# Les enjeux de la R&D en chimie pour le domaine des carburants et des biocarburants

Sophie Jullian est directrice scientifique de l'IFPEN (Institut français du pétrole énergies nouvelles).

# 1 Le contexte énergétique

# 1.1. Les enjeux pour la planète et ses habitants

Notre société occidentale doit continuer à satisfaire les besoins et les usages auxquels elle ne saurait renoncer, dont la mobilité, tout en respectant les enjeux énergétiques abordés dans cet ouvrage et qui sont notamment:

- réduire la dépendance visà-vis des énergies fossiles et diversifier les ressources (mix énergétique);
- contrôler le réchauffement climatique et les rejets de gaz à effet de serre.

Et cela, malgré les prévisions peu optimistes, rappelées sur la *Figure 1*.

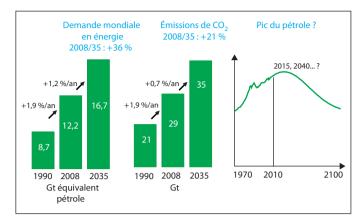
# 1.2. Les enjeux pour les transports

La demande énergétique liée à la mobilité est forte et restera en forte croissance ; elle est supérieure à la demande en électricité (*Figure 2*). Elle est fortement liée au PIB et a un impact élevé sur l'émission des gaz à effet de serre.

Par ailleurs, nous avons structuré nos sociétés occidentales autour d'une solution quasi unique basée sur les ressources fossiles : le pétrole et le charbon. Ce point essentiel est important dans la réflexion que nous devons mener pour mettre en place la transition et les mix énergétiques. Nous sommes habitués à raisonner avec cette solution unique alors que, comme il est montré dans le

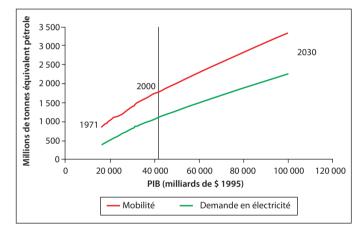
Les défis pour l'énergie.

Source : AIE WEO 2010, Nouvelles politiques



# Figure 2

Une demande en croissance forte pour la mobilité.



Chapitre P. Criqui, il n'y aura pas de solution unique pour l'avenir: la transition énergétique sera un mix.

Cela est particulièrement vrai dans le secteur des transports où l'on cumule les difficultés, par comparaison avec le secteur électrique où, grâce au charbon, le problème des ressources ne se posera pas dans les prochaines années et où les efforts seront essentiellement à réaliser dans les domaines suivants :

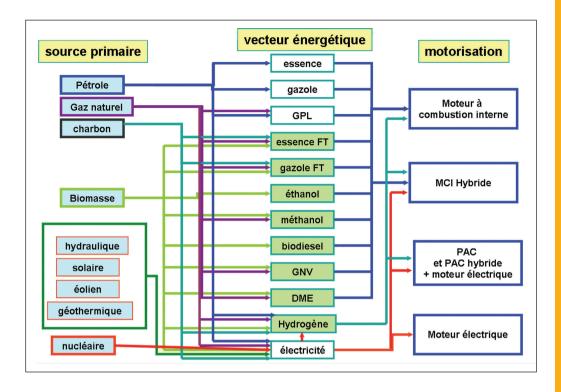
- dans le domaine de l'environnement pour limiter les émissions des centrales :
- dans les investissements qui représenteront la moitié

de la totalité du secteur énergétique.

Néanmoins, il faudra prendre en compte, dans la réflexion pour la France, la spécificité de notre parc électrique nucléaire et les investissements importants qui ont été réalisés. Le cas sera différent pour la Chine, dont l'électricité provient majoritairement du charbon, et pour laquelle le facteur à considérer sera l'impact important sur l'émission des gaz à effet de serre qui en résulte.

Dans le secteur des transports, les enjeux seront :

- diversifier les sources : charbon, gaz, biomasse...



