



Rédigé le 16 décembre 2020



15 minutes de lecture



Actualités

Recherche fondamentale

Physique du transfert et du transport

Rhéologie et comportement des matériaux



Pour IFPEN, acteur majeur de la recherche et de la formation, l'accueil

des doctorants est une mission essentielle. Ces jeunes chercheurs en devenir apportent à notre recherche fondamentale leur dynamisme, leur vision neuve et leur compétence. Ils bénéficient en retour d'un environnement de haut niveau et d'une ouverture sur des enjeux et des problématiques concrètes qui les préparent à leur activité future.

Nos doctorant(e)s sont également au cœur de nos collaborations avec le monde académique français et international. Ces collaborations sont essentielles pour lever les verrous scientifiques inhérents au développement de nos innovations et confronter notre recherche aux meilleures équipes. Nos doctorant(e)s sont d'ailleurs régulièrement primé(e)s, signe de la qualité de leurs travaux.

L'exigence et l'excellence scientifiques doivent être entretenues et reconnues, et c'est tout l'objet du **prix Yves Chauvin** auquel candidatent chaque année de jeunes docteur(e)s sélectionné(e)s par la direction de recherche qui les a accueilli(e)s. Je vous encourage à découvrir dans ce numéro les sujets soumis cette année à la sélection du Conseil scientifique, à commencer par les **deux lauréats ex aequo** : **Rémi Hocq** et **Jérôme Rey**.

Bonne lecture,

Pierre-Franck Chevet,
Président d'IFP Energies nouvelles



[Voir le PDF de la lettre](#)

LES BRÈVES

Thèse de Rémi Hocq*, co-lauréat du prix Yves Chauvin 2020

La substitution de bioprocédés aux procédés pétrochimiques requiert la mise en oeuvre de biocatalyseurs (ou micro-organismes) pour produire des molécules, avec un moindre impact environnemental. L'un de ces microorganismes, ***Clostridium beijerinckii* DSM 6423**, est capable de transformer, par fermentation, une grande variété de sucres en bioalcools valorisables directement ou déshydratés en propylène et butènes. Cependant, ses trop faibles productivités limitent encore son utilisation à l'échelle industrielle.

La recherche s'est d'abord concentrée sur l'étude des performances fermentaires en présence de coproduits de l'industrie sucrière (mélasses). Ceci a consisté à stabiliser des états physiologiques en culture continue, puis à les caractériser au travers d'une approche *in silico*^a. Par la suite, l'utilisation couplée des derniers outils d'analyses omiques^b, sondant l'**ADN**, l'**ARN** et les protéines de *C. beijerinckii*, a abouti à l'obtention de données fondamentales permettant d'appréhender son métabolisme et constituant une base de travail robuste et indispensable en vue de son exploitation. Enfin, pour optimiser ses capacités, un verrou majeur a été levé en concevant un premier outil de modification génétique^c, puis en l'utilisant pour caractériser la **protéine sigma 54**, facteur essentiel de la production d'alcools dans ce microorganisme(1-2).

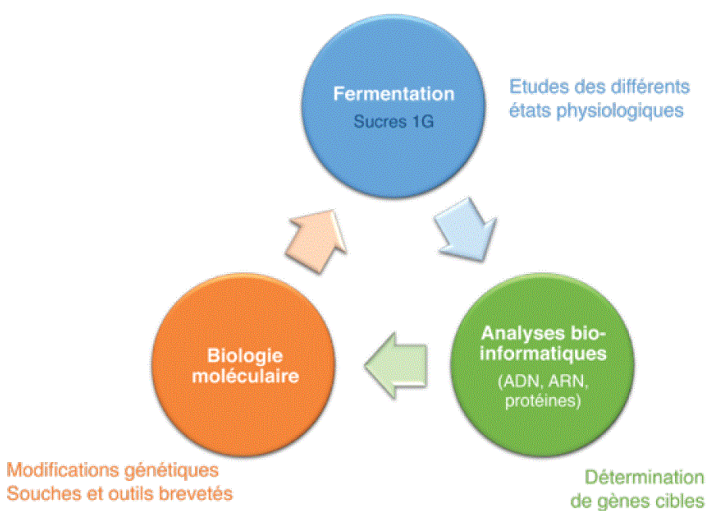


Schéma bilan de la démarche suivie.

Ainsi, par la création et la protection intellectuelle d'une première souche « plateforme », ce travail a ouvert la voie vers l'optimisation des performances fermentaires de ce micro-organisme d'intérêt industriel.

*Thèse intitulée « ***Clostridium beijerinckii* DSM 6423, une souche plateforme émergente pour la bioproduction de solvants** »

- a - Au moyen de calculs complexes informatisés ou de modèles informatiques
 - b - Analyses à l'échelle moléculaire de l'ADN (génomique), de l'ARN (transcriptomique) et des protéines (protéomique)
 - c - Basé sur la technologie CRISPR-Cas9
-

(1) R. Hocq, M. Bouilloux-Lafont, N. Lopes Ferreira, F. Wasels. *Sci Rep.* 2019 ; 9(1):7228.

DOI : 10.1038/s41598-019-43822-2

(2) M. Diallo, R. Hocq, F. Collasa, G. Chartier, F. Wasels, H. Surya Wijayaa, M.W.T. Werte, E.J.H. Wolberta, S.W.M.Kengen, J. der Oost, N. Lopes Ferreira, A.M. López-Contreras. *Methods.* 2020 ; 172:51-60.

