



QUOI DE NEUF A LA DivCat ? NEWSLETTER SEPTEMBRE 2024

Edition spéciale ICC 2024 !

Chères adhérentes, chers adhérents,

Le nouveau bureau de la DivCat espère que vous avez effectué une très bonne rentrée 2024-25 ! L'actualité des derniers mois a été marquée par le très beau congrès de l'ICC sur lequel nous revenons en détail dans cette lettre. Nous reparlerons également du GECat d'Hendaye et des élections de la SCF. Nous anticipons déjà une belle année 2024-2025 avec l'organisation du FCCat 2025 et le lancement cet automne d'une série de webinaires associant les laboratoires français de catalyse aux laboratoires belges de la Fédération Wallonie-Bruxelles. Continuez à nous suivre sur notre compte X (**ex-Twitter**) [@DivCatScf](#).

Le bureau de la DivCat

🏠 **Un nouveau bureau**

Les élections de la SCF se sont tenues en juin afin de se conformer au droit des associations de statut 1901 et à cette occasion, le bureau de la DivCat a été renouvelé. Le nouveau bureau s'est réuni le 16 septembre dernier au siège de la SCF rue Saint-Jacques, et a désigné ses responsables, représentant·es et chargé·es de mission. Nous tenons à remercier nos deux collègues dont le ou les mandats viennent de se terminer et qui ont activement contribué à la vie du bureau : Arnaud Travert et Benoît Louis.

Le nouveau bureau siègera jusqu'en 2027 et sa composition est la suivante :

- Président : Eric Marceau
- Vice-président.es : Armelle Ouali et Xavier Carrier
- Trésorier : Mickaël Capron épaulé par la Trésorière adjointe Dorothée Laurenti
- Secrétaire : Elodie Devers épaulée par le Secrétaire adjoint Hugo Petitjean

Représentant.es à l'EFCATS : Xavier Carrier et Nathalie Tanchoux

Représentant·es à la IACS : Hélène Olivier-Bourbigou et David Farrusseng

Chargé de mission communication : Jérémy Dhainaut

Chargé de mission Actualité Chimique : Eric Marceau

Chargé.es de mission congrès : Karine de Oliveira Vigier, Jérôme Canivet

Chargé de mission Gecat : Etienne Girard (président du Gecat)

Chargée de mission auprès du Réseau Jeunes : Josefina Schnee

🏠 **GECAT 2024 à Hendaye**

Le GECAT d'Hendaye a été un succès avec 102 participants en continuité avec l'édition précédente, et près d'une trentaine d'orateurs répartis sur trois sessions plénières autour des thèmes Catalyse et Génie Chimique, Activation de petites molécules, et Bioraffinerie et Economie Circulaire. Bravo à tous les organisateurs et au président du GECAT Etienne Girard (IFPEN).

🔗 Retour sur les prix DivCat

Comme l'année dernière, outre les Prix de Thèse et Jeune Chercheur / Jeune Chercheuse, la DivCat a souhaité récompenser une personnalité ayant apporté une contribution à la catalyse dans le domaine de l'innovation. Les prix ont été remis à l'occasion du GECAT, où trois des lauréat.es ont présenté leurs travaux, et lors de l'ICC en « remise publique spéciale ». Bravo à tous les quatre !

Prix de Thèse sponsorisé par Total Energies : Daria Ryaboshapka



Daria Ryaboshapka a réalisé sa thèse sur les catalyseurs ultra-dispersés à base de sulfures de molybdène ou de rhénium pour l'hydrodésulfuration, la production d'hydrogène et la réduction de l'oxygène. Cette thèse, soutenue le 22 janvier 2024 à l'Université Claude Bernard – Lyon I (Villeurbanne), a été réalisée à l'IRCELYON, dans l'équipe « Catalyse Hétérogène pour la Transition Énergétique », sous la direction des Drs. Pavel Afanasiev et Laurent Piccolo.