- protéger l'environnement en réduisant les émissions de gaz à effet de serre  $(CO_2, CH_4, N_2O)$ et la pollution locale  $(CO, HC, NO_x, les particules, O_3)$ ;
- dans un souci d'efficacité, prolonger les ressources finies dans des conditions économiquement acceptables.

Quels seront les impacts qui en résulteront sur les technologies et la formulation des carburants? De multiples sources et filières énergétiques sont possibles dans le secteur des transports, et le mix variera d'un pays à l'autre; il n'y a pas une solution unique pour répondre aux besoins de la société future (Figure 3).

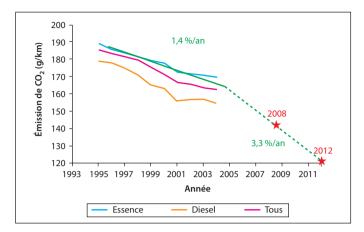
Il ne faut pas oublier que l'énergie que nous utilisons est essentiellement d'origine solaire, soit *via* la photosynthèse à travers la rupture de

la liaison moléculaire, soit via la création de la matière à travers la rupture des liaisons au sein de l'atome. Dans toutes les recherches de vecteurs énergétiques pour l'avenir, il faudra veiller à ne pas déplacer le problème vers l'amont ou vers l'aval, et se poser toujours la question de la source primaire et de sa disponibilité (Figure 3).

Pour ce qui concerne les problèmes environnementaux, il faut rappeler et tenir compte d'un principe de base de la thermodynamique : toute utilisation d'énergie, étant créatrice d'entropie, a un impact sur les écosystèmes : même l'énergie hydraulique a un impact sur les eaux de rivières, d'où l'importance de la sobriété énergétique, rappelée dans le Chapitre de J.-C. Bernier. Le mieux est donc de diminuer la consommation d'énergie si l'on

# Figure 3

De multiples sources et filières énergétiques sont possibles dans le domaine des transports.



Émissions moyennes de  ${\rm CO_2}$  dans l'Europe des quinze.

veut en minimiser les impacts (*Figure 4*).

Notre société actuelle est structurée sur la base d'une énergie facile, dense, peu coûteuse. mais nous devons maintenant revoir cette base. Comme il est montré dans le Chapitre de B. Bigot, à l'horizon 2050, nous utiliserions encore 50 % d'énergies fossiles. Mais si l'on veut que cette utilisation soit privilégiée d'abord dans les domaines où ces énergies sont le plus difficile à remplacer – c'est le cas du transport, et notamment des carburants liquides - , et si l'on veut abaisser l'impact de cette utilisation sur l'environnement, que ce soit pour des questions de gaz à effet de serre ou de pollution locale, nous aurons besoin de chimie pour réussir les évolutions nécessaires.

# 2 Les carburants : enjeux pour la R&D

# 2.1. Développer de nouvelles technologies

Nous aurons toujours besoin de carburants pour les transports dans les prochaines années. Les carburants liquides seront brûlés dans un moteur thermique, même si les moteurs hybrides se développent. Les schémas cinétiques de combustion devront être optimisés de façon à réduire les sources de pollution, éviter la formation de suie et les émissions de particules en sortie, etc.

Les carburants devront donc évoluer afin de permettre un fonctionnement optimal des technologies de combustion :

- le contexte réglementaire sur la qualité des carburants imposera des contraintes de formulation de plus en plus strictes ;
- les nouveaux modes de combustion imposeront la mise au point de formulations évoluées.
   Des solutions alternatives seront mises en place : gaz naturel, biocarburants, car-

burants synthétiques...

Des travaux importants à forte composante chimique devront être conduits pour produire des carburants de plus en plus propres et optimisés de facon à ce que la récupération d'énergie pour la mobilité soit la plus efficace possible. Pour concevoir ces nouveaux carburants à partir des sources traditionnelles, il faudra purifier les sources : les chimistes qui travaillent dans le domaine de la catalyse, de l'analyse, ainsi que les physico-chimistes, joueront un rôle majeur dans l'évolution des carburants traditionnels.