DOI : 10.1016/j.ymeth.2019.07.022

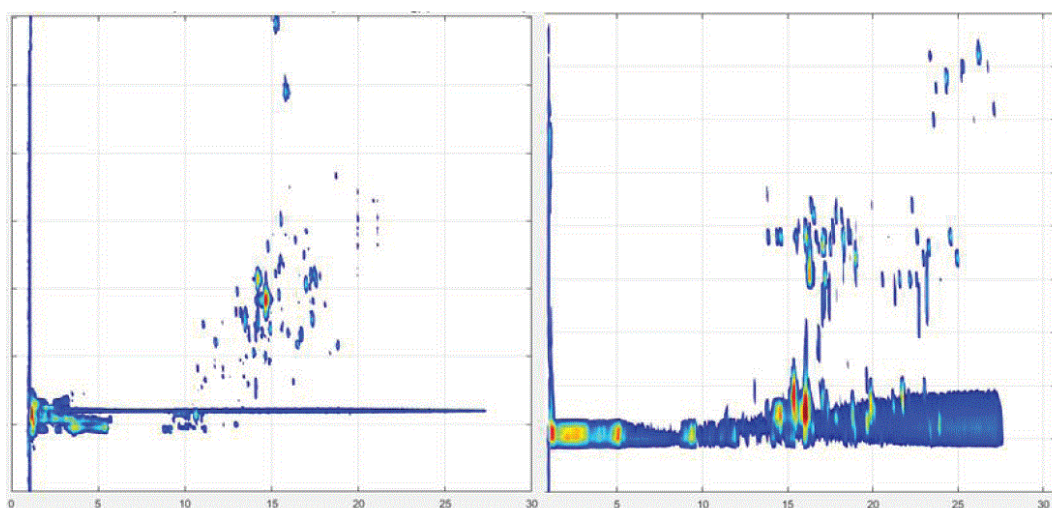
Contact scientifique : francois.wasels@ifpen.fr

>> NUMÉRO 43 DE SCIENCE@IFPEN

Optimisation d'un micro-organisme d'intérêt pour la bioproduction d'isopropanol et de n-butanol

La mise au point de procédés de **production de carburant et de molécules plateformes^a** à partir de biomasses lignocellulosiques requiert une connaissance de la composition chimique, à l'échelle moléculaire, des différents produits liquides générés. Or, la complexité de ces derniers rend nécessaire une étape de « déformulation » en amont de l'analyse proprement dite, sans occasionner de perte ni de modification des composés présents.

Ces travaux de thèse ont porté sur deux voies de fractionnement originales fondées, d'une part, sur la solubilité, avec des techniques d'**extraction liquide-liquide (LLE)** et de **chromatographie de partage centrifuge (CPC)** et, d'autre part, par taille moléculaire avec la **chromatographie d'exclusion stérique (SEC)**. La LLE et la CPC permettent une extraction sélective de sucres, de composés neutres (furanes, aldéhydes, cétones, alcools, esters), d'acides carboxyliques et de phénols(1-2) tandis que la SEC assure une séparation plus spécifique des sucres(3). L'analyse proprement dite a ensuite été effectuée sur chaque fraction obtenue, par chromatographie liquide à polarité de phase inversée, avec une **détection par ultraviolet et spectrométrie de masse (RPLC-UV/MS)**.



Cartographies SECxRPLC/MS (gauche) et CPCxRPLC/MS (droite) obtenues pour un produit issu de la conversion par voie biochimique d'une paille de blé.

Les étapes de prétraitement et de déformulation permettent non seulement une simplification des échantillons à analyser mais également une structuration par propriétés des chromatogrammes générés, facilitant ainsi leur exploitation. En effet, les cartographies 2D inédites obtenues sont très riches en informations sur la composition chimique des bioproduits (figure). Pour affiner encore la caractérisation, cette méthodologie pourra être

couplée avec un traitement chimiométrique des données.

*Thèse intitulée « **Déformulation de matrices complexes issues de la biomasse et caractérisation par chromatographie en phase liquide couplée à la spectrométrie de masse** »

a - Molécules utilisées comme base à de nombreuses applications

L. Chahen, E. Destandau, N. Charon, *Journal of Chromatography A* (2020), 1610.

<https://doi.org/10.1016/j.chroma.2019.460569>

(2) A. Dubuis, A. Le Masle, L. Chahen, E. Destandau, N. Charon. *Journal of Chromatography A* (2019) 1597.

<https://doi.org/10.1016/j.chroma.2019.03.031>

(3) A. Dubuis, A. Le Masle, L. Chahen, E. Destandau, N. Charon. *Journal of Chromatography A* (2020) 1609.

