

# Développement et validation d'un mécanisme d'oxydation à basse température du THCPD

## Résumé :

A l'heure actuelle, l'essentiel des données disponibles dans la littérature sur l'exotricyclo[5.2.1.0<sup>2,6</sup>]décane (THCPD) porte sur la pyrolyse et l'oxydation à haute température. Dans le cadre de ce projet, nous proposons de nous intéresser à l'oxydation à basse température (500-800K) de ce composé tricyclique. Comme aucune donnée expérimentale n'est disponible dans ces conditions, nous proposons de réaliser une étude expérimentale préliminaire qui servira de base au développement et à la validation d'un mécanisme cinétique détaillé.

La partie expérimentale de cette étude sera réalisée dans un réacteur auto-agité par jets gazeux existant à ICARE. Ce réacteur en silice fondue est placé dans un four afin de maîtriser la température (500-1200K) et dans une enceinte pressurisable entre 1 et 40 bar. Le carburant et l'oxygène sont introduits séparément dans le réacteur de manière à éviter des réactions de pré-oxydation. L'azote est utilisé pour fortement diluer (98%) le mélange afin de limiter l'exothermicité de la réaction. Des échantillons du mélange réactif sont prélevés à température fixe et analysés par chromatographie en phase gazeuse. Des profils d'espèces sont ainsi établis servant de cible pour le développement et la validation d'un mécanisme réactionnel.

Le développement du mécanisme cinétique s'appuiera sur l'expérience acquise par l'équipe d'ICARE sur l'oxydation à basse température des alcanes (dodécane, tétradécane) ainsi que des cyclanes (propylcyclohexane, décaline) et plus généralement des carburéacteurs conventionnels ou de substitution. Ce mécanisme devra être couplé au mécanisme de pyrolyse et d'oxydation à haute température mis à jour au LRGP de Nancy.

## Compétences requises :

Compétences en développement de mécanismes cinétiques réactionnels ainsi que la maîtrise des outils analytiques (chromatographie en phase gazeuse, spectrométrie infrarouge à transformée de Fourier, spectrométrie de masse...)

## Caractéristiques du projet :

- durée du projet : 1 an
- salaire : env. 2000 € brut mensuel
- candidat de nationalité française

## Contact :

Laboratoire d'accueil : Institut de Combustion Aérothermique Réactivité Environnement (ICARE), Orléans (45).

Pour toute information complémentaire, contactez [guillaume.dayma@cnsr-orleans.fr](mailto:guillaume.dayma@cnsr-orleans.fr)