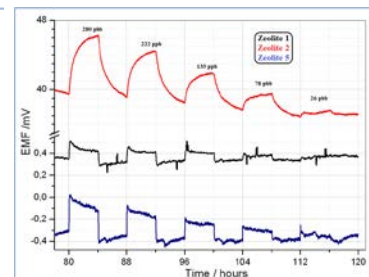


Fig. 3

The logarithmic plots of the results show that sensor responses vs. NO_x are linear in the “high “concentration range (Fig. 2). Selected zeolites were tested for NO_x measurement at very low concentrations (280 to 26 ppb) with promising results, even in presence of CO₂ (Fig. 3). The influence of water vapor still has to be tested.

[1] J. Fergus, Sensors and Actuators B: 121 (2007) 652–663.
 [2] Z. Zhang, J.D. Atkinson, B. Jiang, M.J. Rood, Z. Yan, Appl. Catalysis B: 163 (2015) 573–583.
 [3] S. P. Mondal, Prabir K. Dutta, G.W. Hunter, B.J. Ward, D. Laskowski, R.A. Dweik, Sensors and Actuators B : 158 (2011) 292– 298.



Fe/SBA-15 Nanoparticles for Phenol Degradation and OMWW Treatment

N. Raad,^{a,b} N. Tabaja,^a B. Koubaissy,^b T. Hamieh,^a J. Toufaily^b

^a *Laboratoire Matériaux, Catalyse, Environnement et Méthodes Analytiques (MCEMA), EDST, FS, Université Libanaise, Campus Hariri, Hadath, Beyrouth, Liban*

^b *Laboratoire des Etudes Appliquées au Développement Durable et Energie Renouvelable (LEADDER), EDST, Université Libanaise, Campus Hariri, Hadath, Beyrouth, Liban*

Ferrites semi-conductors were used as photocatalysts because of their activation in visible light. Two solids were obtained by double solvents technique for the impregnation of salt precursors containing the desired cations (Fe^{3+} , Ni^{2+} or Cr^{3+}) in mesoporous silica of SBA-15 type [1,2].

Phenol was used as test reaction to study the photocatalytic activity of the prepared photocatalysts. The phenol is chosen because it is the main toxic component in the olive mill wastewater (OMWW). The kinetic of the reaction were followed using spectrophotometric technique to determine the concentration of the remaining phenol in the reaction medium. The results shows a better activity in the case of chromium ferrite as photocatalyst (60% of degradation after 5 hours of reaction) using H_2O_2 as oxidant. No photocatalytic activity in the case of SBA-15 if it was used without any modification. Very low activity was observed in the case of nickel ferrite (less than 8% of degradation after 5 hours of reaction). The better photocatalyst, chromium ferrite, was used in the treatment of real OMWW. The photocatalyst used present a very important activity in presence of H_2O_2 as oxidant. The activity was proved from the important variation of the color of the OMWW real solutions from dark brown to clear yellow then by spectro-photometric technique. The absorption decrease indicates the photodegradation of phenol containing in the OMWW under reaction conditions.

References:

- [1] A. Sayari, B.-H. Han, and Y. Yang, "Simple Synthesis Route to Monodispersed SBA-15 Silica Rods," *J. Am. Chem. Soc.*, vol. 126, no. 44, pp. 14348–14349, Nov. 2004.
- [2] N. Tabaja, S. Casale, D. Brouri, A. Davidson, H. Obeid, J. Toufaily, T. Hamieh, "Quantum-dots containing Fe/SBA-15 silica as 'green' catalysts for the selective photocatalytic oxidation of alcohol (methanol, under visible light)," *Comptes Rendus Chim.*, vol. 18, no. 3, pp. 358–367, Mar. 2015.



THEME

- Thème 1 : Elaboration et mise en forme de matériaux poreux
 Thème 2 : Applications des matériaux poreux
 Thème 3 : Modélisation et caractérisation de matériaux poreux

Effet du Catalyseur mésoporeux sur la synthèse de Triazoles substitué par une chaîne grasse

F.Z. Abdelhadi,^a Z. Talha,^b N. Kambouche,^a V. Rolland,^c R. Hamacha,^b S. Bellahouel-Benzine,^a

^a *Laboratoire de Synthèse Organique Appliquée (L.S.O.A.), Université Oran1, 1524 El Mnaouer Oran 31000, Algérie*

^b *Laboratoire de Chimie des Matériaux (L.C.M.), Université Oran1, 1524 El Mnaouer Oran 31000, Algérie*

^c *Laboratoire des Amino acides, Peptides et Protéines, Université de Montpellier, Place E. Bataillon 34095, cedex 5 Montpellier, France*

La synthèse des hétérocycles à base de 1, 2, 3-triazole a largement éveillé l'attention des chimistes et des biologistes, vu qu'ils présentent un large éventail d'activités biologiques assez puissantes, tel que l'activité antimicrobienne [1], antibactérienne [2], anti inflammatoire [3], antalgique [4], anti HIV [5], antioxydante [6], anti allergique [7], anti cancéreuse[8].

La synthèse de dérivés de 1,2,3-triazole est développée en présence de catalyseurs mésoporeux tels que MCM-41 et FSM-16, qui présentent l'avantage d'être non toxiques, non corrosifs, sans pollution de l'environnement et faciles à séparer du milieu réactionnel.

Une étude complète a été réalisée pour mettre au point les conditions de réaction de la cycloaddition dipolaire-1,3 entre aryles azides et alcynes. Les molécules synthétisées ont été analysées par chromatographie en phase liquide à haute performance (HPLC), infrarouge, par chromatographie en phase liquide couplée à la masse (LCMS) et par RMN ¹H et ¹³C.

References

1. Mr. Genin, D. Allwin, J. Med. Chem., 953 (2000) 43.
2. W. Gergory, D. Britelli, J. Med. Chem., 1673 (1989) 32
3. H. S. Dong, K. Wei, joint synth., 81 (2000) 31.
4. B. S. Holla, M. Mahalinga, Eur. J. Med. Chem, 1173 (2005) 40.
5. E. D. Clercq, Med.Res.Rev., 531 (2002) 22.
6. D. R. Buckle, C. Rockell, J. Med. Chem., 223 (1984) 27.
7. R. J. Bochis, J.C. Chabala, J. Med. Chem., 2843 (1991) 34.
8. P. Norris, D. Horton, Heterocycles, 2643 (1996) 43



THEME

- Thème 1 : Elaboration et mise en forme de matériaux poreux
- Thème 2 : Applications des matériaux poreux
- Thème 3 : Modélisation et caractérisation de matériaux poreux

Préparation et activité antibactérienne de matériaux kenyaite intercalés par des nanoparticules d'argent

Z.A. Medjhoua Kebir,^a A.Mokhtar,^a M. Adjdir,^b A. Bengueddach,^a **M. Sassi,**^a

^a *Laboratoire de Chimie des Matériaux, Faculté des sciences Exactes et Appliquées, Université Oran1, BP 1524 El-Menaouer -31000- Oran, Algérie*

^b *Institute of Functional Interfaces Section, Karlsruhe Institute of Technology (KIT), 76344 Eggenstein-Leopold shafen Karlsruhe, Germany*

Dans ce travail, un matériau de type kenyaite pur et bien cristallisé est synthétisé par méthode hydrothermale. Il est ensuite utilisé pour préparer des matériaux composites kenyaite-Ag par échange ionique avec des solutions aqueuses de nitrate d'argent. Tous les solides obtenus sont caractérisés par diffraction de rayons X (DRX), spectroscopie infrarouge FTIR, microscopie électronique à balayage (MEB), thermogravimétrie (TG), spectroscopie de rayons X à dispersion d'énergie (EDX), spectroscopie UV-Visible du solide et spectroscopie photoélectronique X (XPS). Toutes les méthodes d'analyse concourent pour montrer que la structure en feuillets de la kenyaite de départ est préservée après les réactions d'échange d'ions. Les analyses XPS montrent la présence dans l'espace interfoliaire des solides kenyaite-Ag de l'argent sous forme d'Ag⁺ et d'Ag⁰. L'analyse par spectroscopie UV-Visible du solide montre la présence de bande d'absorption entre 390 nm et 500 nm caractéristiques de nanoparticules d'argent (Ag-NPs).

Testés comme agents antibactériens contre les bactéries E. coli, les matériaux composites kenyaite-Ag présentent une activité antibactérienne relativement élevée. Celle-ci est due probablement à la présence de nanoparticules d'argent, Ag-NPs, situées sur la surface de la matrice kenyaite de ces matériaux composites..

**THEME**

- Thème 1 : Elaboration et mise en forme de matériaux poreux
 Thème 2 : Applications des matériaux poreux
 Thème 3 : Modélisation et caractérisation de matériaux poreux

Synthèse de biodiésel par estérification d'un acide gras sur un matériau mésoporeux de type Al-SBA-15

Z. Talha,^a **A. Bengueddach,**^a S. Bellahouel,^b C. Bachir,^c F. Villières,^d R. Hamacha,^a

^a *Laboratoire de Chimie des Matériaux L.C.M., Université d'Oran 1 Ahmed Ben Bella, Algérie.*

^b *Laboratoire de Synthèse Organique Appliquée, L.S.O.A., Université Oran1, Algérie.*

^c *Laboratoire de Chimie Appliquée LAC, C.U. Aïn-Témouchent, , Algérie.*

^d *Laboratoire Interdisciplinaire des Environnements Continentaux, UMR 7360 CNRS - Université de Lorraine, Nancy, France.*

Un des objectifs du développement durable est la protection de l'environnement. Actuellement la recherche pour le remplacement des énergies conventionnelles par des énergies renouvelables reste le problème majeur pour tous les pays. Parmi ces dernières les biocarburants suscitent beaucoup d'attention et donc d'intérêt depuis la première crise du pétrole dans les années 1970. Le biodiesel, est un des exemples de biocarburants destinés à remplacer les carburants classiques et réduire ainsi la pollution générée par l'utilisation du pétrole et ses dérivés [1,2].

