

DOCTORAT DE L'UNIVERSITE DE LILLE 1 SCIENCES ET TECHNOLOGIES

N° d'ordre : 41773

NOM/PRENOM DU CANDIDAT : OLIVEIRA DE SOUZA/DANILO

Ecole doctorale : 104 – Science de la Matière, du Rayonnement et de l'Environnement

Laboratoire : Unité de Catalyse et Chimie du Solide (UCCS)

Discipline : Chimie

Si cotutelle, établissement partenaire :

JURY :

- Directeur(s) de thèse : CRISTOL, Sylvain (co-encadrante : Christine LANCELOT)
- Rapporteurs : Arnaud TRAVERT, Valérie BRIOIS
- Examineurs : Virginie MOIZAN-BASLE, Hervé VEZIN

SOUTENANCE : 15/7/2015 à 14h30 au CERLA

TITRE DE LA THESE :

Quick-EXAFS et catalyseurs d'hydrotraitement : apports de la chimiometrie

RESUME :

L'hydrodésulfuration (HDS) est un procédé catalytique utilisé pour éliminer le soufre des carburants. La demande mondiale de carburants propres a stimulé les recherches sur autour de ce procédé afin de mieux comprendre les mécanismes réactionnels et de produire des catalyseurs plus efficaces. Deux axes de recherches peuvent être dégagés: d'une part la formulation de nouvelles voies de synthèse permettant la production des catalyseurs plus efficaces et d'autre part la compréhension du processus catalytique au niveau moléculaire. La compréhension des transformations structurales du catalyseur au niveau moléculaire pendant la réaction ainsi que pendant la genèse de la phase active est une nécessité pour améliorer les propriétés des catalyseurs. Dans ce contexte, ce travail propose deux objectifs. En premier lieu, il présente nouvelle méthode de synthèse de catalyseurs d'HDS à base de CoMo supporté dans TiO₂ par voie sol-gel. Dans un deuxième temps, le travail présente la mise-en-œuvre de la chimiometrie pour traiter des données in situ de spectroscopie d'absorption de rayons-X (XAS) qui permet d'obtenir des informations sur la structure moléculaire du catalyseur pendant son activation. Les installations synchrotron de dernière génération permettent en effet d'enregistrer des données expérimentales avec résolution temporelle de l'ordre de la seconde (Quick-EXAFS) et la chimiometrie fournit des outils d'analyse et d'interprétation pour extraire des informations sur les cinétiques de réaction et sur les transformations structurales menant à la formation de la phase active du catalyseur.