Prix Jeune Chercheur / Jeune Chercheuse sponsorisé par IFPEN : Léa Vilcoq (CP2M, Villeurbanne) et Rafael Gramage Doria (ISCR, Rennes)



Après un doctorat en partenariat entre l'IC2MP et IFPEN (2009-2012), et des post-doctorats au Centro de Química da Madeira, à l'IRCELYON et chez Firmenich, Léa Vilcoq est nommée chargée de recherche CNRS en 2016 au LGPC, qui devient ensuite partie intégrante du CP2M. Léa Vilcoq a été membre du Réseau Jeunes Rhône-Alpes de la SCF, qu'elle a présidé. Elle est récompensée par la DivCat pour ses travaux en catalyse hétérogène et en ingénierie chimique appliqués à la valorisation de biopolymères et de monomères issus de la lignocellulose.



Rafael Gramage Doria a effectué sa thèse de doctorat à l'Université de Strasbourg entre 2008 et 2012. Après deux post-doctorats à l'Université d'Amsterdam et à l'Université de Nagoya, il a été recruté comme chargé de recherches CNRS en 2015 à l'Institut des Sciences Chimiques de Rennes. Il y anime un groupe au sein de l'équipe Organométalliques : Matériaux et Catalyse. Rafael Gramage Doria intervient également fortement dans la vie collective des communautés de catalyse et de chimie durable. Il est récompensé par la DivCat pour ses études mécanistiques en fonctionnalisation des liaisons C-H et en oxydation ménagée au moyen de catalyseurs organométalliques à base de métaux nobles ou non nobles.

Prix Innovation de la DivCat : Audrey Bonduelle (IFPEN, Solaize)



Audrey Bonduelle est ingénieure diplômée de Chimie ParisTech et docteure de l'Université Paris VI (2005). Elle a effectué sa thèse à Chimie ParisTech en collaboration avec le Muséum National d'Histoire Naturelle. Elle a rejoint IFPEN en 2005 en tant qu'ingénieure de recherche au sein de la direction Catalyse, Biocatalyse et Séparation. Depuis 2014, elle y occupe la fonction de cheffe de projet. Audrey a été présidente du GECAT (Groupe d'Etude en Catalyse) de 2017 à 2020, et elle s'investit régulièrement dans l'organisation de conférences nationales et internationales. Elle est récompensée pour son importante activité de valorisation liée aux enjeux environnementaux, dans des domaines aussi variés que la catalyse d'hydrotraitement, le recyclage des plastiques, la photoconversion catalytique de CO₂ et la production décarbonée de H₂.

↪ Réunion Enseignement de la Catalyse

Le 25 juin 2024, la DivCat a organisé une réunion ouverte aux responsables de formations et d'enseignements en catalyse, et à toute personne intéressée pour discuter des enjeux et perspectives dans cet enseignement à l'université et dans les écoles d'ingénieurs. Entre 20 et 30 personnes ont participé, majoritairement en ligne, pour certaines à Paris, avec trois grandes interrogations : La catalyse est-elle une discipline comme les autres ? La catalyse avant et après le master ? La catalyse au-delà de l'apprentissage scolaire ?

La discussion a fait apparaître que le succès rencontré par les Masters Catalyse est très inégal d'une université à l'autre. Le problème de la catalyse est que le sujet est mal identifié par les étudiants, qui ne le découvrent que tardivement ou au détour d'un cours de cinétique, sans en percevoir les enjeux. Le succès des Masters qui font le plein, même après des passages à vide, est lié à une forte volonté des laboratoires pour imposer le thème dans les arbitrages au sein de l'université, aidée par une visibilité du paysage local de la recherche dans le découpage entre les différentes sections CNU qui évite les compétitions entre thématiques. Autres sources de succès, des réponses extensives aux différents appels d'offre pour mettre en valeur les formations (avec apport de crédits...), et une offre variée comme des parcours franco/anglophone, l'apprentissage par la recherche, les réseaux nationaux et internationaux... (Ecole Universitaire de Recherche, projet réseau Compétences et métiers d'avenir, Erasmus mundus). La visibilité accrue en licence, une période de la formation pendant laquelle le monde de la recherche est encore dans le flou pour les étudiants, est aussi importante ; des interventions de chercheurs et des visites de laboratoire sont un plus pour susciter la curiosité des étudiants et faire connaître les expertises des laboratoires... et de leurs enseignants. Quant au contenu, les participants ont été unanimes pour dire que la cinétique formelle est devenue difficile à enseigner en raison des lacunes des étudiants en mathématiques, qui sont peu rattrapables. Une approche de la cinétique et de la catalyse au travers des mécanismes réactionnels est actuellement plus simple à utiliser, car les étudiants y sont familiarisés par les enseignements de chimie organique. L'ouverture vers les applications de la catalyse est essentielle. La DivCat aura sans doute un rôle à jouer, par exemple grâce à son réseau (enseignants, intervenants industriels, ancien doctorants...) qui permettrait de compléter les compétences locales par des interventions ponctuelles d'enseignants extérieurs (dans des sous-disciplines qui ne sont pas partout représentées, telles que l'électrocatalyse, la photocatalyse, la catalyse homo / hétérogène...) ou en aidant à la mutualisation de formations doctorales ou à l'organisation d'écoles thématiques courtes.