Nous nous intéressons dans cette étude à la synthèse de biodiesel par réaction d'estérification des acides gras en utilisant les matériaux poreux eu égard aux propriétés qui les caractérisent comme catalyseurs verts, plus particulièrement les matériaux mésoporeux de type Al-SBA-15 pour le traitement des grosses molécules, ces matériaux ayant l'avantage de présenter des pores plus larges. La réaction a été effectuée sur le matériau protoné et pour différents rapports $\text{SiO}_2/\text{Al}_2\text{O}_3$ (50, 75, 100) en modifiant quelques paramètres tels que le temps, l'effet de la variation de la chaîne des acides gras et des alcools.

Les résultats trouvés montrent une bonne conversion de l'acide gras en biodiesel quelque soit le paramètre étudié. Le meilleur rendement obtenu est de 90% pour un rapport $\text{SiO}_2/\text{Al}_2\text{O}_3=50$.

[1] G.H. Huang, F. Chen, D. Wei, X.W. Zhang and G. Chen, Appl. Energy, **87**, 38, (2010).

[2] T.C.G. Kibbey, L. Chen, L.D. Do and D.A. Sabatini, Fuel, **116**, 432, (2014).



THEME

- Thème 1 : Elaboration et mise en forme de matériaux poreux
- Thème 2 : Applications des matériaux poreux
- Thème 3 : Modélisation et caractérisation de matériaux poreux

Fluorinated Ultra-microporous MOFs for Gas Separation Applications

K. Adil,^a A. Cadiou,^b Y. Belmabkhout,^a M. Eddaoudi,^a G. Maurin,^b

^a *KAUST University, Thuwal, Saudi Arabia*

^b *Institut Charles Gerhart Montpellier, UMR 5253 CNRS UM ENSCM, Université de Montpellier*

The development of new adsorbents for gas separation related applications is of prime importance mainly for those that are performed using high energy-demanding process such as cryogenic separation. Research groups in both academia and industry have developed remarkable porous materials that can address such challenges. Among all of them, Ultra-microporous MOFs are now well recognized to be good candidates for separating molecules with close physical properties. Practically, the choice of adsorbent is governed by the pore size/shape aperture size of the MOF or by the expected interactions between the framework and the molecules. Here, the talk will emphasize on how the implementation of fluorine chemistry is a powerful pathway for fabricating a new series of ultra-microporous MOF adsorbent that displays both the right structural size/shape features and appropriate functionality for targeting important and complicated separations such as carbon capture, H₂S removal, olefin/paraffin separation or gas/vapour dehydration.

**THEME**

- Thème 1 : Elaboration et mise en forme de matériaux poreux
 Thème 2 : Applications des matériaux poreux
 Thème 3 : Modélisation et caractérisation de matériaux poreux

Elimination de la Nicotine et de ses dérivés de l'eau de chicha à l'aide de Montmorillonite Activée (AM).

Z. Ibrahim,^{a,b} B. Koubaissy,^{b*} Y. Mohsen,^a T. Hamieh,^a T.J. Daou,^c H. Nouali,^c M.-L. Foddis,^d J. Toufaily,^{b*}

^a *Laboratoire Matériaux, Catalyse, Environnement et Méthodes Analytiques (MCEMA), EDST, FS, Université Libanaise, Campus Hariri, Hadath, Beyrouth, Liban*

^b *Laboratoire des Etudes Appliquées au Développement Durable et Energie Renouvelable (LEADDER), EDST, Université Libanaise, Campus Hariri, Hadath, Beyrouth, Liban*

^c *Université de Strasbourg, Université de Haute Alsace, Axe Matériaux à Porosité Contrôlée (MPC), Institut de Science des Matériaux de Mulhouse (IS2M), UMR CNRS 7361, ENSCMu, 3 bis rue Alfred Werner, 68093 Mulhouse Cedex, France*

^d *DICAAR-Dipartimento di Ingegneria Civile Ambientale e Architettura, Università de Cagliari, Italia*

Le tabagisme est connu par ses effets néfastes sur la santé et dans une moindre mesure par son coût économique et social qui se traduit par un appauvrissement des personnes. L'impact du tabac ne se réduit cependant pas à ces seules dimensions. En effet, le tabagisme endommage l'environnement et le tabac laisse une empreinte néfaste sur la planète. Également, il a un impact majeur sur la déforestation et la pollution [1].

La consommation de chicha se développe dans le monde entier et le nombre des bars à chicha se multiplie. La principale caractéristique des eaux usées de chicha est la teneur élevée en goudron et en nicotine et ses dérivés [2]. Ces polluants graves sont régulés dans les réglementations internationales.

Dans ce travail, l'adsorption de la Nicotine, de la Pyridine et du Naphtalène sur la Montmorillonite Activée (MA) a été étudiée en tant qu'une méthode possible pour éliminer ces polluants des solutions aqueuses et de l'eau de chicha.

L'affinité relative de ces polluants vis-à-vis de la Montmorillonite Activée dépend essentiellement du pH de la solution et des propriétés physicochimiques de ces polluants dans l'eau.

Nous avons mis en évidence que la capacité d'adsorption est fortement liée à la nature du soluté, à la taille de la molécule et également à sa solubilité dans l'eau.

L'effet des ions tels que les Ca^{2+} , Na^+ , CO_3^{2-} et Cl^- sur l'adsorption de la nicotine a également été examiné. Les isothermes ont été décrites par le modèle de Fowler-Guggenheim. Le mécanisme d'adsorption a également été étudié et nous avons montré que l'affinité relative est due au complexe donneur-accepteur d'électrons formés entre les espèces en solution et la surface de la Montmorillonite.

[1] W. Qamar, A. R. Al-Ghadeer and R. Ali, *Research Journal of Environmental Toxicology*, 9 (4) 2015.

[2] S. Saleem, S. German and W. Asif Qureshi, *Harmful effects of shisha: literature review*, *International Archives of Medicine*, 7 (16) 2014.



THEME

- Thème 1 : Elaboration et mise en forme de matériaux poreux
- Thème 2 : Applications des matériaux poreux
- Thème 3 : Modélisation et caractérisation de matériaux poreux

Photo-assisted SCR over highly dispersed silver sub-nanoparticles in zeolites under visible light

H. Issa Hamoud, **M. El-Roz***, F. Douma, M. Lafjah, V. Valtchev, M. Daturi

*Laboratoire Catalyse & Spectrochimie, ENSICAEN - Université de Caen - CNRS
6 Boulevard Maréchal Juin, 14050 Caen, France*

Selective Catalytic Reduction (SCR) with NH₃ is one of the most effective technologies to control the NO_x emissions. The development of active SCR catalyst at low temperature (< 200 °C), during the engine start-up, is the challenging area due to the presence of excess H₂O and SO₂. A photocatalyst is one of the promising candidates for the SCR process at low temperature. A serial of TiO₂ based photocatalysts have been studied for this reaction, but at low gas hourly space velocity (GHSV), which limits their use in diesel engine. Recently, we have successfully synthesized sub-nanometer silver clusters in FAU-type zeolite containing vanadate clusters (ZX-V) [1]. The high performance of these materials in the photocatalysis under visible light makes them very promising candidates for the photo-assisted SCR.

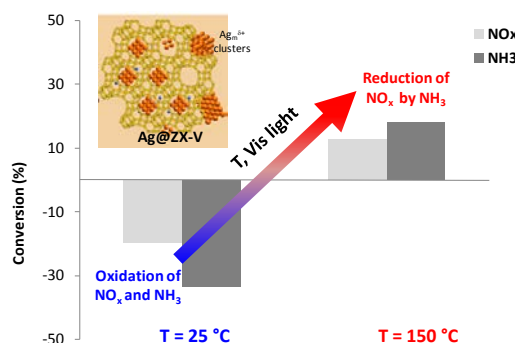


Figure 1. Performance of Ag@ZX-V for the photo-assisted SCR reaction at RT and T = 150 °C.

In this study, the photo-assisted SCR-NH₃ activities of ZX-V and Ag@ZX-V were investigated at RT and T = 150°C using *operando* FTIR spectroscopy. First, the catalysts were prepared and characterized using different techniques. The Ag@ZX-V catalyst exhibits a specific surface area of 369 m²/g. Silver was incorporated into the ZX-V structure as Ag_m^{δ+} nano-clusters with small particle size (< 1 nm). Such species promotes both NO and NH₃ oxidation at RT, while an improvement of the SCR activity (18 % of additional NO_x removal) was observed at 150 °C under visible light.

[1] M. El-Roz, I. Telegeiev, N. E. Mordvinova, O.I. Lebedev, N. Barrier, A. Behlil, M. Zaarour, L. Lakiss, V. Valtchev, *ACS Appl Mater Interfaces*. **10**(2018) 28702-28708.



Green Porous Solids (GPS) for the Production of Biodiesel from Waste Cooking Oil (WCO)

M. Rachini,^{a,b} A. Kassas,^a J. Awassa,^b T. Hamieh^a, J. Toufaily^b

^a Laboratoire Matériaux, Catalyse, Environnement et Méthodes Analytiques (MCEMA), EDST, FS, Université Libanaise, Campus Hariri, Hadath, Beyrouth, Liban

^b Laboratoire des Etudes Appliquées au Développement Durable et Energie Renouvelable (LEADDER), EDST, Université Libanaise, Campus Hariri, Hadath, Beyrouth, Liban

The use of heterogeneous catalysts in biodiesel production via transesterification using Waste Cooking Oil (WCO) as a raw material is attracting more attention in the last decay. Attempting to achieve highest transesterification reaction yield and to obtain pure fatty acid products, Montmorillonite K10, ZSM-5 and iron doped ZSM-5 catalysts were used in this study.

The effects of catalyst amount and reaction temperature were studied. Moreover, the use of solar energy was investigated on the performance of ZSM-5/Fe.