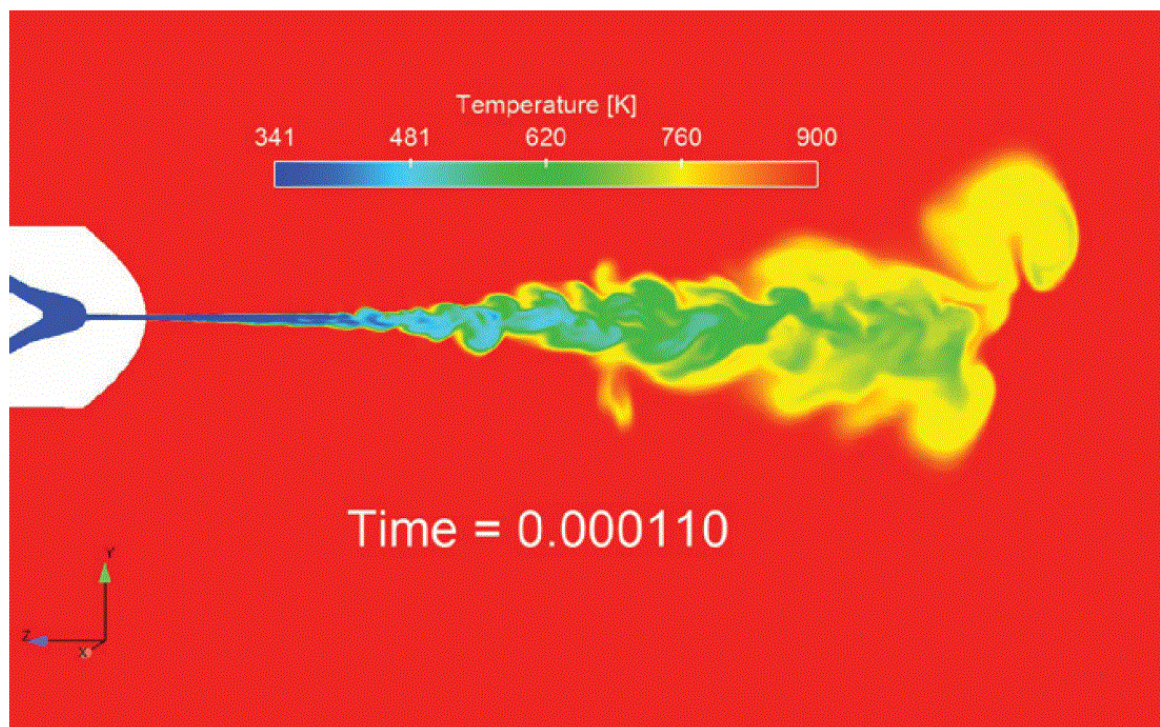
<https://doi.org/10.1016/j.chroma.2019.460505>

Contact scientifique : agnes.le-masle@ifpen.fr

>> NUMÉRO 43 DE SCIENCE@IFPEN

Prétraitement et déformulation de produits issus de la biomasse

Le domaine de l'**injection moteur**, comme de nombreuses applications nécessitant le recours à la simulation numérique, fait intervenir des écoulements diphasiques complexes. Or, la plupart des logiciels de calcul en mécanique des fluides peuvent simuler des écoulements à une phase (liquide ou gaz), éventuellement en régime supercritique^a, ou bien des écoulements diphasiques (liquide-gaz) en régime sous-critique. Ce travail propose une **modélisation complète** pour simuler ces deux cas, y compris le **régime transcritique**^b, ainsi que l'éventuelle **transition de phase** (évaporation ou condensation). Pour cela, un **modèle d'écoulement diphasique totalement compressible et à interface diffuse a été développé**, basé sur une approche eulérienne-eulérienne^c de fluides réels supposant un équilibre liquide-vapeur(1). Il a rendu possible la simulation de l'injection transcritique dans l'injecteur de référence Spray A du réseau ECN^d (2). Il s'est aussi avéré capable de prévoir le phénomène de cavitation^e dans une buse tridimensionnelle, soulignant ainsi l'importance de la prise en compte des gaz dissous dans la modélisation de l'injection(3). En particulier, son utilisation a apporté un nouvel éclairage sur le phénomène de nucléation des bulles, en fonction de la quantité du gaz non condensable dissous.



Simulation d'injection transcritique sur l'injecteur Spray-A (champs de température à 112 ?s).

De nombreuses autres applications faisant intervenir des écoulements diphasiques complexes pourront désormais être simulées avec davantage de réalisme, telles que les

turbines à gaz et les moteurs-fusées cryogéniques, ou bien l'ébullition de liquide de refroidissement pour l'électronique de puissance de moteurs électriques ou de centres de calculs.

*Thèse intitulée **"Modeling of Diesel injection in subcritical and supercritical conditions"**

- a - État d'un corps pur lorsque sa pression $P > P_c$ ou bien sa température $T > T_c$. Dans le cas contraire, il est dans un état sous-critique
 - b - Condition générée lorsqu'un fluide sous-critique est injecté dans un fluide supercritique
 - c - Approche eulérienne à la fois pour le liquide et le gaz
 - d - Engine Combustion Network (<https://ecn.sandia.gov/workshop/ECN1/intro.pdf>)
 - e - Formation de bulles de gaz ou de vapeur dans un liquide soumis à une dépression
-

(1) P. Yi, S. Yang, C. Habchi, R. Lugo, 2019. *Phys. Fluids* 31, 026102.
<https://doi.org/10.1063/1.5065781>

(2) S. Yang, P. Yi, C. Habchi, 2020. *Int. J. Multiph. Flow* 103145.
<https://doi.org/10.1016/j.ijmultiphaseflow.2019.103145>

(3) S. Yang, C. Habchi, 2020. *Phys. Fluids* 32, 032102.
<https://doi.org/10.1063/1.5140981>