Un compte-rendu de cette réunion sera préparé et converti ultérieurement en article pour L'Actualité Chimique, une fois complété par des retours d'étudiants adhérents de la Division.

🔗 ICC 2024, Lyon : bilan et souvenirs !



Après plusieurs années d'intense préparation, l'ICC s'est tenu à Lyon du 14 au 19 juillet 2024. La communauté internationale était heureuse de se retrouver après une édition annulée en 2020 suite à l'épidémie de COVID. Un grand merci rétrospectif à l'ensemble des collègues qui depuis la déclaration d'intention initiale s'est mobilisé pour que ce congrès ait lieu, et aux bureaux successifs de la DivCat qui ont contribué à ce grand succès.

L'ICC, ça a été :

- 2328 inscrits dont 58% venus d'Europe, 26% d'Asie, 11% des Amériques – et 25% d'étudiants.
- 2715 abstracts, 113 sessions orales avec 321 oraux longs et 186 oraux courts, 1324 posters (!) répartis en trois sessions (heureusement dans une salle très spacieuse), 8 conférences plénières, 25 keynotes, 5 tables-rondes. A noter 50% de femmes parmi les keynote speakers, ce qui a été relevé par certaines de nos collègues étrangères, qui souhaiteraient que leur communauté ait le même volontarisme dans leur pays.
- 52 exposants et 15 sponsors

En dehors de son rôle dans l'organisation du congrès et des sessions, la Division Catalyse a été présente à travers une intervention du président lors de la cérémonie d'ouverture, et un stand qui a servi de point de ralliement pendant les pauses café et les sessions poster. Elle a promu les lauréats récents des prix de la DivCat et de distinctions nationales grâce à la brochure « Young laureates of French catalysis », préparée avec l'aide d'Olivia Pradel, qui a reçu un excellent accueil de la part des congressistes. Devant son succès, il est prévu que cette brochure continue à être enrichie et mise à jour au fil du temps. Le fichier pdf est téléchargeable à partir de notre page Actualités sur le site de la SCF :

<https://new.societechimiquedefrance.fr/divisions/catalyse/brochure-icc-young-laureates/>

Pour résumer, nous (pas seulement la DivCat, la communauté catalyse entière) étions d'accord pour dire qu'ICC 2024 a été le meilleur congrès de cette envergure depuis longtemps. Nous avons vécu une très belle semaine, intense par sa richesse scientifique, extrêmement bien organisée et dans une ambiance conviviale et bienveillante, la French touch du GECat au niveau mondial. Un immense bravo à tout le comité d'organisation pour ce succès qui fera date dans l'histoire de l'ICC, au PCO dont l'efficacité a été une nouvelle fois démontrée, et aux volontaires pour leur implication et leur sourire !

Certains commentateurs galvanisés débattent encore pour savoir si le succès des JO aurait été le même sans cette réussite inaugurale de l'ICC. Au bureau de la DivCat, plutôt que de trancher cette question ô combien délicate, nous avons préféré partager avec vous les points scientifiques qui nous ont marqués. Vous trouverez ce panorama subjectif en annexe de cette newsletter spéciale.



