

5.00 crédits	52.5 h	Q1
--------------	--------	----

Enseignants	Gaigneaux Eric ;
Langue d'enseignement	Français
Lieu du cours	Louvain-la-Neuve
Préalables	Aucun prérequis nécessaire. Les contenus des cours LBRNA2103 ' Chimie des solides et LBRNA2102 ' Caractérisation de la surface des matériaux, ou de cours équivalents, sont cependant utiles pour les volets B et C.
Thèmes abordés	Le cours donne une vue d'ensemble complète de la catalyse, en particulier la catalyse hétérogène. Les familles de catalyseurs et de procédés catalytiques sont passées en revue en les positionnant dans le contexte des procédés industriels relevant de la pétrochimie, la chimie fine, la protection de l'environnement (épuration de l'air et de l'eau) et de la conversion de la biomasse. Sont ensuite présentés les principes qui régissent l'efficacité d'un catalyseur, d'abord en décrivant les étapes élémentaires de l'acte catalytique, puis en abordant les grandes lois cinétiques remises dans le contexte des différents types de mécanismes catalytiques. Les principales méthodes de préparation de catalyseurs hétérogènes sont finalement abordées, en distinguant catalyseurs massiques et supportés, et mentionnant les aspects relatifs au saut d'échelle (« scaling-up ») de ces méthodes.
Acquis d'apprentissage	<p>A la fin de cette unité d'enseignement, l'étudiant est capable de :</p> <p>a. <u>Contribution de l'activité au référentiel AA (AA du programme)</u> 1.2, 1.4 2.2, 2.3, 2.4 3.5, 3.6, 3.7 4.1, 4.2, 4.3, 4.4, 4.5</p> <p>b. <u>Formulation spécifique pour cette activité des AA du programme (maximum 10)</u> Au terme de cette activité, l'étudiant est capable de :</p> <ul style="list-style-type: none"> - expliquer l'impact d'un catalyseur sur les différentes grandeurs et caractéristiques (enthalpie, énergie libre, constante d'équilibre, chemin réactionnel, etc) reflétant une réaction chimique - décrire le fonctionnement d'un catalyseur dans une réaction chimique donnée en le repositionnant par rapport aux grands mécanismes catalytiques et leurs étapes élémentaires. - déduire les rôles des différents (co-)réactifs (et éventuellement des produits) dans un mécanisme catalytique, - prévoir l'impact des variations de conditions opératoires (température, pression, concentrations, etc) sur les performances (conversion, sélectivité, spécificité, durée de vie, résistance à la désactivation, etc) d'un procédé catalytique, - et proposer les co-réactifs et conditions permettant d'optimiser ces dernières ; - déduire les rôles des différents éléments (atomes, clusters, phases cristallines, etc) constituant la formulation d'un catalyseur dans une réaction chimique donnée, et proposer des voies d'amélioration. - discriminer spécificité et sélectivité (dont leurs différentes variantes dites « de forme ») d'un système catalytique, et proposer différentes approches de préparation d'un catalyseur permettant d'améliorer ces indicateurs de performance ; - proposer une méthode, et préciser les conditions et réactifs (au sens large) à utiliser, permettant de préparer un catalyseur répondant à un cahier des charges donné (composition de masse et de surface, texture, structure, étage d'oxydation des éléments, performances, etc).
Modes d'évaluation des acquis des étudiants	Examen écrit à livre ouvert couvrant systématiquement l'ensemble des AA annoncés pour le cours.
Méthodes d'enseignement	Cours magistral avec usage d'un powerpoint disponible sur Moodle en début d'enseignement. Une interaction constante avec les étudiants est établie sous la forme de questions-réponses les entraînant dans des débats à charge et à décharge sur des questions spécifiques, ceci leur permettant d'intégrer la matière en cours de séance. Des études de cas soit d'intérêt général (le pot catalytique automobile) ou plus spécifique (exemples de recherche de pointe) sont aussi effectués.
Contenu	BLOC 1 ' Introduction, Historique et Généralités

INTRODUCTION : Objectif du cours / Connexion avec la chimie des solides / Définition de la catalyse hétérogène / Champ d'application des catalyseurs

HISTORIQUE : Les débuts de la catalyse hétérogène / Les 1ères idées / Les 1ères applications / Le démarrage de la catalyse moderne / Les travaux de Sabatier / Les descendants de Sabatier / Les applications modernes / La situation actuelle

GENERALITES : Qu'est ce qu'un catalyseur ? / Grandes catégories de catalyseur (catalyse homogène ' biocatalyse - catalyse hétérogène) / Comparaison et complémentarité homogène vs hétérogène / Pourquoi la catalyse est importante (atom efficiency, facteur, facteur EQ)

BLOC 2 ' Principes fondamentaux

CATEGORIES DE CATALYSEURS HETEROGENES : Catalyseurs massiques / Catalyseurs supportés / Catalyseurs malaxés-agglomérés