Promising results were obtained, starting with fatty acid product selectivity of the esterification of WCO with 3 wt% MMT K10 toward methyl palmitate (C16:0) and methyl oleate (C18:1). The yield in FAMES (C16:0) and (C18:1) is equal to 58% at optimum reaction conditions (60°C; methanol:oil ratio of 10:1; 3 h reaction time).

The low esterification reaction yield using ZSM-5 and its performance was increased slightly by the incorporation of Fe in the ZSM-5 increasing the esterification reaction yield from 12.39% to 13.15% and directs a similar selectivity of FAMES types as MMT K10.

Moreover, it was found that calcined ZSM-5/Fe is highly sensitive to solar energy and yields 80% biodiesel under optimal reaction conditions (5 wt% catalyst, methanol:oil ratio of 10:1, and a reaction time of 3 hours).

References:

- [1] M. k. Lam et al., "Homogeneous, Heterogenous and Enzymatic Catalysis for Transesterification of High Free Fatty Acid Oil (Waste Cooking Oil) to Biodiesel," *Biotechnology Advances*, vol. 28, pp. 500-518, 2010.
- [2] R. D. Saini, "Conversion of Waste Cooking Oil to Biodiesel," *International Journal of Petroleum Science and Technology*, vol. 11, pp. 9-21, 2017.
- [3] N.H. Said et al., "Review of the Production of Biodiesel from Wasey Cooking Oil Using Solid Catalysts," *Journal of Mechanical Engineering and Sciences (JMES)*, pp. 1302-1311, 2015.



Elaboration des Catalyseurs Pd-Cu/Nanotubes de Carbone pour la Réduction des Nitrates dans l'Eau

Z. Sleiman,^{a,b} M. Jaafar,^a F. Al-Ali,^b T. Hamieh,^a H. Nouali,^c T. J. Daou,^c J.

Toufaily,^b

^a *Laboratoire Matériaux, Catalyse, Environnement et Méthodes Analytiques (MCEMA), EDST, FS, Université Libanaise, Campus Hariri, Hadath, Beyrouth, Liban*

^b *Laboratoire des Etudes Appliquées au Développement Durable et Energie Renouvelable (LEADDER), EDST, Université Libanaise, Campus Hariri, Hadath, Beyrouth, Liban*

^c *Université de Strasbourg, Université de Haute Alsace, Axe Matériaux à Porosité Contrôlée (MPC), Institut de Science des Matériaux de Mulhouse (IS2M), UMR CNRS 7361, ENSCMu, 3 bis rue Alfred Werner, 68093 Mulhouse Cedex, France*

Depuis plusieurs années, les teneurs de l'eau en nitrate sont en élévation progressive avec le développement industriel, et surtout l'usage intensif de fertilisants azotés en agriculture. La réduction catalytique des nitrates représente une approche prometteuse. Parmi les supports reportés dans la littérature, on cite Al_2O_3 , TiO_2 , SiO_2 , ZrO_2 , SnO_2 et le charbon actif

Dans ce travail, la réduction des nitrates sous hydrogène sur des catalyseurs supportés à base de Pd-Cu a été étudiée. Plusieurs supports (nanotubes de carbone multicouches MWCNT, nanotubes de carbone MWCNT/Alumine nanohybride, charbon actif, oxyde de titane et alumine) ont été évalués. Les catalyseurs ont été déposés par co-imprégnation des supports dans des solutions de sels métalliques ($\text{Cu}(\text{NO}_3)_2$, PdCl_2) puis réduits par un agent réducteur (NaBH_4). Les nanotubes de carbone ont été préalablement purifiés et fonctionnalisés dans l'acide nitrique. L'objectif principal était d'étudier l'influence de la surface des supports sur la performance des catalyseurs préparés afin de sélectionner le système catalytique le plus prometteur pour la réduction des nitrates. Les résultats obtenus ont révélé que parmi les différents supports utilisés, MWCNT et le nanohybride MWCNT/Alumina ont l'activité catalytique la plus élevée malgré que le charbon actif présente la surface spécifique la plus élevée. Il a été observé que le support joue un rôle important dans la performance catalytique et dans certains cas il est impliqué dans le mécanisme réactionnel.

Catalyseur	C/C ₀ *100
Pd-Cu/FCNTs	1,2
Pd-Cu/MWCN- Al_2O_3	5,7
Pd-Cu/ TiO_2	11,3
Pd-Cu/ Al_2O_3	59
Pd-Cu/Charbon actif	57

Table 1. Conversion des nitrates après 2h de réaction (C: Concentration après 2h, C₀: Concentration initiale)

Références:

[1] Y. Yoshinga, T. Akita, I. Mikami, T. Okuhara, *J.Catal.* **207**, 37-45 (2002).

[2] L. Lemaigen, C. Tong, V. Begon, R. Burch, D. Chadwick, *Catal. Today* **75**, 43-48 (2002).

**THEME**

- Thème 1 : Elaboration et mise en forme de matériaux poreux
 Thème 2 : Applications des matériaux poreux
 Thème 3 : Modélisation et caractérisation de matériaux poreux

Capture et séparation du Xénon avec une zéolithe échangée à l'argent

A. Monpezat,^a A. Artheix,^a L. Delière,^a G. Couchaux,^a B. Coasne,^b D. Farrusseng,^c L. Roiban,^d S. Topin,^a

^a *Commissariat à l'Energie Atomique et aux Energies Alternatives (CEA), DAM, DIF, F-91297 Arpajon, France*

^b *LIPHY - Grenoble, UMR 5588 CNRS/UJF, F-38041 Grenoble, France*

^c *IRCELYON, UMR 5256 CNRS/UCBL1, 2 - Avenue Albert Einstein, F-69626 Villeurbanne, France*

^d *INSA Lyon, MATEIS, UMR 5510 CNRS/UCBL1, F-69626 Villeurbanne, France*

Dans le contexte du Traité d'Interdiction Complète des Essais nucléaires (TICE), la séparation et la concentration du xénon radioactif sont des étapes préalables mais indispensables à la mesure de ce produit de fission. Dans ce but, le CEA a développé le Système de Prélèvement Automatique en Ligne avec Analyse des radioXénon (SPALAX), et continue de l'améliorer. En effet, de manière à optimiser les besoins énergétiques et l'encombrement de ce système, les étapes de séparation et de purification doivent être optimisées. La zéolithe Ag@ZSM-5 développée en partenariat avec l'IRCELYON semble être un candidat idéal de par son site de forte interaction avec le xénon aux faibles pressions partielles. Cette zéolithe présente des capacités inégalées à la pression partielle du xénon dans l'air (87 ppb). Cependant ce matériau nécessite un piège spécifique en amont pour éviter sa désactivation en conditions procédés.

Différents matériaux ont été testés avec des isothermes d'adsorption et en conditions procédés, afin de développer un piège spécifique capable de retenir des traces de composés chlorés sans influencer sur l'adsorption du xénon.

La zéolithe Ag@ZSM-5 développée peut maintenant être utilisée dans différentes application comme la séparation du xénon dans l'air ou la séparation du xénon et du krypton dans le retraitement du combustible nucléaire, avec des sélectivités supérieures à 100.

References :

- [1] C. Daniel et al, *J. Phys. Chem. C* **117**, 15122–15129 (2013).
[2] L. Deliere et al, *J. Phys. Chem. C* **118**, 25032–25040 (2014)
[3] S. Topin et al, *J. Environ. Radioact.* **149**, 43-50 (2015)
[4] A. Monpezat et al, *soumise pour publication* (2018)

**THEME**

- Thème 1 : Elaboration et mise en forme de matériaux poreux
 Thème 2 : Applications des matériaux poreux
 Thème 3 : Modélisation et caractérisation de matériaux poreux

Matériaux adsorbants pour la désulfuration des fumées industrielles: synthèse et étude des performances en milieu gazeux complexes

M. Berger,^{a,b,c,d} **G. Guicheney,**^{a,b,c,d} H. Nouali,^{b,c} S. Dorge,^{a,c} D. Habermacher,^{a,c}
E. Fiani,^d M. Vierling,^e M. Molière,^f B. Lebeau,^{b,c} J.F. Brillhac,^{a,c} J. Patarin,^{b,c}

^a *Laboratoire Gestion des Risques et Environnement (GRE), Université de Haute-Alsace (UHA), 3 bis rue Alfred Werner, 68093 Mulhouse Cedex, France*

^b *Institut de Science des Matériaux de Mulhouse (IS2M), Axe Matériaux à Porosité Contrôlée (MPC), UMR 7361 CNRS, Université de Haute-Alsace (UHA), 3 bis rue Alfred Werner, 68093 Mulhouse Cedex, France*

^c *Université de Strasbourg, France*

^d *ADEME, 20 Avenue du Grésillé, BP 90406, 49004 Angers Cedex 01, France*

^e *GE Energy, 20 avenue du Maréchal Juin, 90007 Belfort Cedex, France*

^f *Laboratoire LERMPS, UTBM, Site de Sévenans, 90010 Belfort Cedex*

Les oxydes de soufre (SO₂, SO₃) sont des polluants atmosphériques majeurs dont les émissions sont strictement réglementées par les directives européennes. Actuellement différents procédés de désulfuration sont utilisés à l'échelle industrielle, fondés essentiellement sur l'injection de chaux par voie sèche ou aqueuse. Dans ce travail, nous proposons une autre alternative basée sur le captage réversible de SO₂ par un adsorbant régénérable de type silice mésoporeuse organisée SBA-15 fonctionnalisée avec de l'oxyde de cuivre. L'adsorbant CuO/SBA-15 obtenu [1] a été évalué en adsorption de SO₂ en fonctionnement multicycles (adsorption/régénération thermique sous atmosphère réductrice) et multigaz (CO, CO₂, NO et NO₂) représentatif des effluents rencontrés en sortie d'installations de combustion, dans des conditions opératoires de fonctionnement (température, VVH, ...) optimisées [2]. Cette étude a montré que les performances d'adsorption de SO₂ ne sont pas altérées par la présence de CO (180 ppm) et de CO₂ (4% en volume) et que la présence de NO (200 ppm) et de NO₂ (200 ppm) dans le flux de gaz d'adsorption, augmente les capacités d'adsorption de SO₂ de l'adsorbant CuO/SBA-15.

