



COMMUNIQUÉ DE PRESSE NATIONAL | PARIS | 07 OCTOBRE 2015

Concevoir plus rapidement de meilleurs catalyseurs

C'est une étape clé vers des véhicules à hydrogène démocratisés, des pots catalytiques plus efficaces, des usines plus propres... Des chercheurs ont mis au point une méthode simple et rapide pour améliorer l'efficacité d'une famille de catalyseurs, ces composés, indispensables à l'industrie, qui facilitent les réactions chimiques. Cette avancée est le fruit d'une collaboration entre chimistes théoriciens du Laboratoire de chimie de l'ENS de Lyon (CNRS/ENS de Lyon/Université Claude Bernard Lyon 1) et de l'université de Leiden (Pays-Bas), et chimistes expérimentateurs de l'université technique de Munich et de l'université de la Ruhr à Bochum (Allemagne). Leurs travaux sont publiés dans la revue *Science* le 9 octobre 2015.

Les catalyseurs sont des substances ou des matériaux qui, par leur interaction avec des réactifs, minimisent l'énergie nécessaire aux réactions chimiques et favorisent la formation des produits désirés. L'industrie chimique en dépend presque entièrement, et il en résulte un surplus commercial estimé à 50 milliards d'euros en Europe¹. Au-delà de l'aspect économique, les dispositifs catalytiques tels que ceux embarqués dans les pots d'échappement des véhicules diminuent l'impact polluant des moteurs à combustion. En outre, si peu de voitures équipées de piles à hydrogène² ont été lancées sur le marché alors qu'elles n'émettent pas de gaz à effet de serre, c'est notamment parce que les catalyseurs de piles à combustible ne sont pas encore véritablement au point s'agissant de leur fonctionnement dans la durée. Développer des catalyseurs plus efficaces est donc un enjeu de taille.

Les catalyseurs sont souvent constitués de petites particules métalliques de quelques nanomètres de diamètre. Leur efficacité dépend de leur taille, de leur forme et de leur composition chimique. Jusqu'à présent, pour améliorer un catalyseur, les chimistes n'avaient à leur disposition qu'un indice : la force d'interaction optimale entre le réactif et le catalyseur. Ensuite, ils devaient procéder par tâtonnement, faute de relation entre cette valeur et la structure que devaient présenter les particules de catalyseur pour l'atteindre. Il leur fallait passer en revue de grandes bases de données à la recherche des meilleurs candidats, puis tester de nombreuses possibilités de structure du matériau jusqu'à parvenir à la force d'interaction adéquate.

Aujourd'hui, une équipe internationale de chimistes a mis au point une nouvelle approche, permettant de déterminer la structure optimale du site catalytique (site d'interaction entre le catalyseur et le réactif), pour un catalyseur de composition chimique donnée (par exemple, du platine). Et cette approche repose sur un

¹ Source : Chlorine Industry Review 2012-2013. Euro Chlor, Belgium, 2013. www.eurochlor.org.

² Un véhicule à hydrogène combine moteur électrique et production d'électricité dans une pile à combustible à partir d'une source de dihydrogène et du dioxygène de l'air. Jusqu'à présent, l'efficacité des piles à combustible est limitée par celle de la réaction de réduction du dioxygène, pour laquelle les catalyseurs ne sont pas encore assez performants.

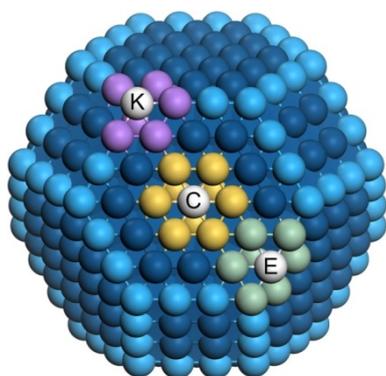


concept chimique simple : le nombre de coordination, qui désigne le nombre de voisins d'un atome appartenant au catalyseur et qui se calcule simplement en les décomptant. En effet, les chercheurs ont montré qu'il existe une relation entre l'activité d'un site catalytique et ce nombre de coordination (voir figure).

Ils ont ensuite validé expérimentalement cette approche en concevant un nouveau type de catalyseur au platine pouvant être utilisé dans les piles à combustible. L'efficacité maximale a été prédite pour des sites avec un nombre de coordination plus élevé que pour le catalyseur de référence, c'est-à-dire situés dans une cavité creusée dans la surface de platine. Après avoir créé des cavités sur une surface modèle de platine par trois méthodes différentes, les résultats ont été sans appel : l'efficacité catalytique a été multipliée jusqu'à 3,5 fois.

Ces travaux devraient donc permettre de diminuer les temps de développement de catalyseurs. Ils ouvrent la voie au développement de piles à combustible commercialement performantes, à une utilisation plus large de l'hydrogène comme carburant propre et plus généralement, à terme, à l'optimisation de nombreux processus industriels.

Cette étude conjointe a bénéficié du soutien d'un contrat européen du FP7 (2007-2013) via sa cellule FCHJT (contrat n°303419, PUMA MIND), de la Netherlands Organization for Scientific Research (projet Veni n°722.014.009), du Cluster d'excellence RESOLV (EXC 1069) financé par la Deutsche Forschungsgemeinschaft, de la Helmholtz-Energie-Allianz (HAE-0002), du Sonderforschungsbereich 749 (SFB 749) et du Cluster d'excellence « Nanosystems Initiative Munich ».



Nanoparticule de catalyseur contenant différents types de sites. Les nombres de coordination sont, pour le site C (au centre d'une face hexagonale) 9 voisins jaunes [6 autour dans la facette et 3 en dessous] ; pour le site E (sur une arête entre deux faces hexagonales) 7 voisins verts [6 autour et 1 dessous] ; pour le site K (en coin entre 3 faces) : 6 voisins violets [5 autour et 1 dessous]. Les atomes sur les arêtes et sur les faces sont représentés en bleu clair et bleu foncé respectivement. Chaque site contribue différemment à l'activité catalytique totale en vertu de son nombre de voisins. (Il faut en fait prendre en compte à la fois les voisins directs et les voisins de ces voisins.)

© D. Loffreda – CNRS/ENS Lyon.



www.cnrs.fr



Finding optimal surface sites on heterogeneous catalysts by counting nearest neighbors, Federico Calle-Vallejo, Jakub Tymoczko, Viktor Colic, Quang Huy Vu, Marcus D. Pohl, Karina Morgenstern, David Loffreda, Philippe Sautet, Wolfgang Schuhmann, Aliaksandr S. Bandarenka. *Science*, 9 octobre 2015.
DOI : 10.1126/science.aab3501

Contacts

Chercheur CNRS | Philippe Sautet | T 04 72 72 81 55 / 06 15 09 68 36 | philippe.sautet@ens-lyon.fr
Presse CNRS | Véronique Etienne | T 01 44 96 51 37 | veronique.etienne@cnrs-dir.fr