

→ projet principalement de recherche fondamentale visant à la compréhension des phénomènes d'adsorption dans un nouveau type de solides poreux (MOFs) ainsi qu'à évaluer leurs performances pour la capture du CO₂ dans les procédés de purification de l'hydrogène.

→ durée : 4 ans (2007-2010), 5 partenaires académiques, 1 partenaire semi-industriel.

Contexte : deux types d'adsorbants physiques (zéolithes et carbones poreux) sont considérés à l'heure actuelle pour la capture du CO₂ lors de la purification de l'hydrogène. Un nouveau type de solides poreux, les Metal Organic Frameworks (MOFs) a été développé durant les 15 dernières années. Ces solides hybrides cristallisés, constitués de parties inorganiques connectées entre elles par des ligands organiques, présentent une grande diversité structurale, donnant lieu à des porosités élevées (surface spécifique > 5000 m².g⁻¹) ou une flexibilité structurale importante (phénomène de "respiration"). Leur capacité poreuse et/ou leur propriété d'adsorption inhabituelle en font des candidats intéressants pour la capture du CO₂. Ce projet vise donc à préparer différents MOFs, évaluer leurs aptitudes (stabilité, adsorption, régénération) afin de sélectionner les composés les plus adaptés pour leur utilisation potentielle en séparation de gaz.

Principe : Evaluation de la capacité des MOFs pour la séparation de gaz

- synthèse de différents MOFs (20-30 solides)
- activation / stabilité (thermique, en présence d'eau)
- capacité d'adsorption de corps purs (CO₂ et contaminants), régénération
- coadsorption
- tests en condition proche des procédés
- comparaison avec des zéolithes de références

Outils :

- synthèse hydrothermale et diffraction (ILV, resp. T. Devic)
- isothermes d'adsorption et microcalorimétrie (LCP, resp. P. Llewellyn)
- simulations numériques (ICGM, resp. G. Maurin)
- diffusion quasi-élastique de neutrons (IRCE, resp. H. Jobic)
- spectroscopies IR et Raman (LCS, resp. M. Daturi)
- tests en séparation / courbes de perçage (IFP, resp. G. Pirngruber)

IL Versailles

synthèse

caractérisation structurale et texturale

diffraction des RX sous pression de CO₂

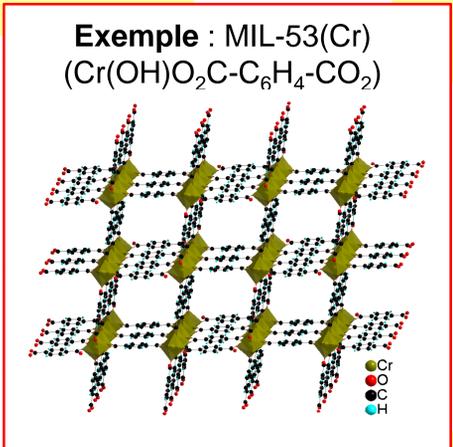
ICG Montpellier

Modélisation de la respiration sous l'effet de l'adsorption de CO₂

isothermes-enthalpies interactions gaz/solide

IRCE Lyon

coefficients de diffusion



IFP Lyon

courbe de perçage

évaluation / références

LCS Caen

validation de l'activation → absence d'impuretés

sites d'adsorption préférentiels

adsorption/régénération → espèces adsorbées

LCP Marseille

microcalorimétrie

La variation des énergies d'adsorption souligne un phénomène d'adsorption complexe dans le cas du CO₂ dû à la flexibilité du réseau, et un solide relativement homogène par rapport au CH₄

isothermes d'adsorption

Gaz simples et mélanges

Bilan et perspectives

- 20 MOFs étudiés : synthèse, activation, stabilité, adsorption de corps purs, simulations des propriétés d'adsorption et de transport dans des MOFs rigides et flexibles.

→ 8 publications, 2 brevets

→ 5 MOFs candidats pour tests en séparation :

