

OFFRE DE STAGE

Compréhension des mécanismes de formation d'espèces toxiques lors de la combustion de produits halogénés

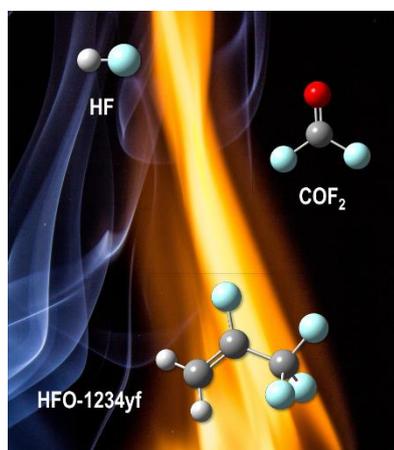
Date de publication : 16/11/2023

Lieu : Verneuil-en-Halatte (60) - accessible en transports en commun, à 40 mn au Nord de Paris

Type de contrat : stage

Contacts : guillaume.fayet@ineris.fr - Tél. : 03 44 61 81 26

carlos.murillo-rueda@ineris.fr



Les fluides halogénés ont des applications diverses dans l'industrie. Parmi eux, les fluides frigorigènes R32 et le HFO-1234yf sont actuellement utilisés comme alternatives aux CFC (chlorofluorocarbures) dans un objectif de réduction de leur impact sur la couche d'ozone et sur le réchauffement climatique. On citera également les gaz inhibiteurs utilisés dans les systèmes de protection automatique contre l'incendie (HFC-23, FK-5-1-12...).

La présence d'halogènes comme le fluor dans la structure moléculaire des fluides halogénés contribue à la formation de composés toxiques tels que le fluorure d'hydrogène (HF) et le fluorure de carbonyle (COF₂) lors de leur combustion.

Ceci a été observé dans une étude expérimentale réalisée à l'Ineris en calorimétrie FPA¹. Cette étude a notamment mis en évidence une possible influence du rapport H/F dans la structure moléculaire et de certaines conditions expérimentales sur la composition des produits de combustion.

En complément des méthodes de caractérisation expérimentale, l'Ineris utilise des méthodes de chimie quantique (théorie de la fonctionnelle de la densité, DFT) pour caractériser les mécanismes chimiques mis en jeu dans la décomposition et la réactivité des substances^{2,3}. Ces méthodes permettent d'identifier les chemins réactionnels, de caractériser les énergies développées par les réactions mises en jeu (énergie de réaction et d'activation) et d'identifier les intermédiaires et produits formés au cours de ces réactions.

L'objectif de ce stage sera donc d'approfondir les connaissances expérimentales obtenues en calorimétrie FPA en s'intéressant de manière plus détaillée aux mécanismes chimiques mis en jeu dans la combustion de certains hydrocarbures halogénés.

¹ Fire Propagation Apparatus (ISO 12136 2011).

² F. Fayet, L. Joubert, P. Rotureau, C. Adamo, J. Phys. Chem. A, 2009, 113, 13621-136277

³ S. Cagnina, P. Rotureau, G. Fayet, C. Adamo, Ind. Eng. Chem. Res., 2014, 53, 13920-13927

Dans un premier temps, une analyse bibliographique sera menée afin de mettre en évidence la littérature disponible sur les mécanismes de décomposition et de combustion de produits halogénés. Dans un second temps, la décomposition de quelques substances halogénées (parmi celles déjà caractérisées expérimentalement) sera étudiée afin d'identifier les mécanismes réactionnels clés mis en jeu dans la combustion de ces substances et de comprendre l'influence de leur structure moléculaire sur les concentrations en espèces toxiques observées lors des essais. La stabilité des produits formés (en particulier le COF₂) sera également étudiée afin d'évaluer leur durée de vie lors de leur dispersion atmosphérique post-combustion.

PROFIL

Bac +4/5, chimie théorique, modélisation moléculaire

DIVERS

Durée : 4/6 mois

Ce poste est ouvert aux personnes en situation de handicap.