

5.0 crédits	30.0 h + 30.0 h	1q
-------------	-----------------	----

Enseignants:	De Wilde Juray (coordinateur) ; Bailly Christian ;
Langue d'enseignement:	Français
Lieu du cours	Louvain-la-Neuve
Préalables :	LFSAB1302 ou formation de base équivalente en chimie quantitative et thermodynamique.
Thèmes abordés :	<p>Le cours est subdivisé en deux parties.</p> <p>La première partie du cours se focalise sur la cinétique réactionnelle homogène. Les bases moléculaires de la cinétique chimique sont d'abord présentées, à savoir la théorie des collisions et la théorie du complexe activé. Ensuite viennent les réactions homogènes couplées et les réactions complexes, y compris leur modélisation. Le mécanisme réactionnel détaillé est pris en compte. Certaines réactions biochimiques et radicalaires en chaîne (notamment les oxydations, polymérisations et réactions explosives) sont étudiées à titre d'exemples importants.</p> <p>La deuxième partie se concentre sur les réactions hétérogènes. Sont d'abord présentés les aspects fondamentaux liés à la diffusion moléculaire et le couplage entre transfert de masse et cinétique chimique (notion de module de Thiele). Les phénomènes de transfert de chaleur et de masse à l'interface et au sein de la phase réactionnelle doivent être considérés et leur modélisation est abordée. Les questions liées à la désactivation des catalyseurs sont ensuite étudiées. Enfin, une introduction aux réactions gaz-solide et gaz-liquide est présentée. Les réactions de craquage et de conversion des hydrocarbures forment les exemples principaux pour cette partie.</p>
Acquis d'apprentissage	<p>Le cours vise à familiariser les étudiants avec la dimension cinétique des transformations physiques et chimiques de la matière, en particulier, le couplage entre la cinétique réactionnelle proprement dite et les phénomènes physiques de transfert ou l'adsorption. La connaissance de la vitesse de ces processus est en particulier fondamentale pour la modélisation des procédés industriels.</p> <p>Les objectifs principaux du cours sont</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>(i) une introduction aux bases moléculaires de la cinétique chimique et des processus de diffusion,</li> <li>(ii) l'identification des lois de vitesse dans les cas homogènes et hétérogènes sur la base des mécanismes réactionnels et diffusionnels</li> <li>(iii) la description des méthodes expérimentales et numériques utilisées pour y parvenir,</li> <li>(iv) l'étude des réactions catalytiques hétérogènes.</li> </ul> <p>Un certain nombre de réactions importantes au plan industriel sert à illustrer les concepts du cours.</p> <p><i>La contribution de cette UE au développement et à la maîtrise des compétences et acquis du (des) programme(s) est accessible à la fin de cette fiche, dans la partie « Programmes/formations proposant cette unité d'enseignement (UE) ».</i></p>
Modes d'évaluation des acquis des étudiants :	Examen à préparation écrite suivi éventuellement d'une défense orale.
Méthodes d'enseignement :	Cours magistraux, apprentissage par problèmes, apprentissage par exercices,
Contenu :	<p>Chapitre 1: Fondements de la Cinétique Réactionnelle (4h)</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>1.1 Rappels : Vitesses de Réaction et Expressions Cinétiques</li> <li>1.2 Théories Moléculaires de la Vitesse : Théorie des Collisions</li> <li>1.3 Théories Moléculaires de la Vitesse : Théorie du Complexe Activé</li> <li>1.4 Réactions Couplées</li> <li>1.5 Réduction de la Taille des Modèles Cinétiques</li> <li>1.6 Cinétique des Réactions Biochimiques</li> <li>1.7 Réactions Complexes</li> <li>1.8 Modélisation du Coefficient Cinétique</li> </ul> <p>Chapitre 2: Cinétique des Réactions Radicalaires en Chaîne (8h)</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>2.1 Introduction</li> <li>2.2 Réactions en Chaînes Radicalaires Droites</li> <li>2.3 Exemples : Oxydation Lente des Hydrocarbures, Cinétique de Linde-Bodenstein</li> <li>2.4 Cinétique de Polymérisation Radicalaire</li> <li>2.5 Réactions en Chaînes Ramifiées</li> </ul> <p>Chapitre 3 : Diffusion et Réaction (4h)</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>3.1 Approche Microscopique de la Loi de Fick</li> </ul>

	<p>3.2 Equation de la Diffusion                  3.3 Introduction à la Diffusion dans les Mélanges Complexes                  3.4 Réactions Chimiques avec Limitation Diffusionnelle                  3.5 Module de Thiele                  Chapitre 4: Cinétique des Réactions Catalytiques Hétérogènes (2h)                  4.1 Introduction                  4.2 Adsorption sur des Catalyseurs Solides                  4.3 Expressions Cinétiques                  4.4 Réactions Catalytiques Complexes                  Chapitre 5: Phénomènes de Transport avec des Réactions Catalysées par un Solide (4h)                  PARTIE I EFFETS DES GRADIENTS INTERFACIAUX                  5.1 Réaction d'un Composant d'un Fluide à la Surface d'un Solide                  5.2 Résistances de Transfert de Masse et de Chaleur                  5.3 Différences de Pression, Concentration et Température Entre Fluide et Surface de Catalyseur                  PARTIE II EFFECTS DES GRADIENTS INTRAPARTICULES                  5.4 Diffusion Moléculaire, Knudsen, et de Surface dans des Pores                  5.5 Diffusion dans une Particule de Catalyseur                  5.6 Diffusion et Réaction dans une Particule de Catalyseur.                  Un Modèle de 'Continuum'                  5.7 Falsification des Coefficients Cinétiques et des Energies d'Activation par Limitations Diffusionnelles                  5.8 Influence des Limitations Diffusionnelles sur la Sélectivité des Réactions Couplées                  5.9 Critères pour l'Importance des Limitations Diffusionnelles Intraparticules                  Chapitre 6: Désactivation des Catalyseurs (3h)                  6.1 Types de Désactivation de Catalyseur                  6.2 Cinétique de 'Catalyst Poisoning'                  6.3 Cinétique de Désactivation des Catalyseurs par Formation de Coke                  Chapitre 7: Introduction aux Réactions Gaz-Solide et Gaz-Liquide (3h)                  7.1 Introduction                  7.2 Discussion Qualitative des Réactions Gaz-Solide                  7.3 Modèle Général tenant compte des Gradients Interfaciaux et Intraparticules                  7.4 Modèle Hétérogène à 'Shrinking Unreacted Core'                  7.5 Modèles de Transfert à une Interface Gaz-Liquide                  7.6 Two-Film Theory                  7.7 Surface Renewal Theory</p>
Autres infos :	Supports: Transparents du cours sur i-campus Gilbert F. Froment, Kenneth B. Bischoff, et Juray De Wilde, "Chemical Reactor Analysis and Design", 3th edition, Wiley, 2010. R.W Missen, C.A. Mims, B.A. Saville, « Introduction to Chemical Reaction Engineering and Kinetics », Wiley
Cycle et année d'étude :	<a href="#">&gt; Bachelier en sciences de l'ingénieur, orientation ingénieur civil</a> <a href="#">&gt; Bachelier en sciences de l'ingénieur, orientation ingénieur civil</a>
Faculté ou entité en charge:	FYKI