

DOCTORAT DE L'UNIVERSITE DE LILLE 1 SCIENCES ET TECHNOLOGIES**N° d'ordre : 42406****NOM/PRENOM DU CANDIDAT : IBANEZ ABAD, Javier**

Ecole doctorale : Ecole Doctorale Sciences de la Matière, du Rayonnement et de l'Environnement (EDSMRE)

Laboratoire : UCCS

Discipline : Chimie

Si cotutelle, établissement partenaire :

JURY :

- Directeur(s) de thèse : Sébastien PAUL, Marc PERA TITUS
- Rapporteurs : Dmitry Yu. MURZIN, Marco DATURI
- Examineurs : Franck DUMEIGNIL, Anne PONCHEL, Maarten K. SABBE

SOUTENANCE : 15/11/2017,14h, Ecole Centrale de Lille, Villeneuve d'Ascq**TITRE DE LA THESE :****Développement de nouveaux catalyseurs hétérogènes sélectifs pour l'amination directe des alcools****RESUME :**

Les amines sont des composés utilisés dans de nombreux secteurs de l'industrie chimique et dont, au vu d'études récentes, la demande devrait augmenter dans les années à venir. À cet égard, le développement de technologies efficaces et écologiquement responsables pour leur production est nécessaire pour notre société. La transformation des alcools en amines via le mécanisme « d'emprunt d'hydrogène » (*borrowing hydrogen*) apparaît comme une voie performante et durable.

Ce travail se concentre sur le développement de nouvelles formulations de catalyseurs hétérogènes permettant de synthétiser de manière sélective des amines primaires à partir d'alcools et d'ammoniac. Deux formulations bimétalliques supportées sur alumine ont été développées à partir d'une stratégie séquentielle de criblage intensif et d'optimisation des catalyseurs. Ces formulations montrent d'excellentes activité et sélectivité vers l'amine primaire ciblée: la *n*-octylamine.

Finalement, un modèle cinétique a été développé sur la base des données expérimentales collectées. Il permet de bien rendre compte de l'ensemble complexe de réactions en cascade du mécanisme.

DOCTORAT DE L'UNIVERSITE DE LILLE 1 SCIENCES ET TECHNOLOGIES**N° order: 42406****NAME/SURNAME OF THE CANDIDATE: IBANEZ ABAD, Javier**

Doctoral School : Ecole Doctorale Sciences de la Matière, du Rayonnement et de l'Environnement (EDSMRE)

Laboratory : UCCS

Discipline : Chemistry

In case of co-tutorial thesis, provide the partner institution :

THESIS COMMITTEE :

- Thesis supervisor(s) : Sébastien PAUL, Marc PERA TITUS
- Referees : Dmitry Yu. MURZIN, Marco DATURI
- Examiners : Franck DUMEIGNIL, Anne PONCHEL, Maarten K. SABBE

DEFENSE : 15/11/2017,14h, Ecole Centrale de Lille, Villeneuve d'Ascq**TITLE OF THE THESIS :****Development of Novel Heterogeneous Selective Catalysts for the Direct Amination of Alcohols****ABSTRACT :**

Amines are important building blocks for many fields of the chemical industry and, according to recent studies, their demand is foreseen to increase over the following years. In this regard, the development of efficient and ecologically responsible technologies for their production is necessary for our society. The transformation of alcohols into amines via the so-called *borrowing hydrogen* mechanism stands out as an efficient and ecological route.

This work centers its efforts on the development of novel heterogeneous formulations for the selective synthesis of amines from alcohols and ammonia via a sequential screening and optimization of monometallic and bimetallic supported catalysts. Two bimetallic formulations supported on alumina have been developed showing excellent activity and selectivity towards the targeted primary amine: the *n*-octylamine.

Finally, a kinetic model has been developed on the basis of the experimental data collected. It correctly predicts the reaction rates of the complex ensemble of cascade reactions of the mechanism.