



Avis de Soutenance

Madame Alaa HAMADI

Sciences de l'Ingénieur

Soutiendra publiquement ses travaux de thèse intitulés

Etude expérimentale sur la formation de précurseurs de suie par des techniques de tube de choc

dirigés par Monsieur Andrea COMANDINI

Ecole doctorale : Energie, Matériaux, Sciences de la Terre et de l'Univers - EMSTU

Unité de recherche : ICARE - Institut de Combustion, Aérothermique, Réactivité, Environnement

Soutenance prévue le **jeudi 09 décembre 2021** à 14h00

Lieu : CNRS-INSIS ICARE, 1C, Avenue de la recherche scientifique 45071 Orleans Cedex 2, France

Salle : de conference_ICARE

Composition du jury proposé

M. Andrea COMANDINI	CNRS Orléans	Directeur de thèse
Mme Nabihah CHAUMEIX	CNRS Orléans	Examinatrice
M. Laurent CATOIRE	Université Paris-Saclay	Examinateur
M. Alessio FRASSOLDATI	Politecnico di Milano	Rapporteur
Mme Frederique BATTIN-LECLERC	CNRS Nancy	Rapporteuse

Mots-clés : HAPs, pyrolyse, modélisation cinétique chimique, suie, chromatographie en phase gazeuse / spectrométrie de masse, hydrocarbures aromatiques,

Résumé :

La thèse vise à développer un modèle cinétique complet, mettant l'accent sur la chimie de la formation des HAP, basé sur les profils détaillés des espèces obtenus dans un tube de choc à impulsion unique couplé à des techniques de chromatographie / spectrométrie de masse. Cette configuration est conçue et développée afin de mesurer avec précision les espèces stables jusqu'à quatre cycles aromatiques. En particulier, la pyrolyse de différents combustibles et mélanges aromatiques est étudiée dans des conditions de combustion moteur, sur une large plage de températures, de 900 à 1800 K, à une pression constante d'environ 20 bars et un temps de réaction de 4 ms. Les mécanismes des réactions impliquées dans la décomposition thermique du propylène et du propyne et la croissance moléculaire subséquente jusqu'à des produits à quatre cycles sont d'abord ajoutés et mis à jour sur la base de la dernière version du modèle CRECK, car le propylène et le propyne sont des produits abondants résultant d'une consommation du combustible. La chimie du phényle et du benzyle est ensuite étudiée par pyrolyse du benzène et du toluène, respectivement. Les deux combustibles sont étudiés avec et sans ajout d'autres molécules généralement présentes dans tous les systèmes réactionnels, tels que l'acétylène (C₂H₂), l'éthylène (C₂H₄), le propène (C₃H₆) ou le propyne (C₃H₄-P). Pour traiter de l'influence des combustibles en C₂ ou C₃ ajoutés sur la spéciation des HAP du benzène et du toluène, différents mélanges binaires sont examinés. La spéciation des HAP à partir du phénylacétylène, intermédiaire de combustion, est investiguée. Étant donné que le phénylacétylène est également un intermédiaire important dans le mécanisme d'addition d'hydrogène-abstraction-acétylène (HACA) à partir du benzène, les mélanges phénylacétylène/C₂ sont étudiés afin de mettre en évidence les étapes HACA ultérieures entre le combustible et les hydrocarbures légers insaturés.

Enfin, les voies de réaction du benzyle sont examinées plus en détail en considérant les alkylbenzènes linéaires en C8-C10 comme combustibles initiaux, car la chimie correspondante de la formation de HAP est également contrôlée par des réactions impliquant le radical benzyle. Les résultats de mes travaux comprennent : i) l'obtention d'une vaste base de données expérimentales sur les profils d'espèces, y compris les intermédiaires de HAP jusqu'à quatre anneaux, provenant de la pyrolyse de composants et de mélanges de combustibles clés; ii) développement d'un modèle cinétique chimique détaillé et complet validé par confrontation aux résultats expérimentaux ; iii) une compréhension avancée des schémas cinétiques et des mécanismes impliqués dans la décomposition thermique des combustibles et la formation de molécules précurseurs de suie. Ces résultats peuvent servir de développement de modèles futurs concernant des combustibles plus complexes et des substituts ainsi que la base pour la construction de codes de suie pour la simulation de la formation de particules dans les applications de combustion.