MORPHOLOGIE D'UN CATALYSEUR HETEROGENE : Grain-micrograin-particule / Structuration / Notions de dispersion

PRINCIPES DE PREPARATION DES CATALYSEURS HETEROGENES : principales opérations pour la préparation de catalyseurs massiques / principales opérations pour la préparation de catalyseurs supportés

ETAPES DE LA REACTION CATALYTIQUE HETEROGENE : Rappel ' Etapes ' Dépendance avec la température / Diffusion (importance de la diffusion - diffusion externe vs diffusion interne - conséquences des limitations diffusionnelles - se prémunir des limitations diffusionnelles) / Adsorption (importance de l'adsorption - importance de la chimisorption) / Mécanismes réactionnels (modèle monomoléculaire de Langmuir - modèles bimoléculaires de Langmuir-Hinshelwood, d'Eley-Rideal et de Mars-van Krevelen) / Connexion avec la chimie des solides / Connexion avec le génie des procédés

BLOC 3 ' Catalyse environnementale, le cas de la catalyse automobile

BESOINS SOCIETAUX : Pollueurs & polluants / Challenges de la catalyse / Champs d'application

CONTEXTE DE LA CATALYSE AUTOMOBILE : Quelques chiffres / Composition des gaz d'échappement (essence vs diesel) / Normes

REACTIONS A REALISER : les 3 voies / effet du rapport air/fuel / notions de richesse « Lambda » et de Schlater / Effet de Lambda / Rester dans la bonne fenêtre de Lambda / Sonde Lambda

LE CATALYSEUR : Composition typique / Variantes / Causes de désactivation

OXYDATION DU CO : NO = poison, CO aussi / Mécanisme de Langmuir Hinshelwood / Effet de l'ajout de cérine

OXYDATION DES HC ET ALCOOLS : Light-off et T50 / Ajoût de cérine / Mécanisme / Complications (1. effet dynamique - 2. réactions à la vapeur d'eau et réactions connexes steam reforming, le water gas shift, le procédé PROX, le hydrocarbon steam reforming)

REDUCTION DES NOx : CO+NO / NO+H2 / Mises en défaut (1. amélioration moteurs ' 2. passage au diesel) / Vers le NOx-trap (1. Procédé Toyota ' 2. Particules et suies)

BLOC 4 ' Synthèse de catalyseurs hétérogènes

GENERALITES & RAPPELS - CATALYSEURS SUPPORTES

IMPREGNATIONS SANS INTERACTION PRECURSEUR-SUPPORT : Imprégnation capillaire (principe - caractéristiques et problématiques - mises en 'uvre industrielles) / Imprégnation diffusionnelle (principe - durée d'imprégnation)

IMPREGNATIONS AVEC INTERACTION PRECURSEUR-SUPPORT : Echange ionique (principe - types d'échangeurs ioniques - point isoélectrique- dissolution du support - échange ionique simple, avec piégeage, par réaction acide base, multiple ou compétitif ' limites) / Greffage (principe - greffage sur support - prérequis - greffage sur métal) / Dépôt-précipitation (principe)

BLOC 5 ' Catalyseurs biomimétiques

POINT DE DEPART : Réactions impliquant l'O2 dans le vivant / Enzymes et respiration / Le centre hème et les enzymes d'oxydation / Spécificité et sélectivité


VERS LES CATALYSEURS BIOMIMETIQUES : copier le centre hème : exemples / désactivation / 1^{er} et 2nd problèmes à résoudre

SOLUTIONS : 1^{ère} solution (picket fence) / 2^{nde} solution (encapsulation : principe - zéolithes - exemples ship in the bottle et performances)

CONCLUSIONS

En fonction du temps disponible et de l'intérêt des étudiants, des BLOCS sont abordés sous la forme d'étude de cas plus pointues (niveau recherche) d'environ 2 heures chacun ; les thèmes sont sélectionnés parmi entre autres - Dynamique des catalyseurs hétérogènes, - Optimisation de formulations catalytiques : système Bi-V-Sb-O, - Abatement de composés organiques volatiles souffrés sur MnO2, - Réactivité des oxydes mixtes Sb-Re-O en oxydation sélective, - Abatement des polluants aromatiques chlorés de l'air.

Ressources en ligne	Les notes de cours utilisées par l'enseignant constituent un syllabus, et sont mises à disposition sur la plateforme Moodle avant le début du cours ; leur impression est vivement recommandée.
Bibliographie	Comme support de cours facultatif : Fundamentals of industrial catalytic processes (2nd edition) de C.H. Bartholomew and R.J. Farrauto (Wiley-Interscience, 2006), ISBN : 0-471-45713-2
Autres infos	Ce cours peut être donné en anglais.
Faculté ou entité en charge:	AGRO

Programmes / formations proposant cette unité d'enseignement (UE)				
Intitulé du programme	Sigle	Crédits	Prérequis	Acquis d'apprentissage
Master de spécialisation en nanotechnologies	NANO2MC	5		
Master [120] : bioingénieur en chimie et bioindustries	BIRC2M	5		