



Rédigé le 26 juillet 2023



3 minutes de lecture

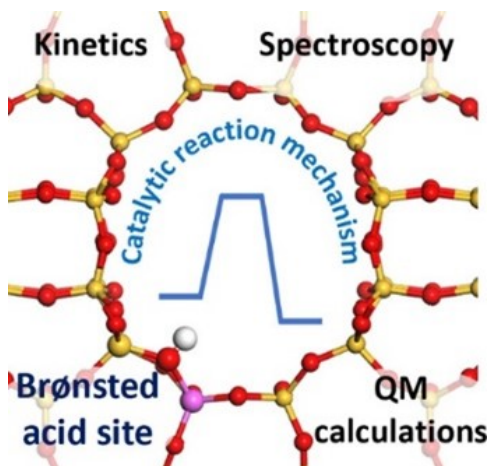


Actualités

Recherche fondamentale

Cinétique de la catalyse et des réactions

Des chercheurs de la direction Catalyse, Biocatalyse et Séparation d'IFPEN ont récemment publié un état de l'art sur les transformations catalysées par les zéolites acides de Brønsted. Parue dans la revue *Chemical Reviews*, cette somme de connaissances illustre l'implication croissante d'IFPEN dans la transition énergétique et écologique.



Publication d'un état de l'art

Paru dans le numéro spécial [Bridging the Gaps: Learning from Catalysis across Boundaries](#) de la revue *Chemical Reviews*, l'article<sup>1</sup> présente un panorama de l'état actuel des connaissances sur **les mécanismes des réactions catalysées par les zéolites acides de Brønsted**. Ce sujet fait l'objet d'importants efforts de recherche de la part de la communauté scientifique depuis des décennies et nombreuses en sont les applications possibles.

Cette publication, outre son intérêt pratique pour les acteurs de l'innovation en chimie et procédés, illustre l'implication d'IFPEN sur des enjeux de recherche essentiels pour la transformation de l'industrie rendue nécessaire par les impératifs climatiques.

Elle traduit également la reconnaissance des équipes IFPEN par la communauté scientifique internationale.

### La catalyse : un domaine de la chimie au cœur de la transition écologique et énergétique

Au centre de la R&I d'IFPEN, la catalyse est régulièrement à l'honneur avec [des chercheuses et chercheurs primés pour leurs travaux](#). Elle offre de nombreux bénéfices pour un futur énergétique plus durable. Ainsi, **elle abaisse les énergies d'activation requises pour initier des réactions chimiques et améliorer leur vitesse et leur sélectivité** (réduction de la formation d'autres molécules/déchets). Elle facilite par ailleurs **la production biosourcée de carburants et d'intermédiaires chimiques**. Elle intervient aussi dans les procédés qui permettent de **convertir le CO<sub>2</sub> en carburant**.

### Un point de vue moléculaire original

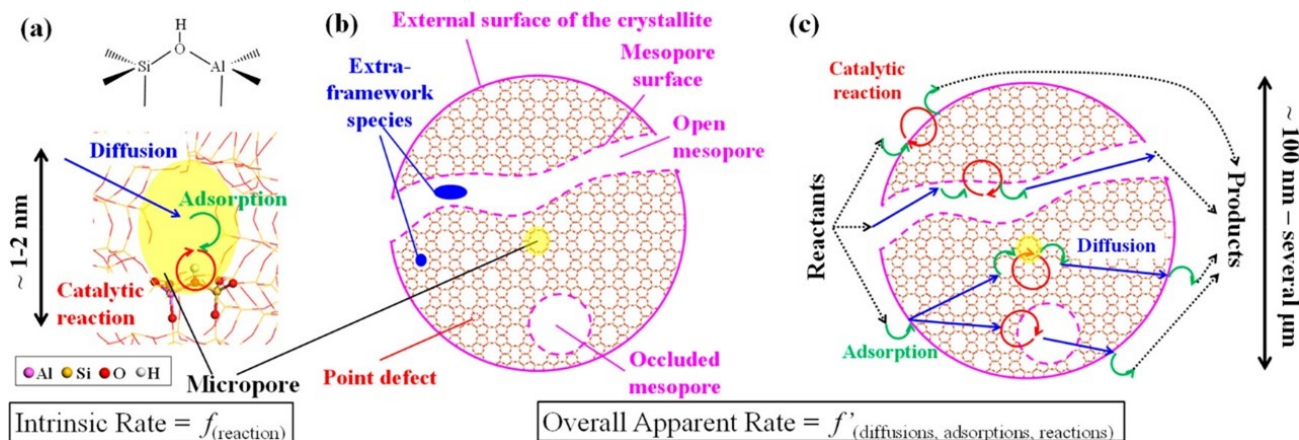
Pour dresser un état de l'art des connaissances sur le sujet, les auteurs ont adopté un point de vue moléculaire original, en rassemblant à la fois des approches expérimentales et computationnelles. Les éléments rapportés émanent ainsi de plusieurs types de techniques : **études cinétiques détaillées, spectroscopies *in situ* et *operando*, calculs de chimie quantique**.

Ces travaux couvrent notamment l'identification des intermédiaires et des états de transition pertinents, ainsi que la cinétique respective de leur formation et de leur transformation en produits.

### Une caractérisation fine des sites et des phénomènes à l'œuvre

Dans le domaine de la catalyse par zéolites, la question de la structure, de l'emplacement et de l'accessibilité des sites actifs se pose systématiquement et cet aspect est largement abordé, en apportant des éléments de compréhension sur **la nature et l'acidité des possibles sites actifs** ainsi que sur le rôle des différents phénomènes à l'œuvre : **adsorption, diffusion, cinétique réactionnelle**.

La figure ci-dessous esquisse les concepts les plus pertinents en la matière, lesquels sont importants pour comprendre les approches entreprises, les connaissances obtenues jusqu'à présent et les défis restants pour comprendre **les mécanismes catalysés par les zéolites sous leur forme protonique**.



(a) Modèle de zéolite acide de Brønsted, limitée au micropore, en tenant compte des étapes de diffusion, d'adsorption et de réaction. (b) Schéma représentant les défauts et la nature de taille finie d'une cristallite de zéolite complexe. Un modèle sphérique est choisi arbitrairement. (c) Intégration de la diversité des sites et des étapes pour la définition de la vitesse de réaction apparente. Copyright 2023 American Chemical Society

## Des réactions d'intérêt pour les applications industrielles

Une grande partie du document est consacrée à la description des mécanismes à l'échelle atomique pour des réactions d'une grande importance au niveau industriel, telles que :

- la transformation d'alcènes, d'alcanes, de molécules aromatiques ;
- des réactions de déshydratation d'alcools et de molécules polyhydroxylées ;
- des réactions de carbonylation ;
- des réactions impliquées dans la transformation du méthanol en oléfines.

### Référence :

(1) Chizallet C., Bouchy C., Larmier K., Pirngruber G. (2023). *Molecular Views on Mechanisms of Brønsted Acid-Catalyzed Reactions in Zeolites*, Chem. Rev. 2023, 123, 9, 6107–6196 30, 2023, <https://doi.org/10.1021/acs.chemrev.2c00896>

Contact scientifique : Céline Chizallet

## VOUS SEREZ AUSSI INTÉRESSÉ PAR

La catalyse hybride peut s'alimenter en biosourcé

Catalyseurs plus performants : des chercheurs d'IFPEN élucident le mécanisme de formation de défauts dans les zéolithes

De nouvelles zéolithes acides à partir de silicogermanates

L'acidité de Brønsted dans les zéolithes passée au crible

26 juillet 2023

Lien vers la page web :