HABILITATION A DIRIGER DES RECHERCHES

Date de la soutenance : **30 septembre 2022**

Nom de famille et prénom de l'auteur : **Madame NIKITINE Clémence**

Titre de la thèse : *« Catalyseurs structurés et études cinétiques pour des applications en réacteurs multifonctionnels »*

Résumé

L'objectif est de développer des réacteurs multifonctionnels utilisant des catalyseurs structurés. Pour cela, il est souvent nécessaire d'effectuer des études à différentes échelles :

- A l'échelle du grain de catalyseur pour optimiser la phase active et modéliser la réaction chimique
- A l'échelle de l'objet structuré afin de caractériser et modéliser les phénomènes physiques : hydrodynamique et transfert de matière et de chaleur
- A l'échelle du réacteur pour étudier les couplages réaction/séparation ou réaction/échange de chaleur et développer et caractériser des réacteurs multifonctionnels.

Mon activité de recherche, autour de 3 axes qui reprennent les 3 échelles précédemment citées :

- **Etude en réacteur conventionnel** (ballon, autoclave ou lit fixe) réalisées lors de différents projets permettent de manière générale : 1/ Le criblage de catalyseurs d'un point de vue de l'activité catalytique, l'évaluation de la désactivation, de la qualité des dépôts sur structure et du leaching éventuel, 2/ L'acquisition de données pour de la détermination des modèles cinétiques nécessaire à la modélisation des réacteurs catalytiques

- **Etude en « maquette » non réactive :** La structuration d'un objet catalytique en lui donnant une forme innovante va impacter l'hydrodynamique des réacteurs où ils seront introduits. Par exemple, des structures de type mousses à cellules ouvertes vont générer des faibles pertes de charge puisque leur porosité est importante (> 90 %) et des géométries originales (à la place de sphères classiquement utilisées) peuvent entrainer des empilements aléatoires générant une forte dispersion radiale. Ainsi, la compréhension et la caractérisation des écoulements au sein de lits de ces nouvelles structures est fondamentale avant d'envisager les performances en milieu réactif. Plusieurs études ont été menées sur la caractérisation expérimentale de l'hydrodynamique 1/ dans des empilements de forme originale pour augmenter les performances des lits fixes industriels et 2/dans une colonne de distillation de laboratoire avec des mousses métalliques comme internes.

- **Etude de réacteurs multifonctionnels :** Dans certains cas, l'optimisation catalytique tant au niveau micrométrique (grain de catalyseur) que millimétrique (objet catalytique) ne permettent pas d'améliorer les performances des réacteurs pour diverses raisons : réaction limitée par la thermodynamique, dégradation des produits, impossibilité de travailler en régime chimique, exothermicité trop forte… Ainsi, pour intensifier les procédés, il est nécessaire de développer des réacteurs multifonctionnels (ou hydrides) qui couplent (ou découplent) dans un même équipement des processus élémentaires : transfert – réaction – séparation pour accroître la productivité et/ou la sélectivité en produit désiré ou pour faciliter la séparation. Ainsi, une partie de mes travaux se porte sur le développement du procédé de distillation réactive, couplant ainsi réaction et séparation dans une même unité. L'objectif est la valorisation des acides carboxyliques issus de la transformation de la biomasse. Leur récupération et purification est complexe. En effet, leur fonctionnalité particulière rend difficile leur séparation en phase aqueuse, or les milieux issus de la valorisation de la biomasse sont très dilués. L'un des verrous, outre la réactivité lors de l'estérification est la présence d'eau pour des raisons thermodynamiques et/ou de stabilité des catalyseurs notamment hétérogènes.