Les membres du comité exécutif sur scène sous les applaudissements des congressistes

🔗 IACS et EFCATS

Restons dans l'international, avec pour rappel le nom de nos représentants à l'IACS, David Farrusseng et Hélène Olivier-Bourbigou, que vous pouvez retrouver sur la photo ci-dessus. Mais un changement de taille : lors du dernier conseil de l'IACS, David a été élu président de l'association. Félicitations à lui ! Au sein de l'EFCATS, Nathalie Tanchoux est secrétaire du bureau et c'est maintenant Xavier Carrier qui l'accompagnera pour représenter la communauté de catalyse française. Nous remercions chaleureusement Karine de Oliveira Vigier pour son implication à l'EFCATS ces dernières années. Le prochain EuropaCat aura lieu l'année prochaine à Trondheim (Norvège) du 31 août au 5 septembre.

🔗 Actualité Chimique

Le nouveau bureau de la SCF installé mi-juillet a rappelé Malik Agina, dont le contrat avait été interrompu en début d'année, comme rédacteur adjoint de L'Actualité Chimique aux côtés de Patricia Pineau, reconduite comme rédactrice en cheffe. Ce poste était crucial pour alléger la charge pesant sur une équipe de rédaction restreinte. Ce mardi 1^{er} octobre, une page a donc été tournée sur les péripéties du premier semestre, avec la première réunion du comité de rédaction depuis fin janvier, et la reprise normale de la parution du journal, Malik ayant non seulement bouclé le numéro de septembre que vous avez reçu, mais aussi le numéro d'octobre. Lors de ce comité de rédaction, il a été relevé que la catalyse était très présente dans L'Actualité Chimique, ce que nous pouvons prendre comme un signe de reconnaissance pour notre dynamisme, mais certainement pas comme le signe que nous devons lever le pied. Maintenant que la machine tourne à nouveau, les lauréat.es des prix DivCat 2024 vont être contacté.es pour la préparation de leur article contractuel, et bien évidemment, les actualités qui peuvent intéresser la SCF peuvent être remontées via la Division. Toute idée d'article est la bienvenue, en particulier si elle peut aider à construire des passerelles avec l'industrie ou l'enseignement.

🔗 FCCAT 2025

Passons au futur, avec l'organisation du FCCAT 2025. Le site web est désormais consultable : <https://fccat2025.sciencesconf.org/> et le congrès n'attend plus que vos soumissions, **avant le 15 novembre**. Une communication spécifique par mail va se faire juste avant... ou juste après que nous aurons envoyé cette Newsletter. Vous pouvez déjà trouver ci-dessous une copie du flyer d'information.

May 19th – 23rd 2025
FCCat 4
2025
Ronce-les-Bains (France)

French Conference on Catalysis 2025
<https://fccat2025.sciencesconf.org/>

Invited speakers:
Nicolas Bion (CNRS-IC2MP, Univ. Poitiers, France)
Mercedes Boronai (ITQ, UP Valencia-CSIC, Spain)
Clément Camp (CNRS-CP2M, Univ. Lyon, France)
Claire Courson (ICPEES, Univ. Strasbourg, France)
Kilian Kobl (Ypsa Facto, France)
Leonarda Francesca Liotta (ISMN-CNR, Univ. Palermo, Italy)
Vitaly Ordonsky (CNRS-UCCS, Univ. Lille, France)
Hilde Poelman (LCT, Ghent Univ., Belgium)
Andreas Rudi (IIP, KIT, Germany)
Agnieszka Ruppert (Łódź University of Technology, Poland)

The topics cover the challenges faced by catalysis in a context of energy transition and sustainability of chemical processes:

- ✓ Fundamental & applied catalysis
- ✓ Refining & petrochemical processes
- ✓ Alternative energy solutions
- ✓ Renewable & fine chemicals
- ✓ Environment & sustainable development
- ✓ Recycling

Preferential fees:
before March 7th 2025

Academic	750 €* / 800 €
Industrial	850 €* / 900 €
Student	570 €* / 620 €

Including Meals & Accommodation
*EuChemS or SCF Member

Organizing committee:
C. Abreu Teles, P. Bazin, F. Can, J. Canivet, M. Capron, E. Devers, P. Gaudin, E. Genty, E. Girard, E. Marceau, K. Parkhomenko, H. Petitjean, J. Schnee

Nous vous rappelons que le congrès, comme les FCCAT précédents, est international, qu'il est ouvert à tous les domaines de la catalyse sans thèmes prédéfinis, que la langue officielle est l'anglais, et qu'il aura lieu du 19 au 23 mai 2025 à Ronce-les-Bains.

