

L'Institut Pascal organise les Journées Photo-Procédés FédEsol 2024

les 8-9 juillet 2024 à Clermont-Ferrand

Les journées thématiques « photo-procédés » de la fédération CNRS pour le solaire FédEsol sont des rencontres annuelles regroupant une dizaine de laboratoires de physique, thermique-énergétique et génie des procédés où sont discutés et librement débattus différents sujets scientifiques considérés comme déterminants pour la compréhension multi-échelles, l'analyse expérimentale et l'élaboration de modèles de connaissance de procédés solaires photo-réactifs (longueurs d'ondes comprises entre 300 et 1000 nm, soit 4,1 à 1,2 eV). Ces procédés visent à terme plusieurs applications comme la production de carburants ou biocarburants solaires par photosynthèse naturelle et artificielle (à partir d'eau et/ou de CO₂), la dépollution des effluents gazeux et liquide, l'élaboration de molécules plateforme ou à valeur ajoutée, la régénération d'atmosphère,...

Ces journées sont également un lieu d'échanges scientifiques pluridisciplinaires faisant émerger des problématiques théoriques et expérimentales communes.

Les sessions principales d'une demi-journée sont organisées autour d'un atelier préalablement proposé faisant l'objet d'une courte présentation de lancement, de discussions ouvertes et de courts documents de synthèse. Un temps d'échange est réservé en fin de journée ou durant les repas pour permettre la discussion de projets de recherche collaborative ou la présentation d'outils communs.

Sujets déjà abordés au cours des précédentes éditions (CR disponibles sur simple demande) :

- Détermination des propriétés optiques.
- Électromagnétisme / Obtention des champs dans les structures d'intérêt.
- Transfert de rayonnement et Transport de photons en milieu participant semi-transparent.
- Modélisation multi-échelles : du milieu continu au procédé industriel.
- Méthodes de références rigoureuses pour le calcul des propriétés radiatives de particules.
- Mesure directe des propriétés radiatives par analogie micro-ondes.
- Approche prédictive du calcul des propriétés radiatives dans le domaine optique et validation indirecte par mesures en diffusion multiple.
- Méthodes inverses pour l'obtention des propriétés radiatives dans le domaine optique à partir de mesures spectrophotométriques en diffusion simple. Apport potentiel de mesures angulaires.
- De James Clerck à Ludwig, un septennat d'écart, 150 ans de réconciliation.
- Apports de la DFT et de la TD-DFT pour le calcul des propriétés optiques de catalyseurs inertes ou vivants.
- Autour de la détermination expérimentale et prédictive des propriétés radiatives.
- Modélisation 1D/3D du transfert radiatif dans les problèmes directs ou inverses en géométrie simple.

Programme Prévisionnel pour juillet 2024

Les journées 2023 à Clermont-Fd étaient centrées sur le couplage thermocinétique (linéaire et non linéaire) dans les photo-procédés, ainsi que sur les questions d'électromagnétisme permettant d'obtenir soit des propriétés radiatives de particules complexes ne vérifiant pas les relations de milieu homogène équivalent de type Maxwell-Garnett, soit le champ de vecteur de Poynting (formellement sa divergence ou la vitesse d'absorption du rayonnement) au sein de particules ou couches minces complexes également. Sur ce dernier point, diverses idées et stratégies ont émergé de façon très préliminaire et il semble intéressant de profiter encore cette année de la présence des collègues de l'Institut Fresnel pour battre le fer tant qu'il est chaud et essayer de converger vers un programme partagé collectivement, aussi bien sur les aspects théoriques qu'expérimentaux.

Pour mémoire, la partie du compte rendu 2023 relatif aux discussions autour des questions d'électromagnétisme est joint à ce programme. Il est facile de vérifier que nous avons évoqué en vrac :