# 2.2. Réduire les sources de pollution

La désulfuration de l'essence et du diesel est un bon exemple de ce qui peut être réalisé. Les normes européennes ont beaucoup évolué dans ce domaine, y compris en ce qui concerne les fiouls de soute. Les teneurs en soufre des essences européennes sont maintenant limitées à 10 mg/kg (10 ppm). Cette contrainte a un fort impact sur les émissions en SO<sub>2</sub> et en H<sub>a</sub>S des véhicules. L'évolution des teneurs en soufre autorisées dans les essences en Europe est reportée sur la Figure 5A. Elle a nécessité une forte activité de R&D dans le domaine de la mise au point de catalyseurs et de procédés d'hydrotraitement pour la désulfurisation. Cet effort se poursuit puisau'on évolue vers des essences sans soufre.

Les contraintes sont identiques dans le cas du gazole. La *Figure 5B* montre que la teneur limite autorisée a été divisée par cinquante en quinze ans, pour être maintenant inférieure à 10 ppm.

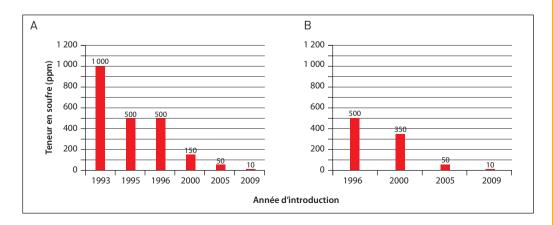
Ces contraintes sur les carburants ont eu une action bénéfique directe sur les émissions des véhicules : elles ont permis de diminuer la pollution sulfurique et la masse des particules émises. L'impact est aussi bénéfique sur le plan indirect puisque les carburants sans soufre diminuent l'empoisonnement des catalyseurs de postcombustion automobile (pots catalytiques) et donc améliore leur durabilité; ils réduisent notamment le taux d'amorçage et la désactivation, et la régénération est facilitée.

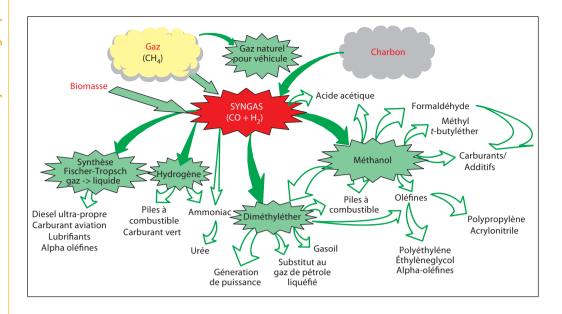
Une nouvelle gamme de catalyseurs permettant de respecter les nouvelles normes pour les essences a été mise au point en 2011. Dans la production de diesel et de kérosène, les progrès en activité et en stabilité des catalyseurs d'hydro-désulfurisation ont été considérables et permettent aussi de réduire le coût des opérations de raffinage.

Aujourd'hui, on observe une accélération des progrès en R&D grâce à la chimie computationnelle: on est aujourd'hui capable de concevoir, de représenter les molécules, de représenter les interactions entre atomes, et donc de regarder quelle est l'énergie nécessaire pour supprimer une liaison, en créer une autre, couper une liaison, raccrocher d'autres molécules... Ce qui permet d'évaluer plus rapidement la faisabilité de nouvelles réactions, de nouveaux catalyseurs et de nouveaux procédés.

# Figure 5

Évolution des teneurs en soufre autorisées en Europe dans les essences (A) et le gazole (B).





Chimie et filières alternatives en vue de diminuer les rejets de gaz à effet de serre.