Contact scientifique : **Chawki Habchi**

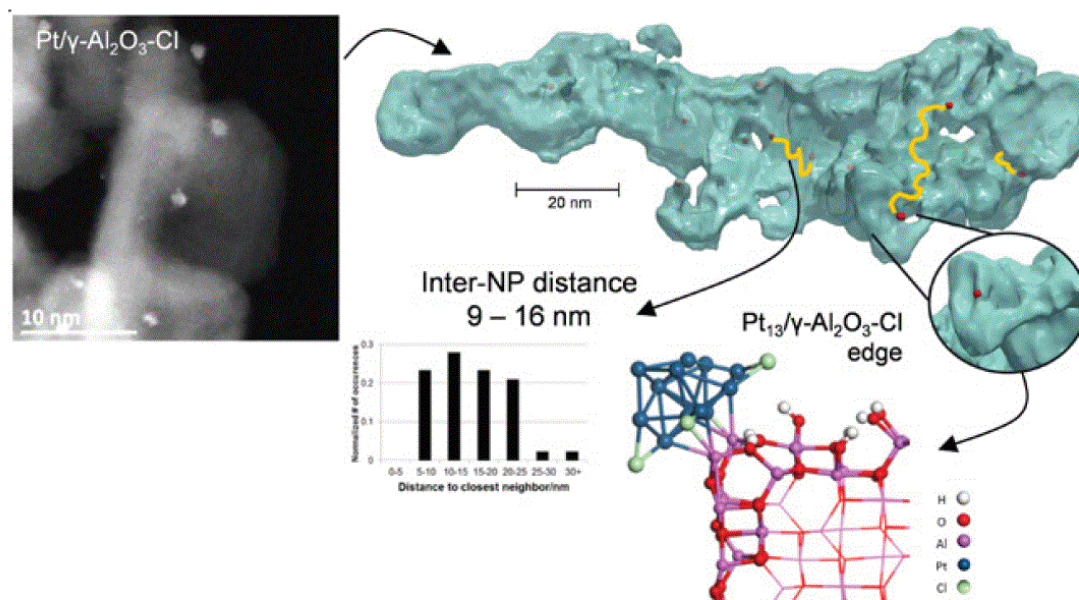
>> NUMÉRO 43 DE SCIENCE@IFPEN

Simulations d'écoulements diphasiques : tous les régimes sont désormais accessibles

Les nanoparticules de platine supportées sur alumine- γ chlorée sont utilisées dans les catalyseurs hétérogènes bifonctionnels^a qui sont au cœur de nombreux procédés industriels. La localisation des deux types de sites que renferment ces catalyseurs et la distance entre ces sites, paramètres critiques pour les performances, ont été déterminées grâce à une étude à l'échelle atomique en faisant varier différents paramètres physico-chimiques.

Pour cela, une **approche multitechnique combinant synthèse, caractérisation avancée et modélisation (figure)** a été mise en œuvre impliquant plusieurs directions de recherche d'IFPEN et des laboratoires partenaires : IPCMS, CRMN, ESRF^b et Institut Néel.

Des **analyses HR-HAADF-STEM^c** ont permis de révéler que des **particules de Pt sub-nanométriques et des atomes uniques de Pt sont présents sur l'alumine(1)**. De plus, la tomographie électronique a montré que la majorité des nanoparticules de Pt sont localisées sur les arêtes des plaquettes du support alumine. Ce résultat original entre en résonance avec les analyses RMN et DFT^d qui ont montré que **le chlore est aussi stabilisé sur les arêtes(2)**. Enfin, une analyse mathématique et un modèle géométrique de catalyseur ont permis d'estimer les distances moyennes intersites.



Moyens d'étude employés : cliché STEM, mesure tomographique et modélisation moléculaire quantique.

Ces nouvelles connaissances ouvrent de nouvelles voies rationnelles d'amélioration des performances des catalyseurs, au travers de méthodes de préparation orientant vers un meilleur contrôle des sites actifs à l'échelle atomique.

*Thèse intitulée "**Atomic scale insight into platinum based catalysts supported on chlorinated gamma-alumina**"

a - Comportant des sites actifs métalliques et des sites acides

b - Institut de physique et chimie des matériaux de Strasbourg ; Centre de RMN à très hauts champs de Lyon ; European Synchrotron Radiation Facility

c - High Resolution – High Annular Angle Dark Field – Scanning Transmission Electron Microscopy

d - Nuclear Magnetic Resonance et Density Functional Theory

(1) A.T.F. Batista, W. Baaziz, A.-L. Taleb, J. Chaniot, M. Moreaud, C. Legens, A. Aguilar-Tapia, O. Proux, J.-L. Hazemann, F. Diehl, C. Chizallet, A.-S. Gay, O. Ersen, P. Raybaud, *ACS Catal.* 2020, 10, 7, 4193-4204.

<https://doi.org/10.1021/acscatal.0c00042>

(2) A.T.F. Batista, D. Wisser, T. Pigeon, D. Gajan, F. Diehl, M. Rivallan, L. Catita, A.-S. Gay, A. Lesage, C. Chizallet, P. Raybaud, *J. Catal. Priority Communication* 2019, 378, 140-143.

