

HABILITATION A DIRIGER DES RECHERCHES

Date de la soutenance : **17 décembre 2024**

Nom de famille et prénom de l'auteur : **Madame GAGNIERE Emilie**

Titre des travaux : « *Procédés de cristallisation : des principes fondamentaux aux applications industrielles* »



Résumé

La cristallisation est un procédé crucial dans le domaine du génie des procédés, où elle est largement utilisée pour séparer, purifier et produire des substances sous forme cristalline. Cependant, malgré sa pertinence et son importance pratique, la cristallisation demeure un procédé complexe, en raison des nombreux mécanismes intervenant. Mes activités de recherche se concentrent sur la cristallisation et la précipitation industrielles, selon trois axes principaux qui explorent chacun des aspects essentiels et complémentaires de ce domaine.

Le premier axe de recherche concerne les aspects fondamentaux de la cristallisation avec la compréhension de phénomènes complexes, tels que la nucléation et le polymorphisme. Une étude spécifique sur les matériaux à changement de phase a apporté une contribution importante à l'étude de la nucléation secondaire en milieu fondu. Concernant le polymorphisme, les travaux menés ont permis une compréhension plus fine de la cristallisation de formes polymorphiques, et a conduit à une nouvelle explication de la règle des phases d'Ostwald à travers la modélisation et l'expérimentation. Par ailleurs, des études ont été menées pour développer une stratégie visant à maîtriser et contrôler la cristallisation de la phase polymorphique souhaitée, en particulier la phase métastable.

Un deuxième axe s'oriente autour du suivi *in situ* des procédés de cristallisation en solution. En effet, il est fondamental de comprendre l'influence des paramètres utilisés ainsi que ceux du produit à cristalliser, tels que la sursaturation, la distribution granulométrique des cristaux, leur faciès ou encore la forme polymorphique. Le suivi et le contrôle de ces paramètres sont rendus possibles grâce à l'utilisation de techniques analytiques (PAT, Process Analytical Technology). En particulier, des capteurs *in situ* comme la spectroscopie proche ou moyen infrarouge, couplés à des méthodes usuelles de chimiométrie, permettent de suivre la concentration en solution. Concernant la phase solide, un suivi qualitatif est réalisable mais la mise en place d'un suivi quantitatif reste complexe. Bien que certains capteurs mesurent les distributions de taille de cordes en temps réel, la reconstruction des distributions de taille de particules demeure un défi. Les études menées ont montré la nécessité de développer de nouveaux outils, comme des capteurs logiciels, pour un suivi en ligne de la distribution de taille des particules. Par ailleurs, le développement de nouveaux capteurs physiques, tels que la sonde SRS, combiné aux méthodes de l'IA/machine learning, ouvre des perspectives prometteuses pour améliorer la caractérisation et le contrôle en temps réel des procédés de cristallisation.

Le troisième axe explore les applications industrielles de la cristallisation, notamment dans le domaine de l'environnement, de l'énergie et de l'agroalimentaire. En particulier, des travaux ont été réalisés pour le traitement des eaux usées, l'optimisation du séchage de produits alimentaires, le stockage de l'énergie et plus récemment la capture du CO₂. Dans chacune des études, l'objectif était de concevoir des solutions innovantes pour répondre aux besoins croissants des industriels en terme de durabilité, d'efficacité et de respect de l'environnement. La diversité

des sujets traités montre que les domaines d'application de la cristallisation et de la précipitation industrielles sont très vastes et en constante expansion.