

Analyse cinétique de mécanisme réactionnels en catalyse hétérogène par le couplage SSITKA/IR résolu dans le temps

Encadrant du stage : Mélissandre Richard

Laboratoire de rattachement et lieu du stage : UCCS équipe ReMCat (Bât C3 –Cité Scientifique)

Durée du stage : (6 mois) Début mars 2022

Financement : Projet ANR JCJC - TRAIE (AAPG 2021)

Gratification : ~ 600 €/mois

Description de l'offre

En catalyse hétérogène, l'observation des surfaces catalytiques et la discrimination des sites actifs et espèces intermédiaires sont indispensables pour concevoir de nouveaux catalyseurs capables d'atteindre des conversions et sélectivités plus élevées. Cependant l'existence d'étapes élémentaires de réaction très rapides et difficilement observables (*spillover*, *flip* de molécule, désoxygénation, etc.) reste aujourd'hui une limite à notre compréhension complète de ces mécanismes.

La combinaison innovante des techniques **SSITKA** (*Steady State Isotopic Transient Kinetic Analysis*) et **spectroscopie IRTF** (*InfraRouge à Transformée de Fourier*) résolu dans le temps nous aidera à lever ces verrous scientifiques pour comprendre en profondeur les mécanismes d'oxydation catalytique. Lors de ce stage, l'étude des étapes élémentaires des réactions d'oxydation du CO et du CH₄ sera entreprise sur des catalyseurs Pt et Pd respectivement, supportés sur l'alumine, afin d'établir des relations pertinentes entre les sites actifs et la réactivité des catalyseurs d'identifier ainsi les différentes voies des mécanismes de réaction. L'étude pourra être complétée par un traitement poussé des résultats IR via des analyses PSD (*Phase Sensitive Detection*). Les catalyseurs seront caractérisés par diverses techniques : physisorption N₂, ICP-OES, XRF, TPR-H₂, thermodésorption de molécules sondes suivie par IR, etc.

Candidature recherchée

Étudiant(e) présentant un fort intérêt pour l'étude des mécanismes catalytiques. Des connaissances en cinétique hétérogène et/ou spectroscopie infrarouge seront appréciées. Vous devrez être capable d'acquérir rapidement des connaissances techniques et mettre en place une réflexion approfondie sur les résultats obtenus. Étudiant(e) dynamique, organisé(e), faisant preuve d'un excellent relationnel et d'un bon rédactionnel.

Contacts : Pour postuler, merci d'envoyer votre CV, une lettre de motivation ainsi que vos notes de Master avant le **17/12/2021** par mail à : Mélissandre RICHARD (ReMCat-UCCS), melissandre.richard@centralelille.fr

Kinetic analysis of reaction mechanisms in heterogeneous catalysis by SSITKA/ time resolved IR coupling

Supervisor: MéliSSandre Richard

Laboratory and location: UCCS ReMCat team (Bât C3 -Cité Scientifique)

Duration: (6 months) Beginning of March 2022

Funding: ANR JCJC project - TRAIE (AAPG 2021)

Gratification: ~ 600 €/month

Description of the offer

In heterogeneous catalysis, the observation of catalytic surfaces and the discrimination of active sites and intermediate species are essential to design new catalysts capable of achieving higher conversions and selectivity. However, the existence of elementary reaction steps that are very fast and difficult to observe (spillover, molecule flip, deoxygenation, etc.) remains a limit to our complete understanding of these mechanisms.

The innovative combination of SSITKA (Steady State Isotopic Transient Kinetic Analysis) and time-resolved FTIR (Fourier Transform Infrared) spectroscopy will help us to overcome these scientific barriers to a thorough understanding of catalytic oxidation mechanisms. During this internship, the study of the elementary steps of the CO and CH₄ oxidation reactions will be undertaken on Pt and Pd catalysts respectively, supported on alumina, in order to establish relevant relationships between the active sites and the reactivity of the catalysts and thus identify the different pathways of the reaction mechanisms. The study can be completed by further processing of the IR results via a PSD (Phase Sensitive Detection) analysis. Catalysts will be characterized by various techniques: N₂ physisorption, ICP-OES, XRF, H₂-TPR, thermodesorption of probe molecules followed by IR, etc.

Candidate

Student with a strong interest in the study of catalytic mechanisms. Knowledge of heterogeneous kinetics and/or infrared spectroscopy will be appreciated. A person who is able to quickly acquire technical knowledge and to reflect on the results obtained. Dynamic, organized student with excellent interpersonal skills and good writing skills.

Contact details: To apply, please send your CV, a cover letter and your Master's grades before December 17th, 2021 by email to MéliSSandre RICHARD (ReMCat-UCCS) melissandre.richard@centralelille.fr