<https://doi.org/10.1016/j.jcat.2019.08.009>

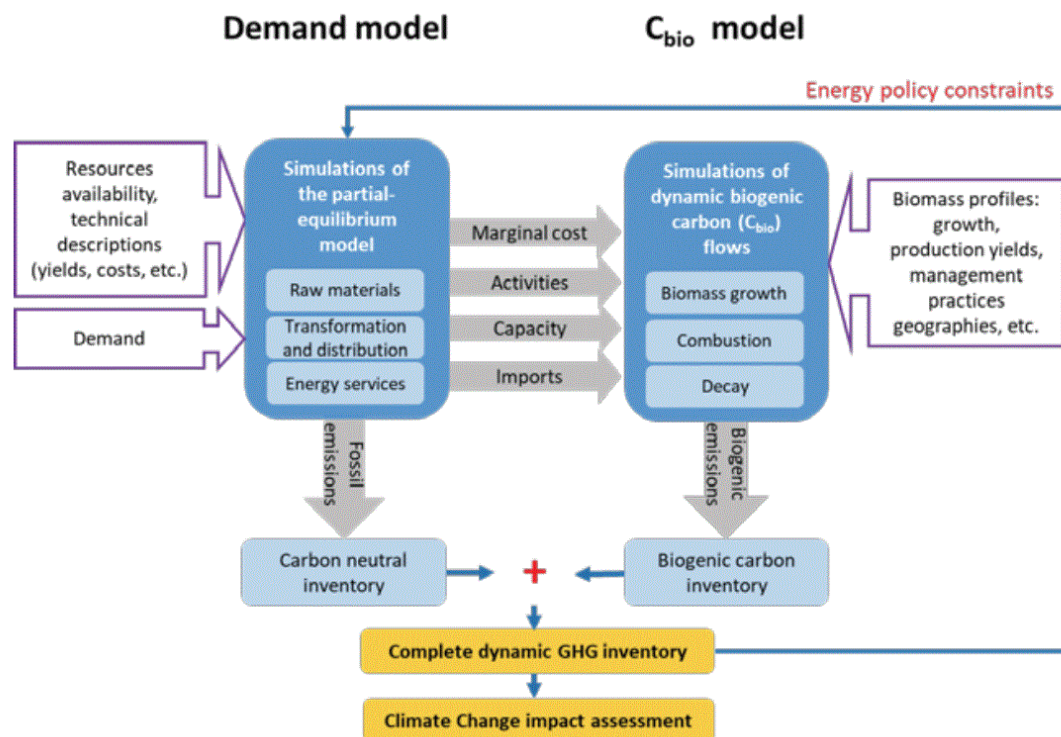
Contact scientifique : **Ana Teresa Fialho Batista**

>> NUMÉRO 43 DE SCIENCE@IFPEN

La nanoparticule métallique en équilibre sur une arête

Les stratégies bas carbone favorisent l'utilisation de sources d'énergie renouvelable provenant entre autres de la biomasse. L'objectif d'atteindre la neutralité carbone s'y exprime au travers d'une compensation entre émissions et captations du CO₂. Les émissions impactant le climat sont analysées via des méthodologies dédiées, comme l'analyse du cycle de vie (ACV). Cependant les modèles utilisés dans ces approches sont statiques car ils représentent uniquement les systèmes dans un état d'équilibre. Or, l'intégration de la dimension temporelle, en distribuant les flux de carbone biogénique (C_{bio})^a au cours du temps, pourrait remettre en cause ces stratégies bas carbone.

C'est la question à laquelle s'est attaché ce travail de thèse, en développant des outils pour décrire des flux de C_{bio} dynamiques et pour les coupler à différents modèles de demande (figure). L'écart entre les résultats issus des nouvelles évaluations dynamiques et ceux provenant des études analysées(1-2). Ceci a révélé que la nouvelle modélisation de la séquestration du C_{bio} et de la dynamique du COS^b fournissait une représentation plus précise des flux de C_{bio} et que son intégration dans les modèles de changement climatique impactait significativement leurs prévisions.



Couplage d'un modèle de prospective énergétique avec un modèle de croissance de biomasse forestière.

Cette avancée méthodologique, au service des ACV, est particulièrement intéressante dans

la perspective des actions à mettre en œuvre face aux enjeux climatiques.

*Thèse intitulée « **Prise en compte de la dimension temporelle dans l'évaluation environnementale des produits de la biomasse : modélisation dynamique du carbone** »

a - Carbone de la biosphère terrestre

b - Carbone organique du sol

(1) A. Albers, P. Collet, D. Lorne, A. Benoist, A. Hélias (2019a). *Applied Energy* 239, 316-330.
DOI : 10.1016/j.apenergy.2019.01.186

(2) A. Albers, A. Avadi, A. Benoist, P. Collet, A. Hélias (2019c). *Science of The Total Environment*, 135278.
DOI : 10.1016/j.scitotenv.2019.135278