- la possibilité de faire évoluer l'état de l'art du calcul des propriétés effectives d'un milieu composite complexe qui n'obéit pas aux conditions d'application de Maxwell-Garnett (ou de tout autre approximation en découlant) ;
- l'utilisation de l'approximation Quasi Cristalline (évoquée par JM Geffrin) pour les matériaux semi-conducteurs ?
- la réalisation de particules composites « modèle » par le PROMES qui pourraient également servir de modèle pour des mesures en analogie Micro-onde dans la chambre anéchoïque de l'Institut Fresnel ;
- l'utilisation de l'approximation de Schiff pour décrire les propriétés radiatives de particules complexes (à décrire comme telles lorsque l'utilisation de Maxwell-Garnett semble ne plus fonctionner) ;
- l'utilisation des dernières avancées du groupe EDStar sur les EDP afin d'attaquer les schémas de méthodes d'éléments finis de l'Institut Fresnel en espaces de chemins ;
- L'utilisation de ces approches en formulation intégrale directement sur la forme temporelle des équations de Maxwell (équation de D'Alembert) là ou elles ont montré leurs limites dans le domaine de Fourier (thèse de Julien Charon), à moins que de dernières avancées sur ce point rouvrent des perspectives...

La proposition d'un programme de discussion pour ces journées 2024 pourrait s'articuler autour des 3 points suivants (qui reprendront les questions laissées en suspend l'année dernière) :

- 1- Peut-on définir un plan d'attaque général et des exemples type de complexité croissante de particules (microalgues) vérifiant l'approximation de Schiff afin d'aller vers la résolution des propriétés radiatives de particules composites hétérogènes ne répondant pas aux conditions d'application de Maxwell-Garnett (milieu effectif) ?
- 2 Que faire pour le calcul des propriétés radiatives de semi-conducteurs de particules composites hétérogènes ou pour le calcul du champ de Poynting dans des couches

minces ne répondant pas aux conditions d'application de Maxwell-Garnett (étendre ces relations et comment ; trouver de nouvelles approximations, résoudre rigoureusement,...) ?

3- Comment aborder la question du calcul interne du champ de Poynting (à des particules ou couches minces) en milieu hétérogène afin d'évaluer la fraction du rayonnement incident absorbé par les zones participant à la réaction d'intérêt (séparation de charge versus dissipation thermique) ?

Il nous semble que dans l'idéal, cette année, nos échanges pourraient déboucher sur 2 projets de collaborations scientifiques clairs et bien posés impliquant des laboratoires centraux et des laboratoires différents selon leurs applications :

- un projet autour de matériaux complexes à faible contraste d'indice (micro-algues) ;
- un projet autour de matériaux à fort contraste d'indice (applications semi-conducteurs / photo-catalyseurs).

Enfin, dans la mesure où notre communauté passe souvent par une phase de validation des propriétés radiatives calculées (voire leur inversion) en les confrontant à des mesures de transmittances et réflectances en diffusion multiple sur des bancs optiques avec sphère d'intégration (commerciaux ou « fait maison »), nous proposons de débiter les journées par une courte présentation des dernières avancées à l'Institut Pascal sur ce sujet (thèse de Guillaume FOIN) avec un commentaire des abaques établis sur différents matériels permettant de définir le domaine de validité de l'utilisation de la définition 1D des transmittances et réflectances.

Détails Organisationnels

Lundi 8 juillet 2024

12 h : Accueil, *Lieu* : Institut Pascal, axe GePEB (Campus Universitaire des Cézeaux, Aubière). Puis, salle A008 à Polytech.

12h30 : **Plateau Repas sur le campus.**

14 h – 14 h 15 : **Présentation introductive des journées** (J.-F. Cornet).

14h15 – 15h : Présentation des conditions d'utilisation de bancs optiques en transmittance et réflectance (G. Foin ou T. Vourc'h)

15 h – 18 h30 : **Atelier Propriétés optiques effectives d'édifices photo-catalytiques complexes versus résolution des équations de Maxwell dans ces édifices**
(Lancement : J. Dauchet ; J.-F. Cornet)

18 h30 : **Migration vers l'hôtel**

20 h : **Repas en ville**

Mardi 9 juillet 2024

8 h 30 : Accueil, *Lieu* : Institut Pascal, axe GePEB (Campus Universitaire des Cézeaux, Aubière). Puis, salle A008 à Polytech.

9 h – 12 h : **Suite atelier Propriétés optiques effectives d'édifices photo-catalytiques complexes versus résolution des équations de Maxwell dans ces édifices**

13h : **Plateau Repas sur le campus.**

A partir de 14h30 : **Départ des participants.**