[1] P. Gaudin, L. Michelin, L. Josien, H. Nouali, S. Dorge, J-F. Brillhac, E. Fiani, M. Vierling, M. Molière, J. Patarin, *Fuel Processing Technology*, **148**, 1–11 (2016)

[2] M. Berger, S. Dorge, H. Nouali, D. Habermacher, E. Fiani, M. Vierling, M. Molière, J-F. Brillhac, J. Patarin, *Chemical Engineering Journal*, **350**, 729-738 (2018)



THEME

- Thème 1 : Elaboration et mise en forme de matériaux poreux
 Thème 2 : Applications des matériaux poreux
 Thème 3 : Modélisation et caractérisation de matériaux poreux

Adsorption des toxines urémiques sur des matériaux poreux

B. Koubaissy,^a Z. Ibrahim,^{a,b} J. Toufaily,^a T. Hamieh,^b

^a *Laboratoire des Etudes Appliquées au Développement Durable et Energie Renouvelable (LEADDER), EDST, Université Libanaise, Campus Hariri, Hadath, Beyrouth, Liban*

^b *Laboratoire Matériaux, Catalyse, Environnement et Méthodes Analytiques (MCEMA), EDST, FS, Université Libanaise, Campus Hariri, Hadath, Beyrouth, Liban*

L'objectif de cette étude, est l'application du procédé d'adsorption des toxines urémiques en solution physiologique sur des matériaux poreux.

Les matériaux poreux de dialyse doivent répondre à certaines caractéristiques : une grande surface spécifique, une stabilité et une sélectivité. Les matériaux microporeux inorganiques tels que les zéolithes ont été prouvés pour être des bons adsorbants pour les toxines urémiques [1,2].

L'étude des propriétés d'adsorption des toxines urémiques a été réalisée en milieu aqueux puis en milieu contenant des toxines liés à des protéines et de l'albumine.

Les résultats des essais d'adsorption de créatinine sur une zéolithe de type FAU, ont donné une capacité d'adsorption importante de l'ordre de 100 mg/g. Ensuite nous avons contrôlé l'adsorption des toxines urémiques à l'intérieur des zéolithes en tenant en compte les différents paramètres qui influent l'adsorption de ces molécules en solution aqueuses sur la zéolithe comme les concentrations, la température, le temps de contact, masse de l'adsorbant, vitesse de l'agitation et le diamètre des particules. Les résultats obtenus sont très prometteurs.

De plus nous avons montré que la présence des ions comme le phosphate et le potassium dans la solution a un effet négatif sur l'adsorption des toxines.

Enfin nous avons développé notre étude en direction du mécanisme d'adsorption, à la fois par une étude en spectroscopie infra rouge, ainsi que par une étude de la cinétique de désorption des différents composés.

[1] V. Wernert, O. Schaf, V. Faure, P. Brunet, L. Doub, Y. Berland, P. Boulet, B. Kuchta, R. Denoyel. *Journal of biotechnology*, pp. 164-173, 2006.

[2] B. Koubaissy, J. Toufaily, Z. Yaseen, T. J. Daou, S. Jradi, T. Hamieh. *Adsorption Science & Technology* pp 3-19, 2017.



THEME

- Thème 1 : Elaboration et mise en forme de matériaux poreux
 Thème 2 : Applications des matériaux poreux
 Thème 3 : Modélisation et caractérisation de matériaux poreux

Adsorption behaviors of cationic and anionic dyes from aqueous solution on composite polypyrrole/SBA-15

B. Boukoussa,^{a,b,*} A. Bengueddach,^b R. Hamacha,^b

^a *Département de Génie des Matériaux, Faculté de Chimie, Université des Sciences et de la Technologie Mohamed Boudiaf, El-Mnaouer, BP 1505, Oran, Algeria*

^b *Laboratoire de Chimie des Matériaux L.C.M, Université Oran1 Ahmed Ben Bella, El- Mnaouer, BP 1524, 31000 Oran, Algeria*

The present research focuses on the synthesis and the modification of mesoporous silica SBA-15 using in situ polymerization of pyrrole. The structural/textural and morphological features of adsorbents were investigated through X-ray diffraction, nitrogen sorption at 77 K, thermogravimetric analysis, Fourier transform infrared spectroscopy, zeta potential measurements and scanning electronic microscopy. Several composites containing different percentages of polypyrrole were tested for the adsorption of both anionic and cationic dyes. The effect of adsorbent nature, pH, contact time, adsorbent dose and initial dye concentration were investigated and discussed in terms of adsorption efficiency.

The adsorption efficiency of MO dye increased in the following sequence: SBA-15 < PPy/SBA-15(1%) < PPy/SBA-15(10%) < PPy/SBA-15(30%) < PPy/SBA-15(50%). The adsorption of MB dye is preferably carried out by parent material SBA-15 and nanocomposite PPy/SBA-15(1%). The experimental data were verified by the Langmuir and Freundlich isotherms, and the kinetic data were fitted by pseudo-first-order and pseudo-second-order models. The obtained results showed that the adsorption of the both dye by nanocomposite PPy/SBA-15 followed Langmuir adsorption isotherm models and pseudo-second-order kinetics. The adsorbed amounts recorded for MO and MB dyes are 41.66 and 58.82 mg/g, respectively.

**THEME**

- Thème 1 : Elaboration et mise en forme de matériaux poreux
 Thème 2 : Applications des matériaux poreux
 Thème 3 : Modélisation et caractérisation de matériaux poreux

Influence de la nature du sel sur le comportement et les performances énergétiques de la Silicalite-1 lors de l'intrusion-extrusion de solutions salines

A. Ryzhikov, H. Nouali, T.J. Daou, J Patarin

Axe Matériaux à Porosité Contrôlée (MPC), Institut de Science des Matériaux de Mulhouse (IS2M), UMR CNRS 7361, 3 bis rue Alfred Werner, F-68093 Mulhouse, France

L'intrusion-extrusion de solutions concentrées de sels de potassium dans la zéolithe purement silicique de type MFI (Silicalite-1) à haute pression a été étudiée pour des applications potentielles dans le stockage et l'absorption d'énergie mécanique. Cette étude montre que la nature du sel impacte drastiquement le comportement et les performances énergétiques des systèmes "Silicalite-1 – solutions aqueuses de K^+X^- ", où $X^- = I^-, NO_2^-, PO_4^{3-}, HPO_4^{2-}, HCOO^-$ et CH_3COO^- . Contrairement à l'eau et aux solutions salines diluées, où l'intrusion est réversible, l'intrusion de solutions saturées de KI, KHCOO, KCH_3COO , KNO_2 , K_3PO_4 et K_2HPO_4 est entièrement ou partiellement irréversible ce qui correspond à un comportement de type pare-choc ou à une combinaison des comportements de type pare-choc et ressort, respectivement. La variation de comportement peut être liée à l'affinité différente des anions envers les pores de la Silicalite-1. La pression d'intrusion augmente par rapport à celle du système "Silicalite-1 – eau" pour toutes les solutions salines. Cette hausse est particulièrement élevée pour les solutions ayant le plus faible rapport molaire H_2O/K^+ . La comparaison des résultats obtenus pour ces différents systèmes et ceux obtenus pour les solutions de sels de sodium [1] indique que la nature du cation a très peu d'impact sur les caractéristiques énergétiques de l'intrusion-extrusion de solutions salines dans la Silicalite-1.

Références:

- [1] A. Ryzhikov, H. Nouali, T. J. Daou, J. Patarin, *Phys. Chem. Chem. Phys.*, **20**, 6462 (2018).



THEME

- Thème 1 : Elaboration et mise en forme de matériaux poreux
 Thème 2 : Applications des matériaux poreux
 Thème 3 : Modélisation et caractérisation de matériaux poreux

Influence de la nature du cation de compensation sur les capacités d'adsorption d'eau des zéolithes aluminosiliciques de type FAU et LTA

Z. Tahraoui,^{a,b,c} H. Nouali,^{a,b} C. Marichal,^{a,b} P. Forler,^c T.J. Daou,^{a,b}

^a *Institut de Science des Matériaux de Mulhouse (IS2M), Axe Matériaux à Porosité Contrôlée (MPC), UMR 7361 CNRS, Université de Haute-Alsace (UHA), 3 bis rue Alfred Werner, 68093 Mulhouse Cedex, France*

^b *Université de Strasbourg, France*

^c *Aptar CSP Technologies, 68110 Niederbronn-Les Bains, France*

Dans l'industrie pharmaceutique [1], électronique et alimentaire le contrôle du taux d'humidité est un facteur très important. Pour répondre à cette problématique, les matériaux zéolithiques à caractère hydrophile peuvent être utilisés car ils permettent d'adsorber l'eau dès l'état de traces dans l'atmosphère environnant [2]. Effectivement, le rapport Si/Al de leur charpente ainsi que la nature du cation compensateur leur confèrent des propriétés d'adsorption de vapeur d'eau très intéressantes qui peuvent être améliorées par l'échange cationique de l'ion compensateur sodium qui se trouve habituellement dans la porosité après la synthèse par des cations bivalent ou monovalent de plus petites tailles [3].

Dans le cadre de ce projet, les deux zéolithes de type structural FAU et LTA les plus utilisées à l'échelle industrielle pour le piégeage d'eau ont été étudiées. Les cations sodium de ces zéolithes ont été échangés par des cations monovalents (lithium) ou bivalents (magnésium). Les caractérisations structurales par diffraction des rayons X et RMN du solide ont prouvé que les structures minérales ne sont pas altérées par l'échange. Leur caractérisation par physisorption de diazote ainsi que manométrie d'adsorption de vapeur d'eau ont permis de montrer, quel que soit le matériau échangé, une augmentation du volume microporeux et des capacités d'adsorption d'eau.

