

De nouveaux procédés de conversion efficaces nécessiteront des catalyseurs entièrement nouveaux, des catalyseurs plus actifs et plus sélectifs, préférentiellement des catalyseurs constitués des éléments abondant à bon marché. Dans le présent travail, nous allons montrer

l'application des méthodes théoriques de la mécanique quantique pour la bonne connaissance

et compréhension des phénomènes catalytiques hétérogènes, qui ouvrent des opportunités à un

choix rationnel des matières catalytiques basé sur une ingénierie computationnelle. Cette thèse

a été structurée pour couvrir trois axes de la catalyse hétérogène : catalyse métallique, bimétallique et par oxydes mixtes, comme ils représentent une classe dominante des catalyseurs

industriels