



GECat 2014

Cluny

12-15 mai 2014

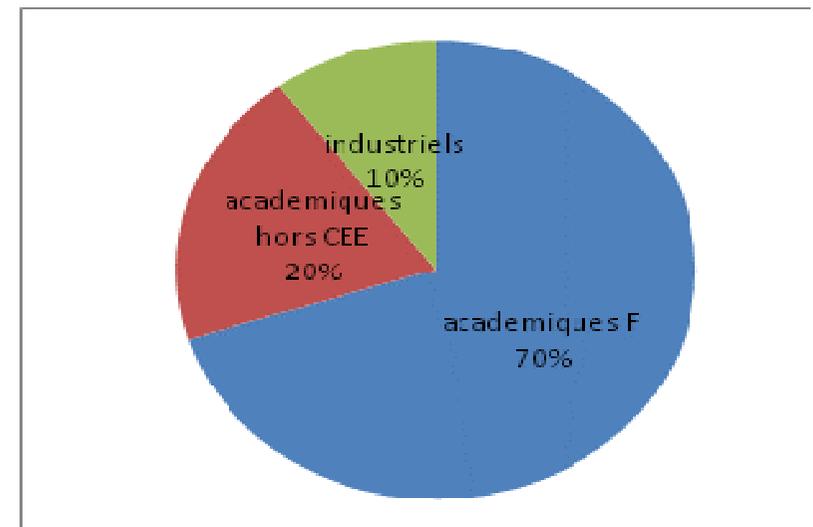
CONCLUSIONS

Francoise Maugé



Bilan Participants

- 2014 - 96 participants
- Académiques F: 68 - doc&postdoc /permanents (60%/40%)
Lille: 14 (10/4); Lyon: 12 (7/5); Strasbourg: 11 (8/3);
Caen: 10 (4/6); Poitiers: 9 (4/5); Paris: 9 (5/4);
Montpellier: 3 (2/1)
- Académiques hors UE: 18
- Industriels: 10

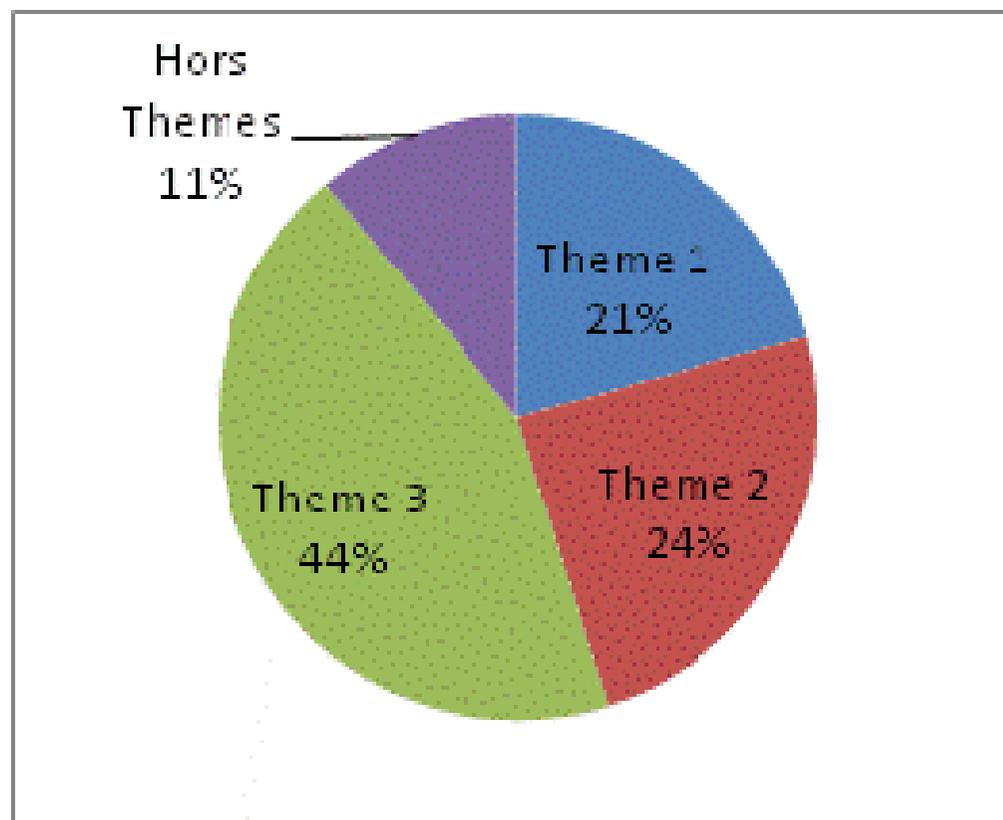




Les thèmes

- **1 - Bioraffinage et Raffinage (17)**
- **2 - Approche mixte Experience-Modélisation (20)**
- **3 - Chimie du C1 (36)**

