

Madame Amira DJAAFRI

Spécialité "Chimie theorique, physique, analytique - UCCS"

Soutiendra publiquement ses travaux de thèse intitulés

Analyse de l'échange isotopique en Résolution Temporelle pour identifier les étapes rapides de réactions en catalyse hétérogène

dirigés par Monsieur Christophe DUJARDIN

Soutenance prévue le **mardi 09 décembre 2025** à 10h00

Lieu : École Nationale Supérieure de Chimie de Lille - ENSCL Villeneuve d'Ascq, 59650

Salle : Amphithéâtre petit école de chimie ENSCL

Composition du jury proposé

M. Christophe DUJARDIN	Centrale Lille Institut	Directeur de thèse
Mme Céline CHIZALLET	IFP énergies nouvelles	Rapporteure
M. Arnaud TRAVERT	Laboratoire catalyse et spectrochimie (LCS), université de Caen	Rapporteur
M. Fabien CAN	Institut de Chimie des milieux et des matériaux de Poitiers (IC2MP), Université de Poitiers	Examineur
Mme Mélissandre RICHARD	Centrale Lille, Unité de catalyse et chimie du solide	Co-encadrante de thèse
Mme Isabelle DE WAELE	Université de Lille, Laboratoire de spectroscopie pour les interactions, la réactivité et l'environnement	Examinatrice

Mots-clés : Catalyse hétérogène, Cinétique, Spectroscopie IR, Echange isotopique,

Résumé :

L'objectif de cette thèse est de proposer et valider une nouvelle méthodologie permettant d'élucider les mécanismes réactionnels en catalyse hétérogène par l'étude des étapes élémentaires les plus rapides. Ce travail repose sur le couplage inédit entre l'analyse de l'échange isotopique transitoire à l'état stationnaire (SSTIE) et la spectroscopie infrarouge operando résolue en temps (modes rapid-scan et step-scan). La faisabilité du couplage a d'abord été démontrée sur la réaction modèle d'oxydation du CO sur Pt/Al₂O₃, puis appliquée à la réduction du NO par le CO sur Ag/Al₂O₃, permettant d'évaluer la performance temporelle et la sensibilité de la méthode. Enfin, cette approche a été appliquée à l'hydrogénation du CO₂ en méthanol sur Cu/ZrO₂. Les déconvolutions des spectres infrarouges ont permis d'isoler et de suivre la dynamique des espèces carbonatées et formiates adsorbées à la surface. Les constantes cinétiques associées à ces espèces ont été déterminées, révélant la forte réactivité des formiates liés au cuivre, identifiés comme les intermédiaires clés dans la formation du méthanol. Ce travail met en évidence la pertinence du couplage SSTIE-IR résolue dans le temps comme outil expérimental pour relier directement la dynamique des espèces de surface aux phénomènes cinétiques en catalyse hétérogène. Mots-clés : Catalyse hétérogène / Mécanisme réactionnel / Echange isotopique/ Spectroscopie IR résolue en temps / Step-scan