

Poste de thèse à IFP Energies nouvelles (IFPEN) Génie chimique

Design in silico d'additifs pour contrôler la réactivité par approche de modélisation multi-échelle

La diversification des filières énergétiques a impliqué une évolution importante de la formulation des carburants routiers et aéronautiques et de leurs procédés. Par ailleurs, les nouveaux systèmes de combustion ont induit des contraintes physiques et des exigences de performance de plus en plus accrues. Ces deux facteurs sont à l'origine du recours croissant aux additifs qui permettent au carburant de remplir des fonctions diverses. Toutefois, la multiplication d'additifs peut présenter au-delà de la complexité logistique, des effets synergétiques indésirables ou un comportement non maîtrisé dans des conditions de fonctionnement alternatives.

Le design d'additifs est donc nécessaire pour répondre à ces contraintes. C'est un processus complexe qui se base généralement sur l'expérience et sur un ensemble de modèles empiriques. Le développement de nouveaux additifs requiert une meilleure compréhension des phénomènes chimiques. Cette étape a été initiée par le développement de schémas cinétiques dans la littérature. Bien que ces travaux constituent une base essentielle pour la compréhension des effets constatés, ils ne permettent pas d'aborder le design d'additifs. Ce sujet de thèse propose donc de développer une approche multi-échelles de design d'additifs multifonctionnels.

La thèse comprend ainsi une partie modélisation s'appuyant sur plusieurs outils de chemoinformatique tels que le screening de molécules et la génération automatique de schémas cinétiques. Un volet expérimental est aussi prévu en collaboration entre IFPEN et le laboratoire LRGP de Nancy. Cette étape permettra, entre autre, la validation de la méthodologie proposée ainsi que des structures chimiques identifiées. Le(La) doctorant(e) pourra acquérir une expérience solide en simulation et en expérimental au travers des différentes étapes proposées par la méthodologie.

Mots clefs: Additifs, Carburant, Cinétique chimique

Directeur de thèse	Docteur, GLAUDE Pierre Alexandre, Laboratoire Réactions et Génie des Procédés (LRGP), Nancy
Ecole doctorale	EDX410 RP2E : Ecole doctorale de Ressources Procédés Produits Environnement, http://rp2e.univ-lorraine.fr/
Encadrant IFPEN	Docteur, MATRAT Mickaël, Ingénieur de recherche en adéquation moteur/carburant, Direction Systèmes Moteurs et Véhicule, mickael.matrat@ifpen.fr
Localisation du doctorant	IFP Energies nouvelles, Rueil-Malmaison, France
Durée et date de début	3 ans, début de préférence : le 1 octobre 2016
Employeur	IFP Energies nouvelles, Rueil-Malmaison, France
Qualifications	Master 2 ou Ingénieur en génie chimique, en chimie, ou en physico-chimie avec des connaissances en cinétique chimique et en combustion.
Connaissances linguistique	Anglais
Autres qualifications	Un goût prononcé pour la modélisation est essentiel et une expérience expérimentale serait un atout.

Pour plus d'information ou pour soumettre votre candidature, voir theses.ifpen.fr ou contacter l'encadrant IFPEN.

IFP Energies nouvelles

IFP Energies nouvelles est un organisme public de recherche, d'innovation et de formation dont la mission est de développer des technologies performantes, économiques, propres et durables dans les domaines de l'énergie, du transport et de l'environnement. Pour plus d'information, voir www.ifpen.fr.

IFPEN met à disposition de ses chercheurs un environnement de recherche stimulant, avec des équipements de laboratoire et des moyens de calcul très performants. IFPEN a une politique salariale et de couverture sociale compétitive. Tous les doctorants participent à des séminaires et des formations qui leur sont dédiés.