- **82 presentations**





Thèmes

- Conférences d'introduction de grande qualité (fond et didactique)
- Différents points de vue:
 - 1 industriel, 1 académique français et 1 académique étranger
- Choix des thèmes
 - Communauté riche sur les thèmes proposés
 - Sujets à la fois ciblés et ouverts
 - Des approches différentes



Or noir vs Or vert

Conférence d'introduction

Denis Guillaume

- **OR NOIR**
- **Enjeux récurrents mais importants:** Coupes lourdes à valoriser, Homogénéisation des normes en S à l'international
- **Nouveaux enjeux: Huile de schiste et gaz de schiste**
- **Impacts et opportunités**
 - Huile de schiste: très paraffinique et légère --- > indice d'octane des essences à augmenter: **réformage, additif (MTBE)**
 - Gaz de schiste: nouvelle source de méthane et ethane
 - > valo CH_4 ;
 - > développer les voies de synthèse du propylène et butadiène



Or noir vs Or vert

Conférence d'introduction

Denis Guillaume

- **OR VERT**

- Limitation et **opportunités**

- Normes pas encore clairement établies en EU pour 2030 pour qu'une politique d'investissement se mette en place
 - **Les procédés pour valoriser le G2 et G3 pas encore matures**
 - **Besoin de valorisation de la biomasse pour la pétrochimie**



Or noir vs Or vert

Conférence d'introduction

Denis Guillaume

- **OR VERT**

- Limitation et **opportunités**

- Normes pas encore clairement établie en EU pour 2030 pour qu'une politique d'investissement se mette ne place
- Les procédés pour valoriser le G2 et G3 pas encore matures
- Besoin de valorisation de la biomasse pour la pétrochimie

- **Couleur parfaite de la robe des Beaujolais blancs !**



Thème 1: Or noir vs Or vert

- **OR NOIR**
 - Design contrôlé de la phase active et amélioration de son accessibilité
 - bimétallique, morphologie, encapsulation phase active, désilication du support
- **OR VERT (G2)**
 - Dépolymérisation de la lignine:
 - Travail sur charges réelles, procédé continu, développement de moyens analytiques
 - Synthèse de molécules plateformes (furfural,..)
 - Biocarburants: FTS impuretés spécifiques de la G2
 - G3: Peu d'étude sur les algues



Expérience et modélisation

Conférence d'introduction

Sébastien Thomas

- Progrès marquants des outils de calculs
- **Modélisation moléculaire: DFT**
- **Modélisation cinétique:**
 - Dimensionnement des réacteurs, prédiction pour le chgt d'échelle (prise en compte hétérogénéité dans le réacteur: conc, T, $\Delta(P)$, échanges avec paroi ...)
 - Modélisation cinétique: validation des mécanismes proposés
-----> Cellule IR operando (concentration des espèces adsorbées et en phase gaz, hétérogénéité de surface, effet isotopique) – edv



Expérience et modélisation

- Expériences et DFT
 - Validation des résultats du calcul, description des sites d'adsorption, compréhension des mécanismes catalytiques, prédiction
- Cinétique
 - Cinétique et operando
 - Cinétique et thermodynamique
 - Artefacts, Limites des techniques, ...
- Chimiométrie
 - Analyse d'un grand nombres de données (XAS, ..)

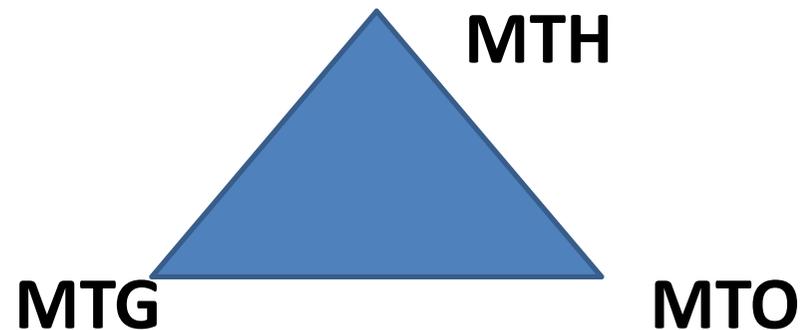


Chimie du C1

Conférence introduction

Unni Olsbye

- Methane conversion



- Rationalisation des paramètres clés pour l'activité, sélectivité et stabilité
 - Zéolithes: Taille des pores, Si/Al, dimensionalité des pores, force des Bronsted, morphologie, taille des grains (nanoscaled 2 mailles = sélectivité de forme conservée)
 - **Des Questions ouvertes: rôle des défauts, des sites de surface, et des « embouchures » de pores, du confinement ?**