Contact scientifique : pierre.collet@ifpen.fr

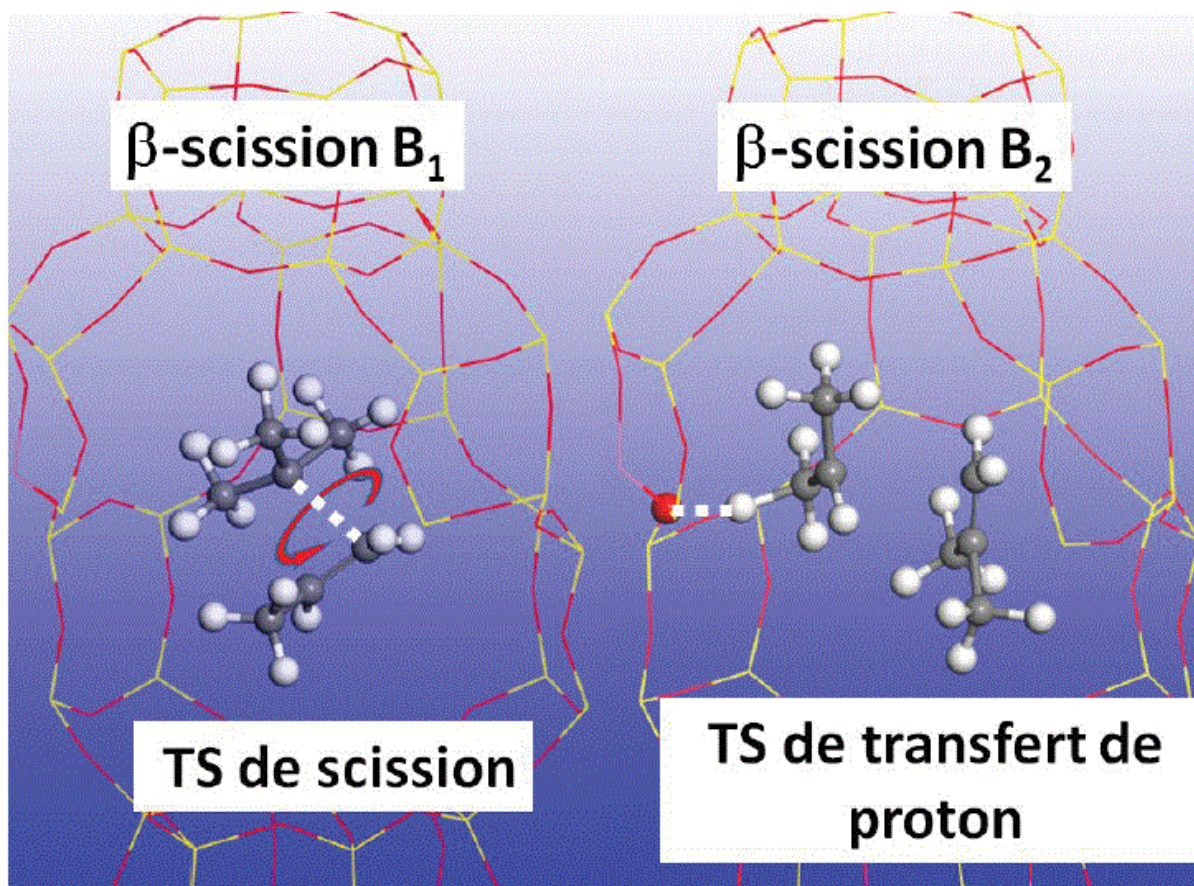
>> [NUMÉRO 43 DE SCIENCE@IFPEN](mailto:NUMERO_43_DE_SCIENCE@IFPEN)

Des flux dynamiques pour de meilleures stratégies bas carbone

Les zéolithes sont des solides nanoporeux largement utilisés comme catalyseurs acides de transformation de molécules hydrocarbonées. Déterminer les vitesses des actes élémentaires des mécanismes réactionnels constitue toutefois un défi, en raison du grand nombre de degrés de liberté dont disposent les réactifs, les intermédiaires^a et les états de transition^b dans la cavité zéolithique. Ce défi a été relevé grâce à la puissance du calcul quantique.

En collaboration avec l'université Comenius de Bratislava, nous avons employé la **dynamique moléculaire *ab initio* (AIMD)^c contrainte^d** pour modéliser avec précision les réactions d'isomérisation et de craquage d'alcènes, et quantifier leurs constantes de vitesse. Il s'est alors avéré que l'**AIMD surpassait les méthodes statiques conventionnelles** pour ces réactions.

Il a ainsi été possible d'identifier les intermédiaires réactionnels impliqués, ainsi que les états de transition clés (figure) pour les réactions d'isomérisation d'alcènes via des **carbocations^e tertiaires(1) et secondaires(2)**, et pour leur craquage par β -scission(3).



États de transition (TS) déterminés par AIMD pour le craquage d'alcènes à 7 atomes de carbone dans la zéolithe chabazite.

Ces éléments inédits de compréhension des mécanismes à l'oeuvre s'accompagnent d'une quantification fine des constantes de vitesse associées, qui dépendent directement de la différence d'énergie libre entre états de transition et intermédiaires. Celles-ci seront introduites dans des modèles cinétiques pour prédire les performances catalytiques des zéolithes à l'échelle macroscopique, en raffinage pétrolier et en transformation de la biomasse.

*Thèse intitulée « **Mécanismes et cinétique de l'isomérisation et du craquage d'alcènes dans la zéolithe chabazite quantifiés par dynamique moléculaire ab initio contrainte** »

- a - Produits formés puis retransformés au cours des étapes de réaction
- b - États théoriquement présents dans le schéma réactionnel mais non observés concrètement
- c - *Ab initio molecular dynamics*
- d - Permettant d'orienter l'évolution du système selon une voie réactionnelle donnée
- e - Ion dérivé d'un composé organique, avec une charge électrique positive sur un ou plusieurs atomes de carbone

(1) J. Rey, A. Gomez, P. Raybaud, C. Chizallet, T. Bu?ko, *J. Catal.*, 373, 361–373, 2019.
<https://doi.org/10.1016/j.jcat.2019.04.014>

(2) J. Rey, P. Raybaud, C. Chizallet, T. Bu?ko, *ACS Catalysis*, 9, 9813–9828, 2019.
<https://doi.org/10.1021/acscatal.9b02856>

(3) J. Rey, C. Bignaud, P. Raybaud, T. Bu?ko, C. Chizallet, *Angew. Chem., Int. Ed.*, Vol. 59, Issue 43, October 2020.
<https://doi.org/10.1002/anie.202006065>

