

Apports de la modélisation pour la séparation des terres rares par chromatographie sur résines imprégnées

Yohann Le Guennec, Université de Lorraine, CNRS, LRGP, F-54000 Nancy, France

Angéline Noclain, Université de Lorraine, CNRS, GEORESSOURCES, F-54000 Nancy, France

Laurence Muhr, Université de Lorraine, CNRS, LRGP, F-54000 Nancy, France

Alexandre Chagnes, Université de Lorraine, CNRS, GEORESSOURCES, F-54000 Nancy, France

Bien que la chromatographie d'échange d'ions soit une technologie industrielle bien établie dans l'industrie pharmaceutique, elle n'est pour l'instant que rarement utilisée dans les procédés hydrométallurgiques, malgré son fort potentiel. Alors qu'une littérature abondante existe sur la séparation chromatographique des terres rares, aucune étude n'a jusqu'à présent réussi à dépasser le stade de la recherche en laboratoire. Un défi majeur réside dans l'amélioration des performances de la chromatographie, en particulier en termes d'efficacité de séparation.

Cette étude évalue le potentiel de phases stationnaires C8, C18 et sur mesure, imprégnées d'agents extractants, pour la séparation des terres rares. L'accent est mis sur deux extractants organophosphorés couramment utilisés en extraction liquide-liquide : le D2EHPA et le TOPO. De nombreux phénomènes physico-chimiques complexes interviennent en solution (formation de complexes nitrés des terres rares, déprotonation de l'acide nitrique) et à la surface de la résine imprégnée (échanges compétitifs entre les différentes terres rares en solution, variation possible de la capacité de la résine en fonction du pH). Afin de mieux comprendre les interactions entre les terres rares et les phases stationnaires imprégnées, l'étude intègre la modélisation et la simulation des systèmes chromatographiques

Le code de calcul ainsi développé résout, de manière temporelle et le long de la colonne, les équilibres thermodynamiques dans l'ensemble des phases du système. Il permet de reproduire les chromatogrammes expérimentaux et peut être utilisé pour simuler des conditions de séparation inédites afin d'optimiser les performances de séparation pour les terres rares.