

Mesure de l'acidité des matériaux par l'approche des molécules sondes en RMN solide

Auteur : Scholzen, Pascal

Promoteur(s) : Job, Nathalie

Faculté : Faculté des Sciences appliquées

Diplôme : Master en ingénieur civil en chimie et science des matériaux, à finalité spécialisée

Année académique : 2017-2018

URI/URL : <http://hdl.handle.net/2268.2/4550>

Avertissement à l'attention des usagers :

Tous les documents placés en accès ouvert sur le site le site MatheO sont protégés par le droit d'auteur. Conformément aux principes énoncés par la "Budapest Open Access Initiative"(BOAI, 2002), l'utilisateur du site peut lire, télécharger, copier, transmettre, imprimer, chercher ou faire un lien vers le texte intégral de ces documents, les disséquer pour les indexer, s'en servir de données pour un logiciel, ou s'en servir à toute autre fin légale (ou prévue par la réglementation relative au droit d'auteur). Toute utilisation du document à des fins commerciales est strictement interdite.

Par ailleurs, l'utilisateur s'engage à respecter les droits moraux de l'auteur, principalement le droit à l'intégrité de l'oeuvre et le droit de paternité et ce dans toute utilisation que l'utilisateur entreprend. Ainsi, à titre d'exemple, lorsqu'il reproduira un document par extrait ou dans son intégralité, l'utilisateur citera de manière complète les sources telles que mentionnées ci-dessus. Toute utilisation non explicitement autorisée ci-avant (telle que par exemple, la modification du document ou son résumé) nécessite l'autorisation préalable et expresse des auteurs ou de leurs ayants droit.

Probe molecule acidity measurements of Y zeolites by ^{31}P solid state NMR

Scholzen Pascal, Master student in Chemical and Materials engineering

Supervisors: ANDREEV Andrey (TOTAL Research & Technology Feluy), JOB Nathalie (ULiège)

Academic year 2017-2018

Abstract: The use of solid state (SS) 15 kHz Magic Angle Spinning (MAS) NMR of the ^{31}P nucleus of trialkylphosphine oxides (R_3PO) probe molecules is an easy and safe approach for the characterization of the SiOHAl - bridge Brønsted acid sites of ultra-stable Y (USY) zeolites, necessary for the catalysis of hydrocracking processes. This technique is able to differentiate the Brønsted acid sites from Lewis acid sites, to detect their location using probes of a different size, to identify their strengths based on the chemical shift in the spectrum and to determine the concentration of each acid site. The different USY zeolites to be analyzed are obtained by a more or less severe dealumination treatment and the Si/Al ratio becomes 6 (CBV712), 15 (CBV720) and 30 (CBV760), whereas the microporous structure is not altered. With TMPO, TEPO and TBPO, three probe molecules with various fusion and evaporation temperature, a different basicity and especially a distinct size are used, all found out to have their advantages and disadvantages. TMPO and TEPO distinguish 4 different Brønsted acid sites, while only 2 are recognized during the analysis with TBPO, because it is considered not to enter the supercages in the microstructure. For more strongly dealuminated zeolites, a lower acid site concentration is measured and except for CBV712 with a very low mesoporosity, TBPO detects the most acid sites, despite its big size, due to a strong basicity and probing of the sites from outside the pores. Acid site strength from weak to relatively strong are measured, but no significant difference in between the zeolites is detected. There are some perspectives of research that will be done in the future based this work. The measured values and the observed tendencies are compared with the results of different other methods, like IR analysis with probe molecules and TPD of ammoniac. The method has been developed for the analysis of three different USY zeolites but can also be adapted for the acidity analysis of plenty other zeolites.