
Etude DFT de la décomposition d'un modèle de lignine catalysée par platine

Romain Reocreux*¹

¹Laboratoire de Chimie (LC) – CNRS : UMR5182, École Normale Supérieure (ENS) - Lyon – Ens de Lyon, Site Jacques Monod - 46 allée d'Italie - 69364 Lyon cedex 07, France

Résumé

La lignine est un des polymères les plus abondants de la biomasse. Sa structure riche en noyaux aromatiques présente un intérêt pour des applications en chimie fine et dans la chimie des carburants. Malgré tout, elle ne peut pas être utilisée comme telle : il faut la dépolymériser de façon sélective en molécules de plus petite masse molaire tout en conservant les cycles aromatiques. Même si beaucoup de catalyseurs ont déjà été testés, les étapes élémentaires de décomposition sont encore mal connues. Pour mieux comprendre les enjeux de réactivité, nous nous sommes intéressés à la décomposition du 2-phénoxyéthanol sur une surface de Pt(111). L'étude de ce modèle du lien bêta-O-4 de la lignine s'insère dans une approche couplant des expériences de science des surfaces (université d'Ottawa) et des calculs DFT (ENS de Lyon). Nous rapportons ici les premiers résultats théoriques concernant l'interaction et la réactivité du 2-phénoxyéthanol sur Pt(111). Pour rendre compte des interactions de dispersion, nous avons utilisé la fonctionnelle non-locale optPBE. Nous avons alors montré que le 2-phénoxyéthanol s'adsorbe avec le groupement phényl parallèle à la surface et qu'il établit une interaction particulière impliquant le groupement hydroxy et la surface. Comme l'énergie d'adsorption est de -2,01 eV par molécule, les réactions de décomposition sont plus faciles que la désorption. C'est ce que l'on peut conclure des recherches de chemins de décomposition (impliquant des recherches d'états de transition) et des expériences de Désorption Programmée en Température réalisées à l'université d'Ottawa.

Mots-Clés: DFT, optPBE, lignine, biomasse, Pt(111), réactivité

*Intervenant