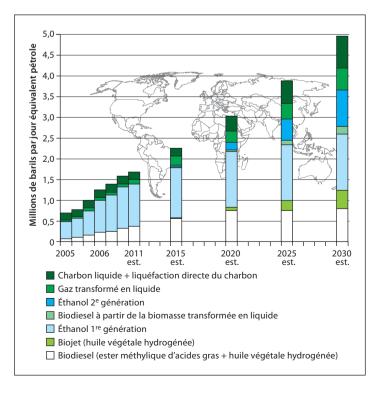
# 3 Les filières alternatives

L'enjeu du développement des filières alternatives dans le domaine du carburant est la diminution des gaz à effet de serre (Figure 6).

Les perspectives de développement du marché des carburants alternatifs sont illustrées sur la *Figure 7*. On s'attend à un accroissement de la demande de 8 à 9 % des carburants terrestres sur la base de la source primaire d'énergie,

### Figure 7

Perspectives du marché des carburants alternatifs. Source : Axens estimates, mai 2011.



d'ici 2013. Et si l'on prend en compte l'accroissement de la demande en carburant, cela pourrait atteindre 25 %.

# 3.1. Des perspectives pour les biocarburants

Les principales options possibles pour les biocarburants sont résumées dans l'*Encadré « Les principales options possibles de biocarburants »*.

# 3.2. Classement des biocarburants

Selon l'évolution des stratégies de recherche, les biocarburants ont été classés en générations.

### 3.2.1. Génération 1

La génération 1 est issue de plantes qui ont un contenu énergétique et sont facilement accessibles, puisque c'est en partie celles que nous utilisons pour nous nourrir (Figure 8). Comme largement décrit dans le Chapitre de J.-F. Rous. nous avons développé en France la fabrication des biodiesels surtout à partir de l'huile de colza. en utilisant une chimie traditionnelle basée sur des procédés catalytiques hétérogènes et homogènes, et des technologies de séparation et de distillation. En dehors de l'huile de colza, la matière première est en concurrence avec le marché de l'alimentaire, et le volume produit est limité, ce qui limite l'intérêt de ces biocarburants.

Par ailleurs, il faut veiller à ce que les procédés de transformation de la biomasse pour une fonction d'usage consomme le moins d'énergie possible, le bilan global de l'énergie disponible à l'issue

# LES PRINCIPALES OPTIONS POSSIBLES DE BIOCARBURANTS

### Les biocarburants liquides

Éthanol/ETBE (éthyle t-butyléther)

Huile végétale pure

Biodiesel: esters d'acides gras

Huile végétale hydrogénée (NexBtl...)

Biodiesel à partir de la biomasse transformée en liquide

Autres produits (bio butanol, DES...)

### Les biocarburants gazeux

Biogaz

DME (diméthyléther)

Η,

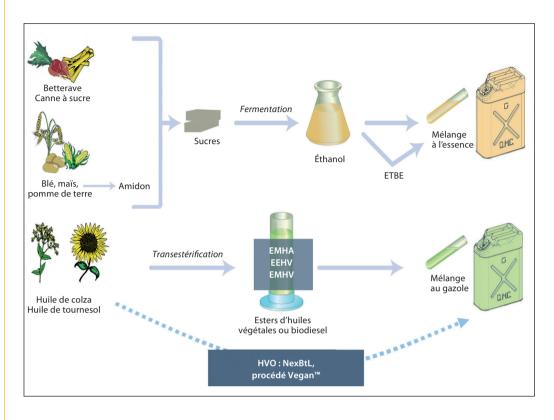
de la transformation devant rester positif.

### 3.2.2. Génération 2

La génération 2 est intéressante car elle se développe à partir des déchets, ceux du type ligno-cellulosique comme le bois, l'herbe, les résidus agricoles et forestiers, toute la biomasse dont le contenu énergétique est plus difficilement accessible pour l'alimentation humaine.

Deux voies sont utilisées pour leur transformation (*Figure* 9):

- la voie thermochimique utilise des procédés hautes températures permettant de séparer le carbone et l'hydrogène pour conduire à un mélange de gaz de synthèse ; ils sont ensuite recombinés en vue de reconstruire les molécules de carburants, comme dans un lego, à l'aide des synthèses de type Fischer Tropsch (voir le Chapitre de J.-F. Rous). Mais



Biocarburants de 1<sup>re</sup> génération : leur volume limité et ils entrent en concurrence avec le marché de l'alimentaire.