Contact scientifique : celine.chizallet@ifpen.fr

>> NUMÉRO 43 DE SCIENCE@IFPEN

La dynamique réactionnelle dans les zéolithes à la loupe du calcul quantique

Pour des raisons sanitaires, les émissions de particules fines produites par les moteurs thermiques sont réglementées par l'Union européenne depuis les années 90. Afin de respecter ces normes, des filtres à particules sont implantés sur les lignes d'échappement des véhicules concernés. Pour contrôler leur bon fonctionnement, les **capteurs résistifs**, à la fois robustes et peu onéreux, sont d'excellents candidats. Ce type de capteur repose sur la **mesure de la conductance d'un dépôt de particules**, formant comme un pont entre deux électrodes (figure). Il ne permet aujourd'hui que d'estimer une concentration en masse par unité de volume. Or, les normes réglementent aussi la concentration en nombre qui est un meilleur indicateur de l'effet néfaste des particules sur la santé, en prenant mieux en compte les particules ultrafines.

Comme préalable au développement d'un capteur sensible au nombre, ce travail de thèse a cherché à mieux comprendre les mécanismes de dépôt des particules dont les plus fines. Celles contenues dans les gaz d'échappement ont tout d'abord été classifiées en fonction de leur taille, grâce à deux techniques expérimentales^a, pour n'envoyer sur le capteur que les plus fines d'entre elles. Ceci a permis de montrer que la construction des ponts se produisait aussi avec des particules ultrafines (50 nm)(1).

Une analyse par simulation numérique a ensuite mis en lumière un phénomène physique jusqu'alors absent de la littérature du domaine, la **diélectrophorèse**, qui permet de mieux expliquer les mécanismes de construction des microstructures des suies en fonction de la taille des particules et dont le principe pourrait en outre servir à mettre au point un capteur sensible aux particules les plus fines.

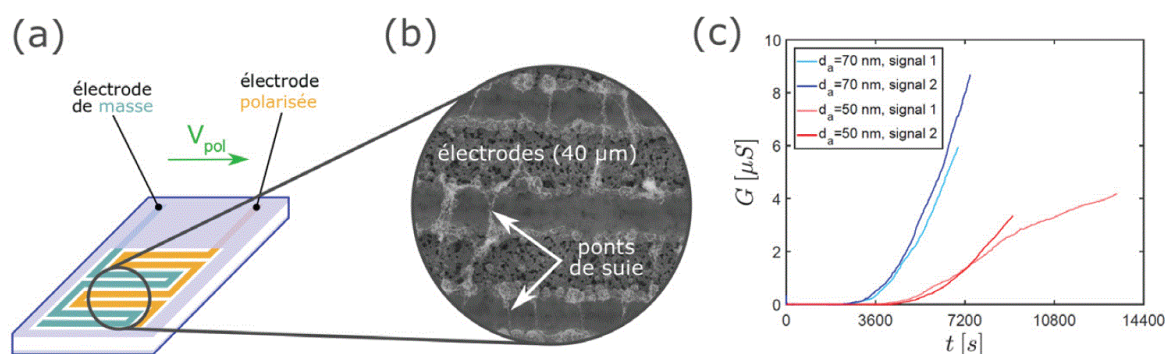


Schéma du capteur (a), micrographie MEB des ponts (b) et signaux pour différents diamètres de particules (c).

Ces résultats constituent une avancée importante pour mieux exploiter le signal des capteurs résistifs, en vue d'obtenir des informations sur la concentration en nombre des particules de suie ultrafines.

*Thèse intitulée « **Compréhension et modélisation des mécanismes de captation des aérosols par couplage des phénomènes aérodynamiques et électriques** »

a - La classification électrostatique et la classification aérodynamique

(1) A. Reynaud, M. Leblanc, S. Zinola, P. Breuil, J.-P. Viricelle, 2019, *Sensors* 19.
DOI : 10.3390/s19030705

Contact scientifique : stephane.zinola@ifpen.fr

>> [NUMÉRO 43 DE SCIENCE@IFPEN](#)