🔗 Premier webinaire franco-belge de catalyse !

Autre nouveauté, le bureau de la DivCat a le plaisir de vous annoncer que le 15 octobre, à 9h30, aura lieu le premier d'une série de webinaires communs aux laboratoires de catalyse de la Fédération Wallonie-Bruxelles et aux laboratoires de catalyse français.

<https://cnrs.zoom.us/j/93587970395?pwd=eTkEBSKwJi9cjJuaAmwrOhvLMS4mc6.1>

ID de réunion : 935 8797 0395

Ce webinaire croisera les domaines d'expertise des équipes de Louvain-la-Neuve et de Dunkerque dans la thématique hydrogène, et sera l'occasion d'une présentation des deux laboratoires.

Merci à notre chargée de mission Josefine Schnee d'avoir été la cheville ouvrière dans l'organisation de ce premier webinaire, qui sera suivi de plusieurs autres au cours des prochains mois. Nous espérons que vous serez nombreuses et nombreux à y assister. Et merci de diffuser largement l'information !

**Webinaires
franco-belges
de catalyse**



1^{ère} édition – Mardi 15 octobre, 9h30-12h
« Stockage chimique d'hydrogène et déstockage »



Hydrogen
H₂



UCLouvain
Louvain-la-Neuve IMCN

- Méthanation du CO₂
(Plaifa Hongmanorom, post-doc)
- Stockage d'H₂ sous forme d'NH₃
et cracking du NH₃
(Sebastian Gamez, post-doc)



ulco
Université
Dunkerque

- Méthanation du CO₂
(Sharad Gupta, post-doc)
- Reformage du biogaz
(Mahdi Mohamad Ali,
doctorant)



UCEiV
Unité de Chimie Environnementale
et Interactions sur le Vivant

🔗 Hommages

Nous devons conclure cette Newsletter par un hommage à plusieurs de nos collègues dont la disparition est récente, et prématurée : Jacques Barbier (père), Laurent Delannoy, disparitions dont nous vous avons informé, mais aussi cet été Jean-Marc Millet et Françoise Quignard, deux piliers de la catalyse française dans leurs domaines de recherche, la catalyse d'oxydation sélective et les nouvelles synthèses de matériaux poreux, et deux personnes fortement impliquées dans la vie de notre communauté. Nous préparerons des textes d'hommages sur les pages web de la Division.





ICC 2024 : un bref retour dans le détail

La DivCat a été largement représentée à l'ICC, avec plusieurs de ses membres très impliqués dans l'organisation en elle-même, en tant que Topic Chairs, en tant qu'orateurs, et en tant que promoteurs de la visibilité de la division. Voici les points forts du congrès que nous avons retenus et que nous souhaitons partager avec vous.

Tout d'abord d'un point de vue général, ICC2024 s'est distingué par des initiatives innovantes et inclusives, notamment avec des sessions "out of the box" qui ont encouragé les participants à explorer des sujets au-delà des cadres traditionnels que l'on a jusqu'à présent rencontrés dans ce type de congrès. La « Career fair » et les ateliers de développement professionnel ont joué un rôle crucial pour les jeunes chercheurs, offrant des opportunités précieuses de réseautage et de mentorat. Innovation à porter au crédit de l'équipe d'ICC2024 : ces événements étaient organisés par un comité international de jeunes talents ad hoc, une initiative qui a renforcé l'engagement des jeunes scientifiques et encouragé la diversité dans le domaine.

L'importance de la parité de genre a été un point fort soutenu par les organisateurs, avec un équilibre exemplaire dans les plénières et les keynotes. La présence d'orateurs et d'oratrices de différents horizons a permis de refléter un engagement explicite en faveur de l'égalité, valorisant ainsi la diversité des perspectives dans la recherche scientifique. Les discussions de panels ont également suscité un grand intérêt, en réunissant des experts pour des échanges dynamiques sur les tendances émergentes et les défis à venir.

