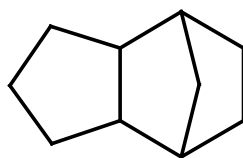


Modélisation de la combustion du tricyclo [5.2.10^{2,6}] décane (THCPD)

Date limite de dépôt des dossiers : 16/03/2018

Le Groupe de Cinétique Radicalaire du LRGP (Laboratoire Réactions et Génie des Procédés) développe depuis plusieurs années une collaboration avec la société MBDA, basée à Bourges. Les travaux engagés portent sur l'étude des réactions de pyrolyse et de combustion de combustibles utilisés dans les systèmes de propulsion de type statoréacteurs.

L'objectif du présent projet consiste à développer un mécanisme cinétique détaillé de la combustion du tricyclo [5.2.10^{2,6}] décane (ou THCPD) à haute température ($T > 900$ K):



Tricyclo [5.2.10^{2,6}] décane ou THCP

La combustion de ce polycycle met en jeu des réactions radicalaires qu'il conviendra d'explicitier afin de déduire l'ensemble des voies réactionnelles permettant de construire le mécanisme détaillé. Pour cela, des méthodes de calculs de structures électroniques seront utilisées (méthodes *ab initio* et DFT) en lien avec la théorie des réactions radicalaires pour déduire les énergies des différentes espèces mises en jeu dans ces processus élémentaires (réactifs, produits et états de transition). L'utilisation conjointe de ces méthodes et de la théorie de l'état de transition, permettra alors de déduire les constantes de vitesse et les grandeurs thermodynamiques associées ($\Delta_f H^\circ_{298K}$, S°_{298K} , $C_p(T)$). Bien que la forme *exo* du THCPD soit la plus stable, nous nous intéresserons aussi à la forme *endo* qui se trouve en plus faible quantité mais qui présente une plus grande réactivité. L'ensemble des calculs *ab initio* et DFT sera réalisé à l'aide des logiciels commerciaux Gaussian09 et Molpro, tandis que les calculs des données cinétiques et thermodynamiques seront réalisés à partir de logiciels développés en interne (ThermRot) ou disponibles dans la littérature (MESS, Variflex, ...).

A partir du mécanisme ainsi généré, des simulations seront réalisées à l'aide du logiciel Chemkin Pro et comparées aux résultats disponibles dans la littérature sur la combustion du THCPD. Une fois le modèle validé, il sera utilisé afin de simuler la combustion du combustible dans les conditions opératoires envisagées par MBDA.

Laboratoire d'accueil

Le projet sera réalisé au sein de l'axe CiTherE (Cinétique, Thermodynamique, Energie), un des cinq axes du Laboratoire Réactions et Génie des Procédés, basé à Nancy. Cet axe comprend 3 groupes de recherches dont le Groupe de Cinétique Radicalaire (GCR) qui est spécialisé dans l'étude des réactions thermiques en phase gazeuse et notamment dans la modélisation des mécanismes détaillés de combustion des hydrocarbures. Des réunions de travail régulières, au sein du groupe MBDA et en partenariat avec l'ONERA, seront organisées.

Profil recherché

Le candidat devra posséder un doctorat en combustion ou en chimie physique. Des connaissances dans le domaine de l'utilisation des méthodes de calcul de chimie quantique (calcul *ab initio* ou DFT) seront un plus.

Condition de nationalité : française

Candidature

Les candidats devront envoyer une lettre de motivation, un CV détaillé incluant une liste de publications et les coordonnées de deux encadrants référents à :

Rene Fournet, professeur : rene.fournet@univ-lorraine.fr

Laboratoire Réactions et Génie des Procédés, UMR 7274 CNRS(INSIS)

ENSIC, 1 rue Grandville, BP 20451

54001 Nancy Cedex

Montant de la rémunération : salaire brut : entre 2600 et 3600 € par mois selon l'expérience du candidat.

Durée et date de démarrage : 12 mois / mi-mai 2018.