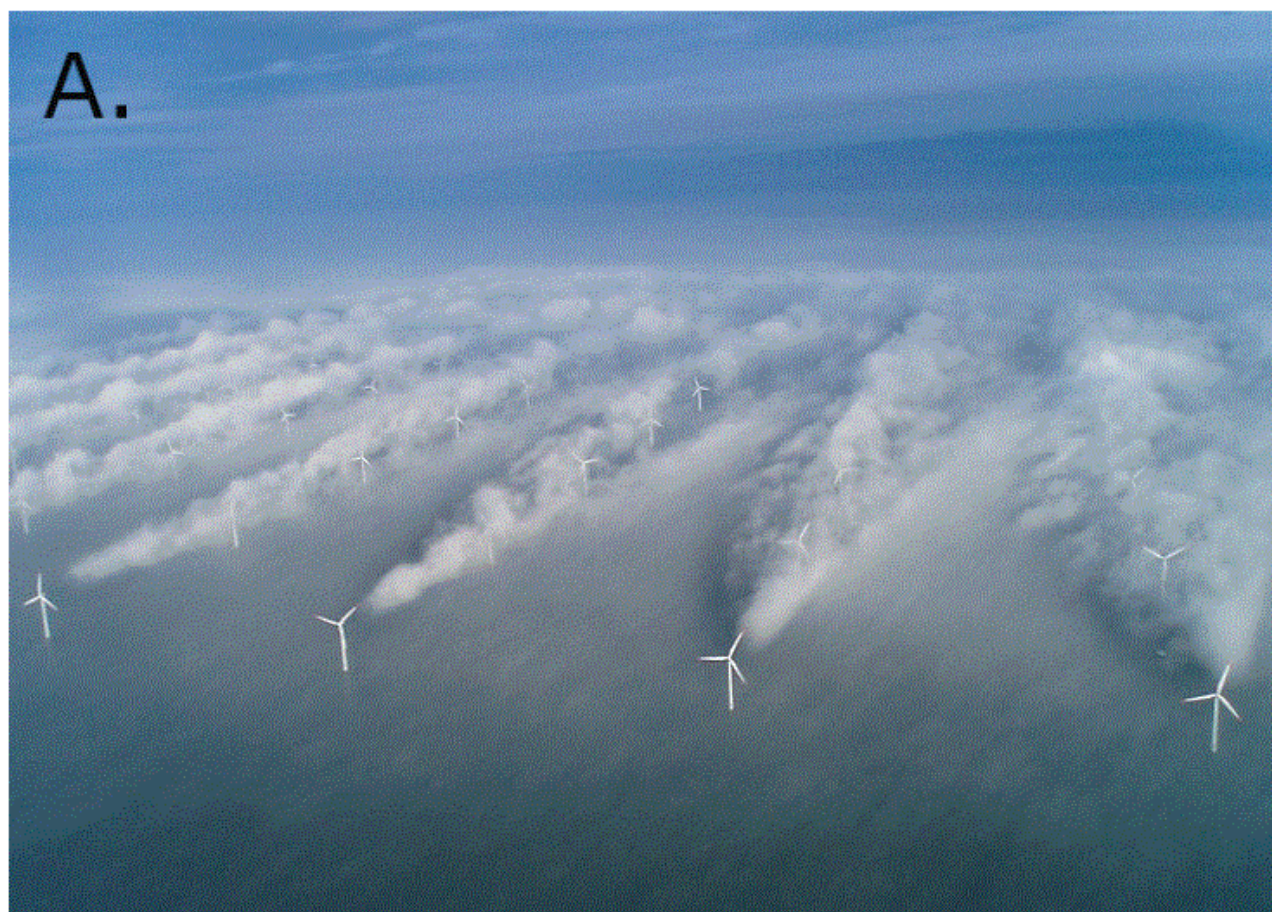
Détection à moindre coût des particules de suie ultrafines à l'échappement des moteurs

La Programmation pluriannuelle de l'énergie encourage l'essor de l'énergie éolienne. Pour prévoir cette production énergétique et tenter de l'optimiser, quelle que soit l'implantation (mer, montagne), une meilleure compréhension de l'écoulement du vent au sein des parcs éoliens sera nécessaire. C'est notamment vrai pour **les éoliennes offshore** qui, de par leur taille, **vont interagir plus fortement avec l'atmosphère et avec la météorologie locale**. Caractériser ces interactions, à la fois pluridisciplinaires (aérodynamiques et météorologiques) et multi-échelles (de la pale à l'atmosphère) constitue, par conséquent, un enjeu industriel et environnemental.

Un outil numérique dédié à cette problématique a été développé dans le cadre de cette thèse, en partenariat avec Météo France. **Il permet de simuler le comportement des éoliennes au sein d'une couche limite atmosphérique réaliste**. Le logiciel propose un **couplage entre des modèles aérodynamiques d'éoliennes et Meso-NH**, le modèle météorologique à maille fine développé par le Centre national de recherches météorologiques et le Laboratoire d'aérodynamique. Les travaux réalisés se sont également attachés à valider les résultats des calculs par confrontation à des cas expérimentaux(1).

La capacité à reproduire des états atmosphériques complexes a été récemment démontrée(2) au travers du cas de la formation nuageuse du parc offshore danois de Horns Rev 1, laquelle n'avait jusqu'alors jamais été reproduite avec autant de détails (figure).

A.



B.



A. Parc de Horns Rev (Vattenfall ; Photo : Christian Steiness)

B. Simulation numérique (2)

La modélisation hautement réaliste de ce nouvel outil numérique, bientôt *open source*, élargit le champ des possibles pour la simulation des parcs éoliens. Il est d'ores et déjà utilisé par IFPEN pour calibrer les modèles d'optimisation d'agencement des éoliennes ainsi que pour étudier les interactions entre les parcs et la météorologie locale.

*Thèse intitulée « **Modélisation à fine échelle des interactions entre parcs éoliens et météorologie locale** »

(1) P.-A. Joulin, M.-L. Mayol, F. Blondel, V. Masson, Q. Rodier, C. Lac. (2019, July). *Journal of Physics: Conference Series* (Vol. 1256, No. 1, p. 012019). IOP Publishing.
DOI : 10.1088/1742-6596/1256/1/012019

(2) P.-A. Joulin, M.-L. Mayol, V. Masson, F. Blondel, Q. Rodie, M. Cathelain, C. Lac. (2020). *Frontiers in Earth Science*, 7, 350.
DOI : 10.3389/feart.2019.00350

Contact scientifique : pierre-antoine.joulin@ifpen.fr

>> NUMÉRO 43 DE SCIENCE@IFPEN

Un nouvel outil numérique pour simuler l'interaction des parcs éoliens et de la météorologie locale

VOUS SEREZ AUSSI INTÉRESSÉ PAR

[LCR CARMEN : une belle année de démarrage](#)

Numéro 43 de Science@ifpen - Publications de jeunes docteurs

16 décembre 2020

Lien vers la page web :