- [1] Agence nationale de sécurité du médicament et des produits de santé. 2017 [cited 2019 07/01/2019]
[2] Wang, Y. *et al.* J. Chem. Eng. Data. **54**(10) p. 2839-2844 (2009)
[3] Stach, H. *et al.* Adsorption. **11**(3) p. 393-404 (2005).

**THEME**

- Thème 1 : Elaboration et mise en forme de matériaux poreux
 Thème 2 : Applications des matériaux poreux
 Thème 3 : Modélisation et caractérisation de matériaux poreux

Etude du comportement de silicotitanates cristallins (CST) dopés au Nb vis-à-vis de la sorption du Sr²⁺ par échange d'ions

T. Milcent, A. Hertz, Y. Barre, A. Grandjean

CEA, DEN, D2ED, SEAD, LPSD, Marcoule, F-30207 Bagnols-sur-Céze, France

Le traitement d'effluents contaminés, notamment par du ⁹⁰Sr (produit de fission du ²³⁵U présentant une forte toxicité pour l'homme), est un enjeu important pour l'industrie nucléaire. La difficulté de mise en œuvre d'un traitement efficace et sélectif du Sr en solution est lié à la similarité de comportement des ions Sr²⁺ avec les ions Ca²⁺ souvent présents en grandes quantités dans les effluents réels complexes. Des adsorbants minéraux, de type échangeurs ioniques à structures 2D (ex. nonatitanate au Na) ou 3D (ex. zéolithe LTA au Na ; silicotitanates CST au Na) ont déjà été mis en œuvre dans ce but [1, 2]. En présence de Ca en forte concentration (>50ppm) seuls les CST (initialement développés pour le Cs) semblent présenter une certaine sélectivité pour le Sr. Or, les mécanismes de sorption par échange d'ions sur ces adsorbants ont largement été décrits pour la sorption du Cs [3] mais assez peu pour le Sr. Le rôle de la substitution d'une partie des atomes de Ti(IV) de la structure par des atomes de Nb(V), sur les propriétés de sorption de ces CST, mérite notamment d'être éclairci.

Pour cela, des CST contenant différents taux de Nb (de 0 % à 25 % molaire) ont été synthétisés. Leurs caractéristiques texturales, morphologiques et leurs compositions ont été comparées à celles d'un CST au Nb commercial. Afin de comprendre les mécanismes régissant la diffusion des ions dans ces matériaux, des profils cinétiques de sorption du Sr²⁺ ont été déterminés, l'influence des tailles de particules et des tailles de cristallites a été mise en évidence. Des mesures de coefficients de distribution (k_d) en milieux salins et peu salins modèles ont été réalisées pour mettre en exergue l'influence du Nb sur la sélectivité du CST pour le Sr

Afin de proposer un schéma mécanistique plus détaillé, des analyses poussées des structures des CST avant et après sorption du Sr²⁺ sont planifiées ainsi que la caractérisation des chaleurs de sorption par microcalorimétrie et l'étude des équilibres d'échanges ioniques par détermination des isothermes dans différents milieux.

[1] A. Merceille, Etude d'échangeurs d'ions minéraux pour la décontamination liquide en strontium, Thèse de doctorat, Université de Montpellier, 2012

[2] J-G Decaillon, Synthèse et étude d'échangeurs d'ions inorganiques en vue de la dépollution en césium et strontium d'effluents radioactifs, Thèse de doctorat, Université de Nantes, 2000.

[3] A J. Celestian, J D. Kubicki, J Hanson, A Clearfield, J B. Parise J. AM. CHEM. SOC, 130, 11689–11694 (2008).



P2-22

THEME

- Thème 1 : Elaboration et mise en forme de matériaux poreux
 Thème 2 : Applications des matériaux poreux
 Thème 3 : Modélisation et caractérisation de matériaux poreux

Oxidation of a cycloalkene using incorporated materials synthesized as a catalyst

A. Tabti,^{a,*} F. Djafri,^a F. Launay,^b I. Benchikh,^a

^a *Laboratory of Chemistry of Materials LCM, University of Oran 1 Ahmed Ben Bella, 31000, Algeria*

^b *Surface Reactivity Laboratory, Site Raphael, 3 street Galilee, 94200 Ivry-sur-Seine, Sorbonne University, UPMC-Paris 06, UMR 7197, France*

Many studies on the zeolite have been focused on MFI-type zeolites (Silicalite-1 and ZSM-5) [1]. This type of zeolites is typically synthesized by hydrothermal synthesis in batch systems from the synthesis gel [2, 3]. The aim of our study is to synthesize microporous materials that require the presence of organic structuring agents (amines, quaternary amines, alcohols....) like diethylamine (DEA), tetrapropylammonium hydroxide (TPAOH), tetrapropylammonium bromide (TPABr) and o-phenylenediamine ($C_6H_8N_2$ (o)) and p-phenylenediamine ($C_6H_8N_2$ (p)), these zeolite materials were prepared in the alkaline medium and the fluorinated medium, under well-defined conditions of temperature and crystallization time, and also the synthesis of the materials incorporated to the different transition metals (Ti, V, Co, Cr, Fe, Zn and Mn). The materials obtained were characterized using different techniques, X-ray diffraction, IR spectroscopy and UV-vis spectroscopy. This led us to obtain two types of materials:

- Materials with a high crystallinity when using DEA, TPAOH and TPABr as organic structuring, that confirms the MFI structure.
- Materials with amorphous structure this is due to their low crystallinity when using ($C_6H_8N_2$ (o)) and ($C_6H_8N_2$ (p)) as organic structuring..

The oxidation of organic substrates represents one of the most important industrial chemical reactions [4], explaining the importance of the efforts invested in the research and development of new heterogeneous catalysts with the increase of activities and selectivities in these types of reactions. For the catalytic epoxidation of olefins, organic peroxides and hydrogen peroxide are used as single oxygen donors. Although organic peroxides are generally much more active than hydrogen peroxide. In our study, the catalytic tests have been done to valorize these materials by using them as catalysts, in oxidation reactions of organic molecules, in the presence of two oxidants, hydrogen peroxide and tert-butylhydroperoxide (H_2O_2 and TBHP). From the epoxidation reaction of the organic molecule, different products have been obtained with different catalytic yields depending on the catalysts used.

Acknowledgements

-Laboratory of Chemistry of Materials LCM, University of Oran 1 Ahmed Ben Bella, Algeria.

-Surface Reactivity Laboratory, Site Raphael, 3 street Galilee, 94200 Ivry-sur-Seine, Sorbonne University, UPMC-Paris 06, UMR 7197, France.

Reference

1. I.V.Rakic, V.Roc, V.Dondur, A.Auroux; *Catalysis Today*, **2005**, 110, 272-280.
2. H. H. Funke, M. G. Kovalchick, J. L. Falconer, and R. D. Noble, *Ind. Eng. Chem. Res.* **1996**, 35, 1575.
3. M. Lassinanti, F. Jareman, J. Hedlund, D. Creaser, and J. Sterte, *Catal. Today*, **2001**, 67, 109.
4. R.A. Sheldon, R. Ugo, *Aspects of Homogeneous Catalysis*, D. Reidel, Dordrecht, **1981**, 4, 3.

**THEME**

- Thème 1 : Elaboration et mise en forme de matériaux poreux
 Thème 2 : Applications des matériaux poreux
 Thème 3 : Modélisation et caractérisation de matériaux poreux

Intrusion-extrusion de solutions d'électrolytes à haute pression dans le zéosil de type structural STF

C. Isaac, A. Ryzhikov, H. Nouali, T.J. Daou, J.-L. Paillaud

^a *Université de Haute-Alsace, CNRS, Axe Matériaux à Porosité Contrôlée (MPC), IS2M UMR 7361, 3bis rue Alfred Werner, 68093 Mulhouse Cedex, France*

^b *Université de Strasbourg, France*

Les zéolithes purement siliciques (zéosils) à caractère hydrophobe présentent un grand intérêt pour les applications dans le domaine de l'absorption et du stockage d'énergie. Lors de l'intrusion-extrusion d'eau sous pression, les systèmes « zéosil - eau », selon la structure et le taux de défauts du zéosil, peuvent restituer, diffuser ou stocker l'énergie mécanique emmagasinée pendant l'intrusion et, ainsi, présenter un comportement ressort, amortisseur ou pare-chocs [1]. Récemment il a été montré que l'utilisation de solutions concentrées d'électrolytes permettait d'augmenter considérablement les performances énergétiques de ces systèmes [2,3].

Ce travail porte sur l'intrusion-extrusion de solutions salines aqueuses dans le zéosil de type structural **STF** (Mu-26) [4]. Ce zéosil possède une porosité monodimensionnelle dont l'ouverture des pores (canaux droits) est constituée par des cycles à 10 atomes de Si avec en plus des poches latérales ("side pockets"). L'influence de la concentration de sel sur le comportement et les performances énergétiques du système "Mu-26 – solution saline" a été étudiée. Les résultats sont comparés avec ceux obtenus pour les zéosils ayant des structures et porosités distinctes. L'influence de ces différences structurales sur les caractéristiques d'intrusion-extrusion est discutée.

Références:

- [1] L. Tzani, M. Trzpit, M. Souillard, J. Patarin, *J. Phys. Chem. C* **116**, 20389 (2012).
[2] L. Tzani, H. Nouali, T.J. Daou, M. Souillard, J. Patarin, *Mater. Lett.*, **115**, 229, (2014).
[3] I. Khay, H. Nouali, T.J. Daou, A. Ryzhikov, S. Rigolet, J. Patarin, *J. Phys. Chem. C*, **118**, 3935, (2014).
[4] J.-L. Paillaud, B. Harbuzaru, J. Patarin, *Microporous Mesoporous Mater.*, **105**, 89-100 (2007).