Bref, le congrès a su offrir des perspectives nouvelles et inspirantes à l'ensemble de la communauté scientifique, par son programme riche et diversifié et par des initiatives revendiquées dès le départ comme des positions de principe éthiques. On peut penser qu'à la suite de cet ICC, le temps de l'organisation un peu « routinière » de grandes messes internationales désincarnées, déléguée en grande partie par quelques « grands noms » à des PCO ou à une équipe restée dans l'ombre, est révolu.

Les plénières, keynotes et discussions de panels seront disponibles prochainement sur la chaîne YouTube de l'ICC, permettant de revivre ces moments forts et d'élargir l'impact des discussions au-delà du congrès. Prenez le temps de vous y plonger : vous y trouverez des points de vue qui remettront peut-être en cause des représentations sur l'industrie, la recherche académique ou les thématiques à développer. Sans trahir de secret, nous transcrivons ici juste le message que la catalyse a encore de belles pages à écrire si elle réussit à attirer et former la jeune génération étudiante en capitalisant sur ses aspirations actuelles, et à développer des idées originales dans la durée.

D'un point de vue plus scientifique, pour parler justement d'idées originales : une sélection

Procédés durables

Nous avons noté que la thématique "Conversion catalytique de la Biomasse" était largement répartie dans de nombreuses sessions autres que celles dédiées à la biomasse : acide-base, raffinage, photo-électrocatalyse (la photocatalyse : une des sessions ayant reçu le plus de résumés), hydrotraitement (sulfures).... et également une forte émergence de la conversion catalytique des plastiques par rapport aux derniers congrès. Nous avons apprécié la keynote de Susannah Scott qui a présenté un procédé très élégant de dépolymérisation du polyéthylène sans apport d'hydrogène : réaction dans l'éthylène à 100°C sur un catalyseur Ru. Globalement et dans un contexte de développement durable, les thématiques liées à la valorisation des petites molécules, et sans surprise celle du CO₂, ont connu un réel engouement autant pour le nombre de résumés soumis, que sur la variété des champs de recherches abordés et que sur le nombre d'auditeurs présents à chaque session.

Raffinage et pétrochimie

A côté de cette chimie biosourcée, le raffinage lui aussi passe à la chimie durable. La session Catalysis in refining and petrochemistry: current and future trend a été très suivie. On peut noter la présentation de Koichi Matsushita de ENEOS Corporation, Japan, qui a démontré comment abaisser les émissions de CO₂ de 140t/jour, en utilisant le CO₂ émis par la régénération du FCC et l'H₂ du reforming pour conduire in fine à la production de toluène alkylé (290 t/jour). Une table ronde a mis en avant les discussions autour de l'adaptabilité des raffineries vis à vis de nouveaux flux problématiques (polluants des charges renouvelables), l'adjacence des expertises à mettre en place pour aller des énergies fossiles vers la transition énergétique, et la diminution des émissions de CO₂ dans ce secteur qui passe entre autres par une meilleure réutilisation des catalyseurs (régénération, réjuvenation, recyclage).

Catalyse moléculaire

Même si, traditionnellement, la catalyse hétérogène est au cœur de l'ICC, la catalyse moléculaire a également été mise à l'honneur avec deux sessions dédiées, l'une portant sur la catalyse par les métaux de transition (Topic 1), l'autre plutôt dédiée aux éléments du groupe principal, à l'organocatalyse et à la catalyse supramoléculaire (Topic 2). Ces deux journées ont été l'occasion d'accueillir des conférenciers prestigieux comme Kyoko Nosaki (Université de Tokyo) et Joost Reek (Université d'Amsterdam). Elles ont permis de découvrir des approches moléculaires très originales présentées par des collègues de tous les continents pour relever les défis actuels en matière d'activation de diverses liaisons (C-H, C-F, C-C), en matière de valorisation du CO₂, ou encore de stratégies inédites permettant la récupération et la réutilisation des catalyseurs à base de métaux précieux.