Chimie du C1

CH₄, CO, CO₂, CH₃OH

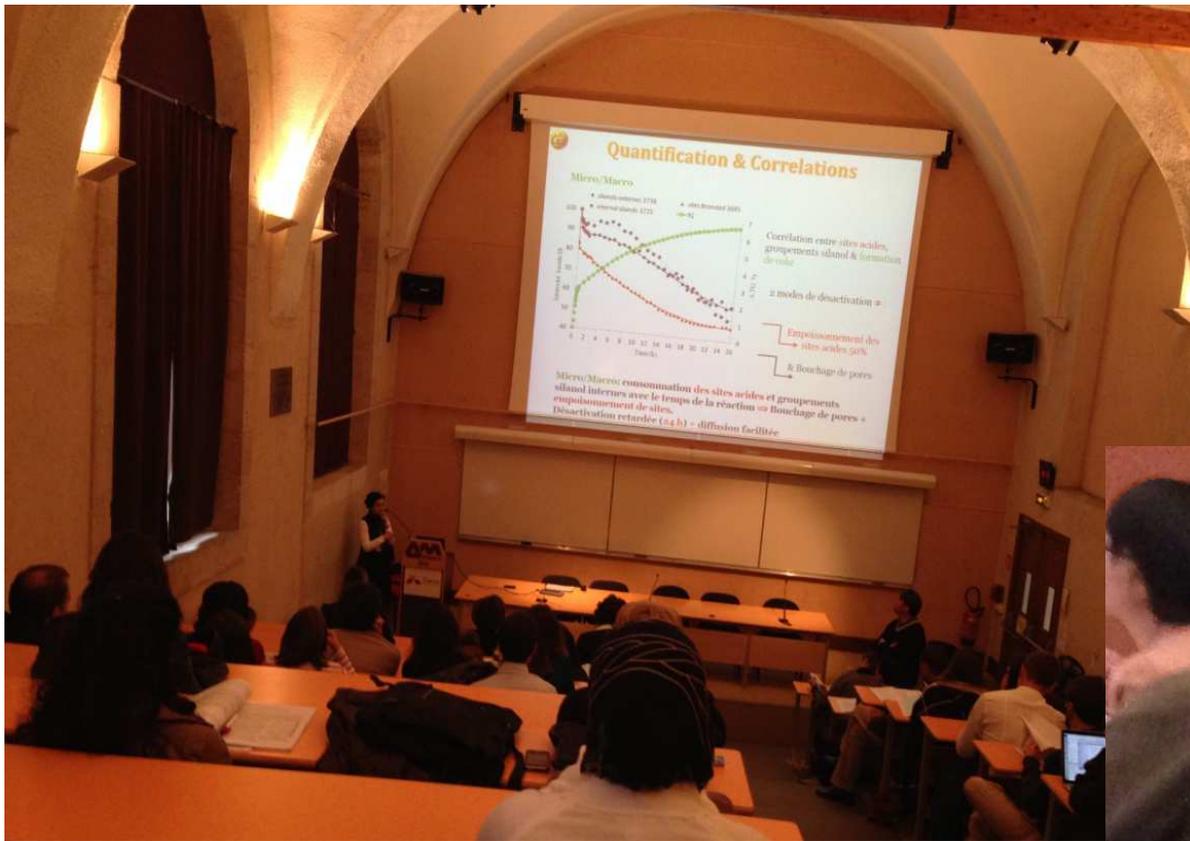
- Valorisation
 - Reformage a sec
 - Hydrogénation du CO₂ (CuZnM(Al, Zr, Ce) : stockage chimique de l'énergie
 - Oxydation du methane
 - CO+H₂ (effet des bioimpuretes, ..)
- Conversion
 - degradation photocatalytique du methanol , plasma, ...
- Catalyseurs: zéolithes de grde taille (70µm), mousses de SiC, d'alumine, ..
- Techniques d'étude: SSITKA , operando (SSITKA-IR, spectroscopie de la deactivation, photocatalyse IR)



Ouverture vers d'autres communautés ?

- **Chimie de coordination: savoir faire en synthèse de nanoparticules (multicouches, creuses, ...)**
- **Pont Catalyse homogène / Catalyse hétérogène**
- **Aller vers la bio-catalyse**
 - **du solide au micro-organisme ?**





- La Magie d'un lieu exceptionnel
- Une météo propice à la discussion
- Des menus diététiques



- Comité de sélection au top
– Pas de travaux sur l'Anti Moine!



- UN SEUL REGRET : Pas de soirée dansante !
Mais un Magicien extra





GECat 2014
Cluny

12-15 mai 2014

BRAVO au Bureau du GECAT !