POSTERS

THEME 3

**THEME**

- Thème 1 : Elaboration et mise en forme de matériaux poreux
 Thème 2 : Applications des matériaux poreux
 Thème 3 : Modélisation et caractérisation de matériaux poreux

A DFT investigation of the adsorption of dibenzylsulfide in Cationic-Exchanged Y Faujasites

E.P. Hessou,^{a,b} M. Ponce-Vargas,^c J.-B. Mensah,^b F. Tielens,^d J.C. Santos,^e M. Badawi,^a

^a *Laboratoire de Physique et Chimie Théoriques, CNRS, Université de Lorraine – France. michael.badawi@univ-lorraine.fr*

^b *Laboratoire de Chimie Théorique et de Spectroscopie Moléculaire, Université d'Abomey-Calavi, Bénin*

^c *Institut de Chimie Moléculaire de Reims, Université de Reims Champagne-Ardenne*

^d *Vrije Universiteit Brussel, Pleinlaan 2, B-1050 Brussel, Belgium*

^e *Laboratorio de Corrosión, Universidad Andres Bello, Santiago, Chile*

Mineral insulating oil of transformers can contain a small amount of sulfur, depending on refining technique and on which specification the oil was intended to fulfill. In recent years, the insulation failures caused by corrosive sulfur in transformer oil has gained increasing attention [1-3]. DiBenzylDiSulfide (DBDS) is one of the main compounds causing copper sulfide formation [3-4]. To fundamentally solve the problem of corrosive sulfur in insulating oil, removal of the corrosive sulfide in the oil should be considered. Cation-exchanged zeolites are attractive for this application owing to their thermal stability, their facility to separate from the reaction products, their ability to be regenerated, their ability to include a large variety of cationic sites,

We propose here to undertake a theoretical screening using dispersion-corrected DFT [5] with the VASP package [6] of some monovalent cations which can be incorporated in the faujasite Y zeolite framework (Li^+ , Na^+ , K^+ , Cs^+ , Cu^+ and Ag^+). The adsorption properties of the cationic-exchanged Y zeolites towards four selected conformers of DBDS have been investigated in terms of interaction energies and regenerability of the sorbents through the evaluation of the S-S bond activation. The results obtained show that CuY offers the best adsorption efficiency.

References:

- [1] L.R. Lewand, Doble Eng. Company/NETA World. 1–4 (2004).
[2] R.A.V. Lakshmi, T.S.R. Murthy, *Int. J. Eng. Res.* **1**, 9 (2012)
[3] F. Scatiggio, V. Tumiatti, R. Maina, M. Tumiatti, M. Pompili, R. Bartnikas, *IEEE Trans. Power Delivery.* **23**, 508–509 (2008).
[4] V. Tumiatti, R. Maina, F. Scatiggio, M. Pompili, R. Bartnikas, *IEEE Int. Symp. Electr. Insul.* 400–402 (2006).
[5] E.P. Hessou, W.G. Kanhounon, D. Rocca, H. Monnier, C. Vallières, S. Lebègue, M. Badawi, *Theor. Chem. Acc.* **137**, 161 (2018).
[6] G. Kresse, J. Hafner, *Phys. Rev. B.* **47**, 558–561 (1993).

**THEME**

- Thème 1 : Elaboration et mise en forme de matériaux poreux
 Thème 2 : Applications des matériaux poreux
 Thème 3 : Modélisation et caractérisation de matériaux poreux

Importance de la polarisabilité et de l'encombrement stérique des molécules de PCDD/F sur leurs interactions avec des zéolithes dans un préleveur normalisé EN1948-1 en sortie d'incinérateur

O. Schäf,^a L. Tortet,^a A. Simon-Masseron,^b J. Patarin,^b
S. Defour,^c C. Coste,^d Y. Zerega,^a

^a Aix Marseille Université, CNRS, MADIREL - UMR7246, Centre de Saint Jérôme, 13397 Marseille Cedex 20 (13e arrdt), France

^b Université de Haute-Alsace, CNRS, IS2M, Axe Matériaux à Porosité Contrôlée (MPC), UMR 7361, F-68100 Mulhouse, France

^c CARSO-LSEHL, 4 Avenue Jean Moulin, 69200 Vénissieux, France

^d Suez RV France, Tour CB21, 92040 Paris La Défense, France

L'objectif général est la conception d'un dispositif de prélèvement et d'analyse en ligne pour la mesure de traces de dioxine dans les effluents d'usines d'incinération. Pour séparer les congénères toxiques de dioxine à de très faibles concentrations, nous comptons sur une adsorption spécifique dans les micropores et une désorption différenciée procurée par un ensemble de zéolithes de type FAU 13X Na échangées.

Dans ce travail, des zéolithes ont été exposées au flux d'émission d'un incinérateur dans un système de prélèvement normalisé EN 1948-1, en lieu et place du support traditionnel : la résine XAD-2. Ensuite, les différents supports (filtre, condensats, adsorbants et verrerie associée) ont été analysés selon la norme EN 1948-2 et 3, en mesurant les quantités de congénères toxiques de polychlorodibenzo-p-dioxines (PCDD) et polychlorodibenzo-furanes (PCDF). Les propriétés d'interaction des PCDD/F ont été extraites de travaux de simulation [1].

D'une part, les quantités de PCDD/F retrouvées dans les condensats montrent que le moment dipolaire ne joue pas un rôle prépondérant dans leur piégeage par l'eau préalablement adsorbée sur les parois en verre du condenseur, alors que la polarisabilité oui : plus sa valeur moyenne (ou moins son excentricité) est importante, plus les PCDD/F sont piégés par l'eau.

D'autre part, en testant deux zéolithes différentes soumises au même flux et par mesure des congénères ayant percés, il apparaît que le rendement d'adsorption est plus important avec (1) des billes de FAU NaX de taille 0,25-0,4 mm que de taille 0,5-0,8 mm, et (2) avec la FAU NaX qu'avec la *BEA-Na. La surface externe saturée en eau des zéolithes a le même comportement vis-à-vis des PCDD/F que l'eau à la surface du verre dans le condenseur. De plus, les PCDD/F possédant un encombrement stérique compatible avec la taille des micropores de la FAU NaX y sont adsorbés.

[1] C. Gu, X. Jiang, X. Ju, G. Yu, Y. Bian, *Chemosphere*, **67** 1325-1334 (2007).

**THEME**

- Thème 1 : Elaboration et mise en forme de matériaux poreux
 Thème 2 : Applications des matériaux poreux
 Thème 3 : Modélisation et caractérisation de matériaux poreux

Elucidation of Brønsted and Lewis sites influence on electron transfers in structured MFI-type zeolites

M. Hureau,^a T. Cremoux,^a I. Batonneau-Gener,^b A. Moissette,^a J.-L. Paillaud,^c E. Ligner,^c C. Gomes de Morais,^b S. Laforge,^b C. Marichal,^c H. Nouali,^c

^a *LASIR, Université de Lille, Villeneuve d'Ascq 59655, France*

^b *IC2MP, Université de Poitiers, Poitiers 86073, France*

^c *Université de Haute-Alsace, CNRS, IS2M UMR 7361, F-68100 Mulhouse, France*

Radical species can be generated spontaneously during the adsorption of organic molecules inside zeolite micropores. The nature of the sites responsible for the electron acceptor behaviour of zeolite remains still unclear, even if all contributors agree that aluminium plays an important role in the formation and stabilization of the radical cations. Nevertheless, the precise nature of the aluminic species involved is still subject of debate (Lewis, Brønsted, EFAL ...). The aim of this work is to study the impact of ZSM-5 zeolite hierarchization by various alkaline treatments on the radical species formed after t-stilbene adsorption.

The influence of the changes in porosity and structure has been studied on the charge transfers occurring after the spontaneous ionization of t-stilbene adsorbed in the zeolite channels (2). This study shows that desilication with and without acid washing does not modify the charge transfer mechanisms but considerably affects the stabilization of the separated charge states. In particular, the role of the acidic leaching appears essential since unwashed zeolites lead to much more stabilized separate charge states than washed samples. Indeed, the acid washing tends to inhibit the benefit of the treatment. However, the use of TPAOH seems to provide a stabilizing role if an acidic washing is carried out after the desilication. Through these experiments, it appears that the optimum BSLP ratio could correspond to an intermediate value for which the distance between two consecutive BSLP would allow the charges to be delocalized, avoiding the direct and rapid recombination of unpaired electrons. It should also be noted that desilication acts on the BSLP by modifying the distances but also by inserting defects between the pairs.

Références:

1. Ali, M. A.; Brisdon, B.; Thomas, W. J. *Appl. Catal. Gen.* 2003, 252 (1), 149–162.
2. M. Hureau, A. Moissette, H. Vezin, C. Brémard, M. Orio, *J. Phys. Chem. C*, 116 (2), 1812-1825 (2012).



THEME

- Thème 1 : Elaboration et mise en forme de matériaux poreux
 Thème 2 : Applications des matériaux poreux
 Thème 3 : Modélisation et caractérisation de matériaux poreux

Adsorption of toxic molecules in MOFs

J.A. Zárate Colín,^{a,b} P. Graziane Mileo,^a I.A. Ibarra^b

and G. Maurin,^a

^a *Institut Charles Gerhardt Montpellier, UMR-5253, Université de Montpellier, CNRS, ENSCM, Place E. Bataillon, 34095 Montpellier cedex 05, France*

^b *Laboratorio de Fisicoquímica y Reactividad de Superficies (LaFReS), Instituto de Investigaciones en Materiales, Universidad Nacional Autónoma de México, Circuito Exterior s/n, CU, Del. Coyoacán, 04510, Ciudad de México, México*

We recently evidenced that the Mg-CUK-1 [1] and MIL-53-TDC [2] MOFs are highly robust materials upon adsorption of the highly toxic H₂S molecule, demonstrating extremely high H₂S adsorption uptake and excellent sorption cycling. Molecular simulations based on adequate force fields to describe the adsorption of H₂S in the confined pores of this MOF revealed the microscopic origin of this high-level performance which was further validated by *In situ* DRIFT experiments. An extension of this work was to consider a series of other MOFs for the capture of another toxic molecule, i.e. SO₂ as single component or in mixture with CO₂.

