



HAL
open science

Modélisation dynamique des phénomènes de transfert et d'adsorption d'ions métalliques en milieu mésoporeux : application à la catalyse hétérogène et au traitement de l'eau

Rita Fayad, Aurélie Galfré, Françoise Couenne, Elsa Jolimaitre, Loïc Sorbier, Charles-Philippe Lienemann, Mélaz Tayakout-Fayolle

► To cite this version:

Rita Fayad, Aurélie Galfré, Françoise Couenne, Elsa Jolimaitre, Loïc Sorbier, et al.. Modélisation dynamique des phénomènes de transfert et d'adsorption d'ions métalliques en milieu mésoporeux : application à la catalyse hétérogène et au traitement de l'eau. SFGP2022, Société française de génie des procédés, Nov 2022, Toulouse, France. hal-04928766

HAL Id: hal-04928766

<https://hal.science/hal-04928766v1>

Submitted on 4 Feb 2025

HAL is a multi-disciplinary open access archive for the deposit and dissemination of scientific research documents, whether they are published or not. The documents may come from teaching and research institutions in France or abroad, or from public or private research centers.

L'archive ouverte pluridisciplinaire **HAL**, est destinée au dépôt et à la diffusion de documents scientifiques de niveau recherche, publiés ou non, émanant des établissements d'enseignement et de recherche français ou étrangers, des laboratoires publics ou privés.

Modélisation dynamique des phénomènes de transfert et d'adsorption d'ions métalliques en milieu mésoporeux : application à la catalyse hétérogène et au traitement de l'eau

Rita FAYAD¹, Aurélie GALFRÉ¹, Françoise COUENNE¹, Elsa JOLIMAITRE², Loïc SORBIER², Charles-Philippe LIENEMANN², Mélaz TAYAKOUT-FAYOLLE¹

Affiliation 1 : Université Claude Bernard Lyon 1, CNRS, LAGEPP UMR 5007, 43 Boulevard du 11 novembre 1918, F-69100, VILLEURBANNE, France

Affiliation 2 : IFP Energies nouvelles, Rond-point de l'échangeur de Solaize BP 3, 69360 Solaize, France

Introduction

L'adsorption d'ions métalliques sur un support mésoporeux se rencontre dans une large variété d'applications, comme le traitement de l'eau (Dan'a 2017) et la préparation de catalyseurs hétérogènes (Catita et al. 2021). Dans ces applications, les ions initialement présents dans une solution aqueuse diffusent au travers du réseau poreux. L'adsorption se produit par échange d'ions entre les ions métalliques de la solution et des groupes hydroxyle sur les différents sites du solide (Chu et al. 1989). Pour optimiser à la fois la production des catalyseurs hétérogènes et utiliser le procédé d'adsorption dans le domaine du traitement de l'eau, la compréhension des phénomènes physico-chimiques ayant lieu est clé. Cependant, elle est complexe en raison de la forte hétérogénéité de la surface solide (Lagauche et al. 2017) et de la non-idéalité de la solution ionique liquide. Dans la littérature, les données expérimentales sont généralement interprétées en supposant l'existence d'un mono-site, en négligeant les gradients de pH à l'intérieur des pores du solide et en omettant l'impact de la force ionique sur l'adsorption et la diffusion (Liu et al. 2008).

Résultats et discussion

Dans une première partie de ce projet, l'imprégnation par voie humide de γ -alumine en présence de solutions de nickel à différentes concentrations en nickel (0.05M à 0.3 M) et à différents pH (4 à 6), est réalisée dans un réacteur parfaitement agité en mode continu équipé de sondes d'analyses en ligne ex situ (pH, conductivité) et hors ligne (spectroscopie par absorbance UV) permettant de suivre la composition du liquide (nickel, nitrate, protons, ...). Le solide est quant à lui analysé à différents temps d'imprégnation par une technique de spectrométrie d'émission atomique de plasma induit par laser (LIBS) qui mesure quantitativement la distribution des espèces chimiques dans le solide.