EMHA = ester méthylique d'huile animale ; EEHV = ester éthylique d'huile végétale ; EMHV = ester méthylique d'huile végétale ; HVO : huile végétale hydrogénée [hydrogenated vegetal oil].

Source: IFPEN.

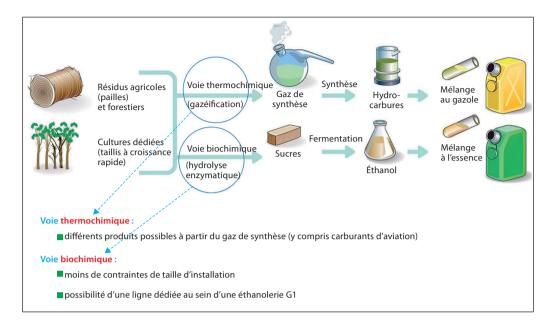
actuellement, le bilan énergétique n'est pas satisfaisant. Il y a des enjeux de recherche très importants pour rendre ces procédés de transformation de la matière moins coûteux en énergie : ces recherches porteront sur les catalyseurs, mais aussi sur l'amélioration des procédés (Figure 10);

- la voie biochimique basse température utilise la catalyse enzymatique pour transformer la biomasse en sucre qui, par fermentation, conduit à l'éthanol dit de deuxième génération (Figure 9). Cette voie pose moins de contraintes de tailles d'installations. Il faut cependant réaliser préalablement une hydroliquéfaction par pyrolyse pour séparer la lignine de la cellulose et de l'hémicellulose (Figure 11). La cellulose est ensuite hydrolysée en glucose via une réac-

tion de catalyse enzymatique; le glucose est transformé en méthanol par fermentation puis récupéré par distillation. L'hémicellulose issue cette voie peut être valorisée et transformée en qaz de synthèse.

Si l'on compare les différentes voies de production des biocarburants, les procédés biochimiques apparaissent plus intéressants car moins consommateurs en énergie.

Si nous établissons le bilan actuel, les biocarburants de première génération – utilisant le sucre, les céréales, les huiles végétales – ont permis, via des filières classiques, de fabriquer de l'éthanol et du biogaz utilisés dans les moteurs essence, ainsi que du biodiesel à partir d'huiles végétales hydrogénées, utilisé dans les moteurs diesels.

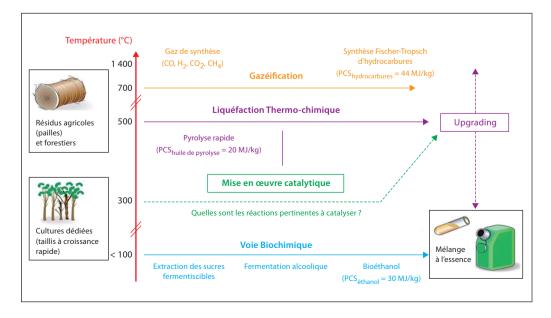


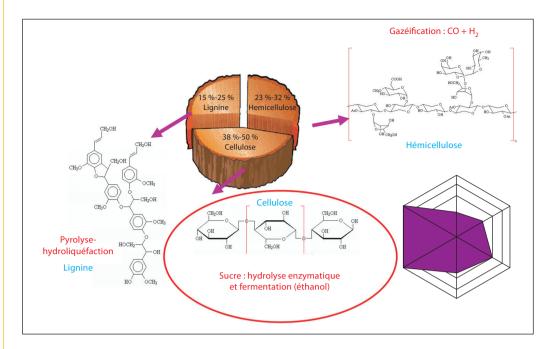
Les filières biocarburants de  $2^{\rm e}$  génération. Les deux voies pour la transformation de la biomasse lignocellulosique et les résidus agricoles et forestiers.