[1] Elí Sánchez-González, Paulo G. M. Mileo, Mónica Sagastuy-Breña, J. Raziel Álvarez, Joseph E. Reynolds, III, Aline Villarreal, Aída Gutiérrez-Alejandre, Jorge Ramírez, Jorge Balmaseda, Eduardo González-Zamora, Guillaume Maurin, Simon M. Humphrey and Ilich A. Ibarra, *J. Mater. Chem. A*, **6**, 16900 (2018)

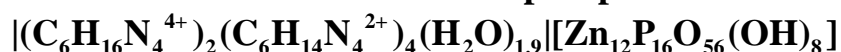
[2] J. Antonio Zárate Colín, Elí Sánchez-González, Tamara Juradi-Vázquez, Aída Gutiérrez-Alejandre, Eduardo González-Zamora, Ivan Castillo, Guillaume maurin and Ilich A. Ibarra, *chem commun* accepted.



THEME

- Thème 1 : Elaboration et mise en forme de matériaux poreux
- Thème 2 : Applications des matériaux poreux
- Thème 3 : Modélisation et caractérisation de matériaux poreux

Désordre structural dans un zincophosphate de formule



J.-L. Paillaud, C. Marichal, J. Patarin

^a Université de Haute-Alsace, CNRS, Axe Matériaux à Porosité Contrôlée (MPC), IS2M UMR 7361, 3bis rue Alfred Werner, 68093 Mulhouse Cedex, France

^b Université de Strasbourg, France

Parmi les cinq zincophosphates publiés par Wallau *et al.* en 1994, seule la structure de celui synthétisé à température ambiante avec l’hexaméthylènetétramine (HMT) comme agent structurant est restée non résolue [1]. Cependant, l’algorithme de renversement des charges appliqué aux intensités extraites du diffractogramme de poudre combinée à la méthode Rietveld, nous a permis de la résoudre très récemment. Ce zincophosphate à structure complexe cristallise dans le système quadratique (groupe d’espace $P\bar{4}b2$) [2]. Les cycles successifs de l’affinement Rietveld ont révélé que non seulement les atomes de zinc sont désordonnés sur plusieurs sites mais qu’une partie des molécules HMT le sont également. De plus, du fait de la protonation partielle d’une partie des molécules HMT prouvée par RMN du solide (^{15}N), des atomes de zinc se trouvent tétracoordinés à 3 atomes d’oxygène et un atome d’azote non protoné de molécules HMT (Fig. 1).

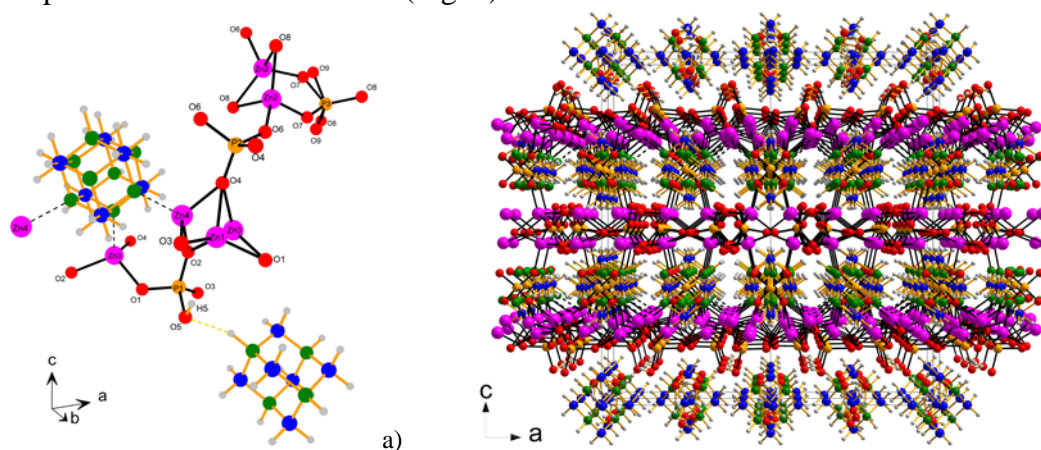


Fig. 1. Perspectives montrant a) l’unité asymétrique et le désordre dans le zincophosphate de formule par maille élémentaire $[(C_6H_{16}N_4^{4+})_2(C_6H_{14}N_4^{2+})_4(H_2O)_{1,9}][Zn_{12}P_{16}O_{56}(OH)_8]$ où $C_6H_{12}N_4 = HMT$ et b) vue globale de la structure lamellaire selon [010].

Références :

- [1] M. Wallau, J. Patarin, I. Widmer, P. Cautlet, J.-L. Guth, L. Huve, *Zeolites* **14**(6), 402-10 (1994).
- [2] J.-L. Paillaud, C. Marichal, J. Patarin, *Z. Anorg. Allg. Chem.*, en préparation (2019).



THEME

- Thème 1 : Elaboration et mise en forme de matériaux poreux
- Thème 2 : Applications des matériaux poreux
- Thème 3 : Modélisation et caractérisation de matériaux poreux

**Pore selectivity and electron transfers in HZSM-5 single crystals:
Raman mapping and confocal fluorescence imaging**

A. Moissette,^a M. Hureau,^b M. Moreau,^c G. Fleury,^d J.P. Cornard,^e M.B.J. Roeffaers,^f

^a LASIR, Bât. C5, FST, Université de Lille, 59655 Villeneuve d'Ascq cedex, France

^b Center for Surface Chemistry and Catalysis, KU Leuven, Belgium

Visualization of the electron transfers at the single particle level is essential to understand catalytic processes and optimize material performances. Porosity, crystalline defects, guest mobility can play a significant role in reactivity. By combining Raman microspectroscopy mapping and confocal fluorescence imaging, we investigate pore accessibility, guest diffusion and reactivity by characterizing electron transfers in coffin-shaped HZSM-5 single crystals after t-stilbene spontaneous ionization [1,2]. The spatial distribution of the molecules is found to be preferentially in the straight channels in the intergrowth of the crystal and at the extremities. The experiments provide evidence of both radical cation and subsequent charge transfer complexes. Using a set of excitation wavelengths, Raman spectra of different charge separated states (CSS) were identified by taking advantage of the resonance effect. The correct assignment of the species stabilized in the single crystal is confirmed by analysis of the reference CSS stabilized in powder samples. This assignment is also supported by the correlation of fluorescence emission images obtained for single crystals at different excitation wavelengths and the excitation-emission matrix (EEM) plots obtained for the powder reference samples (Figure 1).

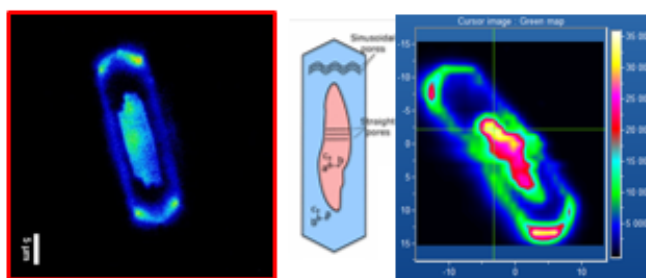


Figure 1. Confocal fluorescence imaging (left) and Raman mapping (right) characteristic of the charge separated states stabilized within HZSM-5 crystals lying on the [010].

Références

- [1] A.V. Kubarev, E. Breynaert, J. Van Loon, A. Layek, G. Fleury, S. Radhakrishnana, J. Martens, M.B.J. Roeffaers, *ACS Catal.* **7**, 4248 (2017).
- [2] M. Hureau, A. Moissette, H. Vezin, C. Brémard, M. Orio, *J. Phys. Chem. C*, **116**, 1812 (2012).

**THEME**

- Thème 1 : Elaboration et mise en forme de matériaux poreux
- Thème 2 : Applications des matériaux poreux
- Thème 3 : Modélisation et caractérisation de matériaux poreux

High-throughput Experiments and Adsorption Microcalorimetry to Characterize Pure MOFs and MOF/GO Composites for Carbon Capture Applications

D. Presle,^a **S. Bourrelly**,^a E. Bloch,^a P. Llewellyn,^a M. Muschi,^b S. Sene,^b C. Serre,^b J. Casaban,^c G. Maurin,^d

^a Aix-Marseille University & CNRS, MADIREL laboratory – UMR 7246 - France

^b CNRS ENS-ESPCI IMAP laboratory – Paris – France

^c MOF-Technologies Ltd. 18a Newforge Lane Belfast - Northern Ireland

^d Institut Charles Gerhardt Montpellier – CNRS & University Montpellier - France

One of the challenges today is the fight against global warming, to reduce the amount of greenhouse gas emissions to the atmosphere. This can be done by the capture of CO₂ from the industrial emissions. Technologies based on sorbent adsorption could be one interesting alternative for pre-combustion or post combustion processes and more specially by using Metal-Organic-Frameworks (MOF) as promising sorbents.

The key objective of GRAMOFON project is to develop a new energy and cost-competitive dry separation process for post-combustion CO₂ capture based on innovative hybrid porous solids Metal organic frameworks (MOFs) and Graphene Oxide nanostructures. At the same time, the CO₂ desorption process will be optimized by means of Microwave Swing Desorption (MSD) and Joule effect, that aims to surpass the efficiency of the conventional heating procedures.

Among the abundant number of MOF structures, it is sometimes difficult to find the best adsorbent for carbon capture applications. Therefore, in a first step at the laboratory scale, a high-throughput experimental approach can be used to scan the CO₂ adsorption performances. This allows a selection of the most promising materials for an in-depth investigation using adsorption microcalorimetry, in order to simultaneously measure the energies involved during the adsorption process. This experimental data can be nicely compared with molecular simulation such as Grand Canonical Monte Carlo simulation performed elsewhere in this project.

This work is currently being carried out within the EU Gramofon project (N°727619) “New process for efficient CO₂ capture by innovative adsorbents based on modified graphene aerogels and MOF materials.”

