

DIPLÔME NATIONAL DE DOCTORAT

(Arrêté du 25 mai 2016)

Date de la soutenance : **06 mars 2024**

Nom de famille et prénom de l'auteur : **Madame FAYAD Rita**

Titre de la thèse : « *Modélisation dynamique et étude expérimentale du transfert de matière d'ions métalliques et de leurs interactions avec les charges de surface à l'intérieur de structures poreuses de γ -alumine* »



Résumé

La demande mondiale pour des carburants plus propres est en croissance continue, ce qui contraint l'industrie du raffinage de pétrole à concentrer ses efforts sur l'optimisation des procédés d'hydrotraitement. Ceci est réalisé en utilisant des catalyseurs, qui sont principalement des sulfures métalliques supportés sur de l'alumine gamma, de plus en plus actifs et sélectifs. La première étape de la préparation de ces catalyseurs consiste en la déposition de la phase active sur l'alumine par imprégnation. Les phénomènes physicochimiques régissant l'imprégnation ont un impact direct sur les propriétés des catalyseurs et la compréhension de ces phénomènes est donc très importante.

Dans ce travail, une méthodologie qui combine la modélisation dynamique et une étude expérimentale est proposée pour évaluer les phénomènes physicochimiques expliquant les interactions de l'alumine avec l'eau et/ou les solutions d'imprégnation. Deux modèles sont développés pour les interactions des protons avec l'alumine : i) en absence de précurseurs de phase active, et ii) en présence de nickel comme précurseur. Les modèles tiennent compte de la contribution des charges des espèces en solution et sur la surface des pores sur la diffusion intra-granulaire et la distribution des espèces à l'interface liquide/solide. Les

interactions compétitives des protons et du nickel avec la surface hétérogène de l'alumine sont décrites durant l'imprégnation. Les résultats des modèles sont étayés par des données expérimentales collectées durant des expériences d'adsorption en mode batch et continu. La surface du solide est caractérisée à l'aide d'une nouvelle technique LIBS, qui apporte des informations significatives sur la compétition entre les protons et le nickel.

Les modèles peuvent prédire avec précision l'évolution temporelle et les profils de distribution spatiale des concentrations de toutes les espèces dans les phases liquides extra-granulaire et intra-granulaire, ainsi que dans la double couche électrique formée à l'interface liquide/solide. L'effet de l'adsorption sur la charge de surface est représenté. De plus, la spéciation des sites OH sur la surface de l'alumine et les mécanismes d'adsorption des protons et du nickel sont déterminés. Ces modèles peuvent être utilisés comme outils prédictifs pour guider les fabricants de catalyseurs d'hydrotraitement sur la manière de choisir les conditions d'imprégnation.