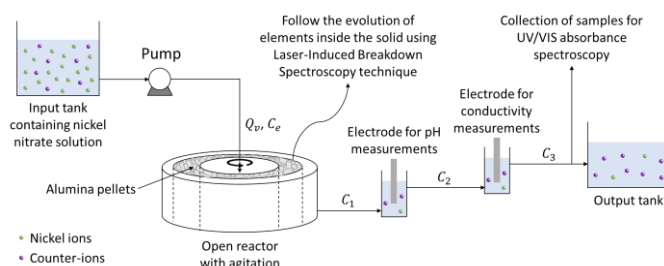


Figure 1 : Schéma du montage d'imprégnation dans le réacteur parfaitement agité.

Dans une deuxième partie, un modèle dynamique des phénomènes de transfert et d'adsorption d'une solution aqueuse ionique en milieu méso poreux a été développé. Il comprend la diffusion des espèces dans le milieu ionique non-idéal et concentré (Wesselingh et al. 2000), et l'échange d'ions entre le nickel et les groupes hydroxyles sur différents sites d'adsorption sur la surface de l'alumine (Lagauche

et al. 2017). Les paramètres du modèle (par exemple, les constantes d'équilibre de l'échange d'ions) sont estimés par comparaison des résultats des expériences d'imprégnation avec les résultats du modèle. Après optimisation, le modèle prédit l'évolution temporelle et spatiale des concentrations des ions de nickel et de protons dans les phases liquide et solide, ainsi que l'évolution du pH dans les pores. Les résultats des simulations sont concordants avec les résultats expérimentaux (voir Figure 1). Le modèle prédit une diminution du pH de la solution liquide à l'intérieur des pores d'alumine, en raison de l'échange d'ions entre le nickel et les groupes hydroxyles.

Nickel concentration in the liquid phase during impregnation: simulation vs experiment

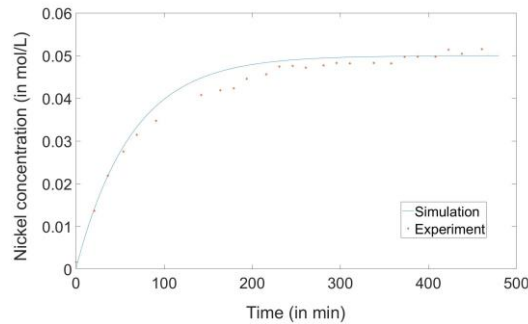


Figure 2 : Evolution de la concentration en nickel dans la phase liquide durant l'imprégnation de γ -alumine avec une solution de nickel à $[\text{Ni}]_0=0.05$ mol/L et $\text{pH}_0=6$ dans le réacteur parfaitement agité.

Conclusion

La simulation réussit à prédire l'évolution des concentrations des différentes espèces ioniques dans les phases liquide et solide, ainsi que le pH de la phase liquide à l'intérieur des pores de solide durant l'imprégnation. En perspectives, ce modèle sera amélioré pour prendre en compte la diffusion complexe d'ions dans des électrolytes concentrés et l'hétérogénéité de la surface d'alumine. Le modèle sera éventuellement étendu pour décrire un second solide (hydrogel résorcinol-formaldéhyde) utilisé dans le traitement de l'eau.

Références bibliographiques

Catita, L.; Jolimaitre, E.; Quoineaud, A. A.; Delpoux, O.; Pichon, C.; Schweitzer, J. M., Mathematical modeling and Magnetic Resonance Imaging experimental study of the impregnation step: A new tool to optimize the preparation of heterogeneous catalysts, *Microporous and Mesoporous Materials*, 2021, 312, 110756.

Chu, P.; Petersen, E. E.; Radke, C. J., Modeling wet impregnation of nickel on γ -alumina, *Journal of catalysis*, 1989, 117(1), 52-70.

Da'na, E., Adsorption of heavy metals on functionalized-mesoporous silica: A review, *Microporous and Mesoporous Materials*, 2017, 247, 145-157.

Lagauche, M.; Larmier, K.; Jolimaitre, E.; Barthelet, K.; Chizallet, C.; Favergeon, L.; Pijolat, M., Thermodynamic characterization of the hydroxyl group on the γ -alumina surface by the energy distribution function, *The Journal of Physical Chemistry C*, 2017, 121(31), 16770-16782.

Liu, X.; Khinast, J. G.; Glasser, B. J., A parametric investigation of impregnation and drying of supported catalysts, *Chemical Engineering Science*, 2008, 63(18), 4517-4530.

Wesselingh, J. A.; Krishna, R., Mass transfer in multicomponent mixtures, *Delft: Delft University Press*, 2000, 203.