**THEME**

- Thème 1 : Elaboration et mise en forme de matériaux poreux
- Thème 2 : Applications des matériaux poreux
- Thème 3 : Modélisation et caractérisation de matériaux poreux

A combination between local and macroscopic methods to evaluate dyes sorption onto Faujasite

M. Assaf, G. Martin-Gassin, A. Galarneau, B. Prelot,

*ICGM UMR 5253 CNRS --Univ Montpellier--ENSCM, ENSCM 240 Avenue Pr E.
Jeanbrau, 34296 Montpellier Cedex 5, France*

The various stages of textile processing generate wastewater, thereby leading to a potentially disastrous contamination of drinking water. The sorption-based technology for the treatment of polluted streams usually combines an easy handling, fast operational readiness, low operational costs, low-level discharge generation ... The decontamination processes are often based on the use of materials with specific properties such as high adsorption efficiency, which the case of nanostructured materials such as clays, zeolites, functionalized silicas, ... The synthesis condition offer the possibility to modulate parameters such as the geometry, structure, porosity, size, surface charge (permanent or induced), the grafted organic group functionality...

In the present study, several dyes were chosen with various properties (size, charge, functional group....) to obtain sorption isotherms using faujasite as a zeolite reference material. The adsorption of these dyes was studied at natural pH and using depletion method and UV spectrophotometer as analytical tool. The adsorption capacity varies with the type of dyes (cationic, anionic or neutral dye) and with the properties of dye of the same type.

In addition to this macroscopic approach, Second Harmonic Generation (SHG) has been used as a local technique to evaluate the interaction at the FAU/dyes interface. Methyl orange (negative dye) and Basic Fuschin dye (positive dye) were put in contact with a faujasite. In this contribution, isotherm and polarisation resolved SHS measurements are given showing that cationic dyes interact strongly with the particles by entering to the pores whereas anionic dyes adsorb only on the external surface.

LISTE DES PARTICIPANTS

Nom	Prénom	E-mail
Adil	Karim	karim.adil@gmail.com
Assaf	Marwa	marwa.assaf@etu.umontpellier.fr
Badawi	Michael	michael.badawi@univ-lorraine.fr
Bats	Nicolas	nicolas.bats@matthey.com
Battini	Jean	jean.battini@micromeritics.com
Bellahouel-Benzine	Salima	salimabellahouel@yahoo.fr
Belmabkhout	Youssef	youssef.belmabkhout@kaust.edu.sa
Benabdallah Benarmas	Rachida	rachidaedr@yahoo.fr
Bengueddach	Abdelkader	abengueddach@gmail.com
Beucher	Remi	remi.beucher@enscm.fr
Beurroies	Isabelle	isabelle.beurroies@univ-amu.fr
Bingre	Rogéria	rpamaral@unistra.fr
Bonnin	Aurélien	aurelien.bonnin@univ-poitiers.fr
Bouazza	Djamila	bouaza_dj@yahoo.fr
Bouchy	Christophe	christophe.bouchy@ifpen.fr
Boukoussa	Bouhadjar	bbouhdjer@yahoo.fr
Bourrelly	Sandrine	sandrine.bourrelly@univ-amu.fr
Bloch	Emily	emily.bloch@univ-amu.fr
Brun	Nicolas	nicolas.brun@enscm.fr
Chatelard	Corentin	corentin.chatelard@ircelyon.univ-lyon1.fr
Coasne	Benoit	benoit.coasne@univ-grenoble-alpes.fr
Dai	Shan	shan.dai@ens.fr
Daou	Jean	jean.daou@uha.fr
Debost	Maxime	maxime.debost@ensicaen.fr
Denayer	Joeri	joeri.denayer@vub.be
De Weireld	Guy	guy.deweireld@umons.ac.be
Dez	Romuald	romuald.dez@micromeritics.com
Diboune	Mathieu	mathieu.diboune3@uha.fr
Djelad	Amel	Djelad_am@yahoo.fr
Dodin	Mathias	mathias.dodin@ifpen.fr
Duarte	Leonor	leonor.duarte-mendes-catita@ifpen.fr
Dubreuil	Anne-Claire	a-claire.dubreuil@ifpen.fr
Escamilla Pérez	Angel Manuel	angel.escamillaperez@cea.fr
Fialho Batista	Ana Teresa	ana-teresa.fialho-batista@ifp.fr
Forler	Patrice	patrice.forler@csptechnologies.fr
Galarneau	Anne	anne.galarneau@enscm.fr
Gilson	Jean-Pierre	gilson@ensicaen.fr
Goddard	Jean-Philippe	jean-philippe.goddard@uha.fr
Gossard	Alban	alban.gossard@cea.fr
Goupil	Jean-Michel	jean.m.goupil@gmail.com
Guichenev	Grégory	gregory.guichenev@hotmail.fr
Guillon	Emmanuelle	emmanuelle.guillon@ifpen.fr
Hamacha	Rachida	rachidahamacha@gmail.com
Hamieh	Tayssir	tayssir.hamieh@ul.edu.lb
Hertz	Audrey	audrey.hertz@cea.fr

Hibert	Marcel	mhibert@unistra.fr
Hureau	Matthieu	matthieu.hureau@univ-lille.fr
Ibrahim	Zeinab	zibrahim@ul.edu.lb
Isaac	Carole	carole.isaac@uha.fr
Komaty	Sarah	sarahkomaty1987@hotmail.com
Koubaisy	Bachar	backoub@hotmail.com
Le	Anh-Hoang	anh-hoang@live.fr
Le	Huu Nghia	huu-nghia.le@uha.fr
Lebeau	Bénédicte	benedicte.lebeau@uha.fr
Lorignon	Fabrice	lorignon@gmail.com
Louis	Benoit	blouis@unistra.fr
Marlot	Caroline	caroline.marlot@setnag.com
Martineau-Corcus	Charlotte	Charlotte.Martineau@uvsq.fr
Massinon	Anne	anne.massinon@total.com
Maurin	Guillaume	Guillaume.Maurin@univ-montp2.fr
Mcheik	Zeinab	zeinab.mcheik@univ-poitiers.fr
Megías Sayago	Cristina	megiassayago@unistra.fr
Mercer	Michelle	cwardropper@hidenisochema.com
Milcent	Théo	theo.milcent@cea.fr
Miloudi	Hafida	mmiloudi@yahoo.com
Moissette	Alain	alain.moissette@univ-lille.fr
Monnier	Hubert	hubert.monnier@inrs.fr
Monpezat	Arnaud	arnaud.monpezat@cea.fr
Moukahhal	Kassem	kassem.moukahhal@uha.fr
Nguyen	Patrick	patrick.nguyen@saint-gobain.com
Pagis	Céline	celine.pagis@ifpen.fr
Paillaud	Jean-Louis	jean-louis.paillaud@uha.fr
Peng	Peng	peng.peng@ensicaen.fr
Pereira	Marcelo	maciel@iq.ufrj.br
Pinard	Ludovic	ludovic.pinard@univ-poitiers.fr
Pirngruber	Gerhard	gerhard.pirngruber@ifpen.fr
Pouilloux	Yannick	yannick.pouilloux@univ-poitiers.fr
Reboul	Julien	julien.reboul@sorbonne.universite.fr
Ryzhikov	Andrey	andrey.ryzhikov@uha.fr
Said	Bilel	bilel.said@enscm.fr
Sassi	Mohamed	sassim2006@yahoo.fr
Schäf	Oliver	oliver.schaef@univ-amu.fr
Sesoldi	Cynthia	cynthia.sesoldi@univ-amu.fr
Sigrist	Stephan	stephan.sigrist@2s-instruments.com
Soria Castro	Silvia Mercedes	silvia.soria-castro@uha.fr
Tahraoui	Zakaria	zakaria.tahraoui@uha.fr
Thiebaut	Stéphanie	stephanie.thiebaut@cea.fr
Tortet	Laurence	laurence.tortet@univ-amu.fr
Toufaily	Joumana	joumana.toufaily@ul.edu.lb
Treps	Laureline	laureline.treps@ifp.fr
Tsonka	Mineva	tsonka.mineva@enscm.fr

Van Daele	Stijn	stijn.van-daele@total.com
Yao	Jocelin Martial	jocelin-martial.yao@uha.fr
Zarate Colin	Jose Antonio	antoniozarate@ciencias.unam.mx

ASSEMBLEE GENERALE

Mercredi 3 avril 2019 de 18h15 à 19h30

A l'issue du renouvellement des membres du Comité du GFZ par l'Assemblée Générale de l'association qui s'est tenue le 28 mars 2018 à Cabourg, le nombre de personnes siégeant au Comité du GFZ était de 9 personnes conformément aux statuts de l'association.

Composition du bureau :

- Jean Daou (Président), IS2M – Mulhouse
- Christophe Bouchy (Secrétaire), IFPEN – Solaize
- Sandrine Bourrelly (Trésorière), MADIREL – Marseille
- Nicolas Brun (Membre), ICG – Montpellier
- Ludovic Pinard (Membre) IC2MP – Poitiers
- Svetlana Mintova (Membre), LCS - Caen
- Julien Reboul (Membre), UPMC – Paris
- Benoît Louis (Membre), ICPEES – Strasbourg
- Nikolai Nesterenko (Membre), Total Research & Technology – Feluy (Belgique)

L'assemblée devra procéder au remplacement ou renouvellement de trois membres du comité :

- Jean Daou (Président), IS2M – Mulhouse
- Nicolas Brun (Membre), ICG – Montpellier
- Ludovic Pinard (Membre) IC2MP – Poitiers

Pour pouvoir au remplacement de ces membres sortants, le comité recevra les candidatures lors de la réunion du GFZ. Ces candidatures seront soumises au vote lors de l'Assemblée Générale. Les candidats sont priés de se faire connaître auprès d'un membre du bureau avant le mercredi 3 avril, 14 heures.

SPONSORS

Le bureau du Groupe Français des Zéolithes remercie les sponsors pour leur participation.



TOTAL

