Etude expérimentale et théorique de la combustion d'hétérocycles issus de la biomasse

Description en français :

Ce projet s'inscrit dans le cadre d'une collaboration établie lors du BQR 2022, Recherche en Réseau, entre l'Université de Bourgogne Franche Comté (Laboratoire DRIVE, Nevers) et l'Université de Lille (Laboratoire PC2A, Villeneuve d'Ascq). Son objectif est d'obtenir les données requises pour le développement de mécanismes réactionnels décrivant la dégradation de molécules issues de la biomasse. Ce processus est rendu très complexe notamment en raison de la diversité structurale et de la présence d'hétéroatomes.

Le stage proposé est donc une première contribution à des défis scientifiques majeurs sur la réactivité de ces structures au moyen d'outils de la chimie quantique. La maîtrise des contraintes énergétiques et des barrières cinétiques correspondantes passe par une compréhension globale des phénomènes et interactions en jeu au niveau moléculaire.

Il est attendu lors de ce stage, après une analyse détaillée de la littérature, de caractériser la réactivité à haute température d'une série d'hétérocycles aromatiques et non aromatiques. Une attention particulière sera portée aux réactions de transfert d'un atome d'hydrogène par les espèces actives déterminantes dans la chimie des flammes. Il conviendra pour ces réactions de s'appuyer sur les théories cinétiques appropriées pour générer les constantes de vitesse des réactions élémentaires dans un large domaine de température et de pression.
Les travaux qui se dérouleront au laboratoire DRIVE, Université de Bourgogne Franche Comté, à Nevers, devraient déboucher sur une thèse. Il est à souligner que des déplacements de courte durée au laboratoire PC2A peuvent être envisagés.

Mots clés : tube à choc, simulations moléculaires, biomasse, environnement.

Durée du stage : 5 mois

Gratification nationale de stage : 3,90 euros par heure

Responsables : Benoîte Lefort (DRIVE) / Sonia Taamalli (PC2A)

Tél : 03.86.71.50.66 Email : benoite.lefort@u-bourgogne.fr

Tél : 03.62. 26.88.46 Email : sonia.taamalli@univ-lille.fr

Experimental and theoretical study of the combustion of heterocycles from biomass

Description in English:

This project is part of a collaboration established during BQR 2022, Network Research, between the University of Burgundy (DRIVE Laboratory, Nevers) and the University of Lille (PC2A Laboratory, Villeneuve d'Ascq). Its objective is to provide the required data for the development of reaction mechanisms describing the degradation of molecules from biomass. This process is made very complex, in particular because of the structural diversity and the presence of heteroatoms. The proposed internship is therefore a first contribution to major scientific challenges on the reactivity of these structures using quantum chemical tools. Mastering the energy constraints and the corresponding kinetic barriers requires a comprehensive understanding of the phenomena and interactions involved at the molecular level.

It is expected during this internship, after a detailed analysis of the literature, to characterize the reactivity at high temperature of a series of aromatic and non-aromatic heterocycles. Particular attention will be paid to the transfer reactions of a hydrogen atom by the determining active species in the chemistry of flames. It will be appropriate for these reactions to rely the appropriate kinetic theories to generate the rate constants of the elementary reactions in a wide range of temperature and pressure, the main molecular properties and the macroscopic quantum values (internal energy, enthalpy and Gibbs free energy).

The work that will take place at the DRIVE laboratory, University of Burgundy, in Nevers, should lead to a thesis. It should be noted that short trips to the PC2A laboratory may be considered.

Keywords: shock tube, molecular simulations, biomass, environment.

Duration of the internship: 5 months

National internship gratuity: 3.90 euros per hour

Supervisors : Benoîte Lefort (DRIVE) / Sonia Taamalli (PC2A)

Tél : 03.86.71.50.66 Email : benoite.lefort@u-bourgogne.fr

Tél : 03.62. 26.88.46 Email : sonia.taamalli@univ-lille.fr