 ${\sf Source}: {\sf IFPEN}.$ 

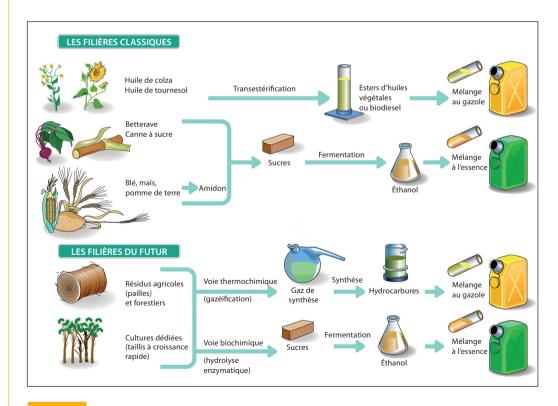
### Figure 10

Biocarburants de 2º génération. L'un des enjeux pour la chimie est d'abaisser les températures des procédés de transformation.





Éthanol de seconde génération : la voie biologique. Le procédé consiste en : un prétraitement pour isoler la cellulose, une hydrolyse (cellulose en glucose), une fermentation et une distillation.



### Figure 12

Ces biocarburants sont peu utilisables dans l'aviation. Les biocarburants de deuxième génération utilisant le bois et les déchets sont ceux dont les filières de production seront développées dans le futur [Figure 12] pour produire :

de l'éthanol, du bio-butanol, du biogaz et de l'hydrogène, utilisables dans les moteurs essences :

- du biodiesel à partir de la biomasse transformée en liquide (BtL), et du diméthyléther utilisable dans les moteurs diesel;
- de la BtL, de l'hydrogène et des alcools lourds utilisables dans l'aviation.

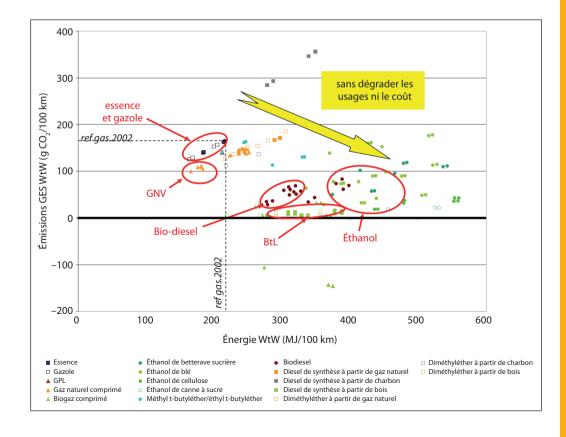
# Les défis scientifiques et techniques pour l'avenir des biocarburants

En plus des enjeux pour les chimistes évoqués dans ce chapitre et concernant la fabrication des biocarburants, il ne faut pas oublier d'autres enjeux directement liés à la question des matériaux pour alléger les véhicules et à

# Figure 13

Émissions du puits à la roue des carburants alternatifs en fonction de l'énergie consommée Un important défi scientifique et technique à relever pour les carburants.

Source : Étude EUCAR/JRC/ CONCAWE, 2005



la compatibilité de ces nouveaux matériaux (plastiques, métalliques, revêtements) avec les nouveaux carburants.

Pour tous ces différents points, notamment pour la nouvelle génération attendue de matériaux, il faudra prendre en compte le cycle de vie et les enjeux liés à la biodégradabilité et au recyclage. De nouvelles familles d'additifs pour améliorer la stabilité et éviter les encrassements devront être mis au point.

Par ailleurs, nous travaillons dans un contexte mondial et les solutions à trouver devront être partout applicables. La *Figure 13* permet de classer les carburants en fonction des deux paramètres importants dans les choix pour l'avenir : les émissions de CO<sub>2</sub> (de la source jusqu'à l'utilisation finale) et l'énergie consommée, qui doivent être le plus faible possible. Les enjeux fondamentaux à résoudre sont donc ambitieux, nombreux, complexes mais motivants, et ne pourront être atteints que par une approche internationale plurielle et innovante.