

V.1-Mécanismes et modèles

Dans la catalyse hétérogène, les réactifs réagissent à la surface du catalyseur solide (grains fins ou solides poreux) en s'adsorbant à la paroi catalytique. Les produits de la réaction ainsi formés, se désorbent dans la phase fluide qui sert de réservoir pour les réactifs et les produits.

Dans *la catalyse hétérogène* : réactifs et catalyseur dans des phases différentes :

Catalyseur solide réactifs gazeux, liquides ou en solution ; Représente $\approx 95\%$ des procédés industriels (facilité de séparation) ;

Catalyseur hétérogène = métal (oxyde) + support (+ promoteur)

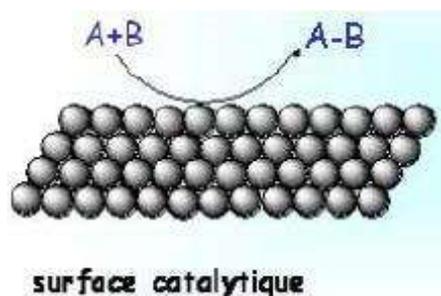


Fig V.1 : Catalyse hétérogène

V.1.1-Théorie et mécanisme de la catalyse hétérogène

Pour pouvoir comprendre le mode d'action de la catalyse, il est nécessaire d'expliquer le mécanisme élémentaire électronique qui se situe à l'interface gaz- solide. L'adsorption des réactifs et la désorption des produits constituent les stades initiaux et finaux de toute réaction catalytique hétérogène.

V.1.2-Mécanismes élémentaires en catalyse hétérogène

Balandin considère que dans une réaction catalytique hétérogène il y a six étapes consécutives, il admet que les processus élémentaires sont indispensables au déroulement de la réaction (Figure V.2).

- 1)- Diffusion des réactifs vers la surface du catalyseur.
- 2)- L'orientation des molécules réagissantes dans le « champ » de la surface du catalyseur.
- 3)- L'adsorption chimique d'un ou plusieurs réactifs à la surface du catalyseur.
- 4)- La réaction chimique entre les molécules adsorbées.
- 5)- La désorption des produits de la réaction.
- 6)- La diffusion des produits formés loin de la surface du catalyseur.

Les étapes 1 et 5 et 6 sont des processus physiques de transfert de masse qui sont régis par les différentes lois de diffusion de Fick [5], alors que les étapes 2, 3 et 4 sont des processus régis par la cinétique chimique [6]. (Voir Figure. V.2)

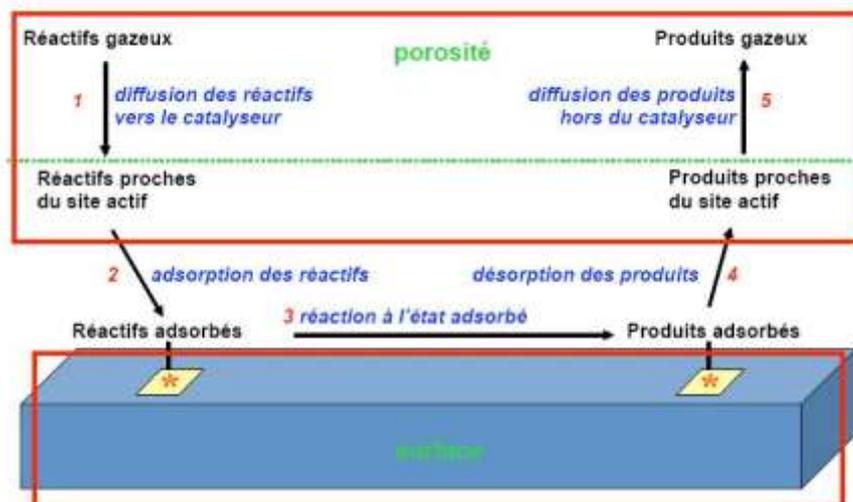


Fig.V.2 : Schéma du mécanisme réactionnel

1. La diffusion des réactifs et des produits

La diffusion est un processus physique qui tend à égaliser les concentrations. Comme c'est à la surface du catalyseur que les molécules des réactifs disparaissent le plus vite, donc c'est à cet endroit que leur concentration est la plus faible. Les lois de Fick de diffusion permettent de calculer le flux des molécules de réactifs.

En pratique, les grains des catalyseurs possèdent une porosité interne accessible aux réactifs, donc on distingue deux diffusions : **extragranulaire et intragranulaire**.

a- La diffusion extragranulaire

Le grain de catalyseur est entouré d'une couche laminaire immobile plus ou moins épaisse que le réactif doit franchir pour accéder à la surface externe du grain, ce film est appelé couche limite et s'oppose au passage des molécules de réactifs et provoque une diminution de la concentration selon la loi de Fick, le flux de réactif au travers de cette couche limite est proportionnel à la différence de concentration ($C_h - C_s$), où C_h : concentration du fluide en phase homogène C_s : concentration à la surface externe du catalyseur.

b- Diffusion intragranulaire

Cette diffusion a lieu dans les pores du catalyseur, elle permet aux molécules de réactif d'accéder à la surface interne, elle peut se dérouler suivant plusieurs mécanismes selon la dimension des pores du catalyseur : diffusion moléculaire ou diffusion de KNUDSEN si le diamètre moyen des pores est de l'ordre de grandeur du libre parcours moyen des molécules.

2. L'adsorption des réactifs

Lorsque les réactifs arrivent au voisinage de la surface du catalyseur, ils réagissent avec la surface catalytique en s'adsorbant pour donner naissance à de nouvelles espèces chimiques plus réactives. Ces espèces réactives réagissent entre elles suivant un processus réactionnel énergiquement plus favorable que celui impliqué dans le cas d'une simple activation thermique. Le processus d'adsorption se déroule en deux étapes : adsorption physique et adsorption chimique.

a- Adsorption physique

Les forces mises en jeu pour attirer les molécules vers la surface du catalyseur sont de type de Vander –Waals. Elles se caractérisent par une chaleur d'adsorption plus faible.

b- Adsorption chimique

Elle conduit à la formation, entre la surface du solide et la molécule adsorbée, des liaisons covalentes du même type que celles qui lient entre les atomes d'une molécule. Elle est soumise aux lois conventionnelles de la thermodynamique et de la cinétique.

Les atomes adsorbés à la surface du catalyseur ne restent pas figés à la surface. Si la température devient suffisante, ils activent en acquérant une certaine mobilité à la surface et la réaction chimique en déroule.

4. Désorption des produits

Les produits de la réaction ainsi formés doivent quitter la surface catalytique pour laisser place aux réactifs de s'adsorber. La désorption est un phénomène inverse de l'adsorption.