Cinétique fondamentale

Nous ne savons pas s'il faut dire qu'elle était moins visible, ou qu'elle est de retour... Ce qui est sûr, c'est que la cinétique expérimentale était bien là en 2024, à un haut niveau, particulièrement chez nos collègues d'Amérique du Nord. L'Award Lecture de Yuriy Román-Leshkov, lauréat du prix IACS, a mis en lumière l'influence du champ électrique dans les réactions catalytiques thermochimiques. Cette présentation a montré comment des recherches en catalyse fondamentale pouvaient ouvrir une large perspective d'applications, et a reçu un accueil chaleureux de la part de l'auditoire. Nous avons vu plusieurs présentations construites sur la détermination expérimentale de variations d'enthalpie et

d'entropie d'activation en solution, avec mise en évidence de fortes contributions électrostatiques dans le mécanisme des étapes élémentaires (Bert Chandler, Cathy Chin). Voici un domaine a priori aride, qui est peut-être devenu marginal face au développement de procédés catalytiques ou aux possibilités offertes par les différentes méthodes de modélisation, mais qui a le potentiel de révéler de nouvelles conditions de réaction et qu'il serait dangereux de négliger pour l'avenir.

Matériaux

Plusieurs oraux ont concerné l'utilisation de nanoalliages intermétalliques ou à haute entropie. Marc Armbruster a présenté de façon très didactique l'intérêt d'alliages ternaires ou quaternaires pour cumuler les effets bénéfiques des éléments du mélange, en termes de densité électronique et structure cristallographique (Ga, In, Sn, Pd ou Sn, Pb, Bi, Pt). Les alliages intermétalliques permettent aussi un gain en stabilité. Shinya Furukawa a discuté du design d'alliages à forte entropie. Mêler plusieurs métaux permet d'associer plusieurs fonctions au sein d'une même particule et d'augmenter sa stabilité. Le challenge reste la synthèse de nanoparticules intermétalliques. La multifonctionnalité a aussi été évoquée par Avelino Corma dans sa plénière. La plénière d'Ulrike Diebold sur l'étude de réactions sur surfaces modèles a fait l'unanimité par sa qualité, et nous la recommandons fortement.

Spectroscopies

Autre grand succès dû à son approche didactique, la plénière du Jeroen van Bokhoven sur l'application de la spectroscopie d'absorption X à la catalyse. Un gros problème en spectroscopie d'absorption : comment isoler le signal des espèces minoritaires à la surface du matériau qui sont les seules à être modifiées sous réaction ? Pour les mettre en évidence, les techniques de type modulation excitation se généralisent et ont été au cœur de plusieurs présentations. La keynote d'Arnaud Travert a été particulièrement appréciée car présentant un des trop rares cas d'étude où le lien entre les espèces de surface observées et la cinétique de la réaction a pu être mis en évidence grâce à la modélisation des données expérimentales. Nous avons découvert les outils IR développés au LCS et distribués par une start-up, ce qui a mis en évidence le potentiel d'innovation présent dans nos laboratoires. Les logiciels de modélisation présentés sont non seulement originaux et puissants mais surtout disponibles en open source sur le portail spectrochempy.fr.

Digitalisation et machine learning

Les sessions sur la digitalisation des données et le machine learning ont capté l'attention même des non-spécialistes, soulevant de nombreuses questions sur l'avenir de la discipline et sur la manière dont ces technologies vont transformer les pratiques scientifiques. Les outils numériques (modélisation, traitement de données) mobilisent de plus en plus l'intelligence artificielle (IA) pour accélérer la production de données en grand nombre (ex : échantillonnages des structures de départ en modélisation), faciliter leur analyse, extraire des tendances et prédire des comportements. Citons par exemple le travail de Véronique van Speybroeck (Gand) sur la diffusion réactive dans les zéolithes, qui combine machine learning et DFT pour explorer des phénomènes à une échelle de temps et d'espace inédite. Outre l'explosion de cette thématique au travers de sessions dédiées, plusieurs présentations ont mis en valeur le rôle crucial des spécialistes en catalyse dans la production et l'évaluation des données d'entraînement des modèles : ces outils demandent de nouvelles expertises extérieures au domaine strict de la catalyse (en statistiques notamment), mais la qualité et la robustesse des modèles issus de l'IA dépendent énormément des données initiales fournies.

Pour conclure, quelques photos



© Sébastien Ferraro - ICC 2024

