

Sujet de thèse 2026

Évolution des propriétés optiques des précurseurs de suie dans les flammes : approche multi-diagnostics

La formation des particules de suie dans les systèmes de combustion reste l'un des problèmes majeurs encore non résolus en science de la combustion, en raison de la complexité de la transition entre molécules en phase gazeuse et nanoparticules carbonées solides. Comprendre cette transition est essentiel pour améliorer l'efficacité des systèmes de combustion et réduire les émissions polluantes. Dans ce contexte, le laboratoire PC2A développe des diagnostics optiques laser et des approches spectroscopiques avancées afin d'étudier les toutes premières étapes de la formation des suies dans les flammes.

Cette transition se produit dans la zone dite de nucléation des suies et implique une grande diversité d'espèces intermédiaires, telles que les hydrocarbures aromatiques polycycliques (HAPs), les radicaux aromatiques stabilisés par résonance et différents types de clusters moléculaires. Malgré leur rôle central dans la nucléation des suies, la nature et l'évolution de ces espèces restent encore mal comprises.

L'objectif de cette thèse est de mieux caractériser l'évolution des propriétés optiques radiatives des espèces impliquées dans la formation des suies, depuis les précurseurs moléculaires jusqu'aux premières nanoparticules (< 2 nm). L'approche proposée repose sur une stratégie expérimentale multi-diagnostics combinant des techniques optiques laser et des analyses physico-chimiques des espèces présentes dans les flammes. Des diagnostics optiques tels que la fluorescence induite par laser (LIF) et l'incandescence induite par laser (LII) seront utilisés pour étudier les mécanismes d'émission radiative associés aux différentes étapes de la formation des suies. Ces mesures permettront notamment de suivre l'évolution des signatures optiques caractéristiques des espèces aromatiques, des clusters et des nanoparticules naissantes. Afin d'identifier la nature des émetteurs responsables des signaux optiques observés, ces diagnostics seront combinés à des analyses complémentaires incluant la spectrométrie de masse (MS), la mesure des distributions de tailles de particules par mobilité électrique (SMPS) et la résonance paramagnétique électronique (RPE) pour la détection des espèces radicalaires.

En complément de ces approches, le projet pourra être prolongé par des expériences utilisant le rayonnement synchrotron, notamment sur la ligne de lumière DESIRS du synchrotron SOLEIL. Des mesures de spectroscopie photoélectronique résolue en masse (ms-PES) permettraient d'identifier directement certaines espèces aromatiques radicalaires impliquées dans les premières étapes de formation des suies et d'en caractériser les propriétés électroniques. Ces expériences offriraient ainsi un lien direct entre la structure électronique des précurseurs moléculaires et les signatures optiques observées dans les flammes.

En reliant signatures optiques et propriétés physico-chimiques des espèces présentes dans la flamme, cette thèse vise à mieux comprendre les mécanismes fondamentaux gouvernant la transition entre molécules aromatiques et particules de suie. Les résultats attendus permettront d'améliorer l'interprétation des diagnostics optiques utilisés pour l'étude des suies et de contribuer à une meilleure compréhension des processus de nucléation des particules carbonées dans les environnements de combustion.

Mots-clefs : Formation des suies, Précurseurs aromatiques (HAP et radicaux), Diagnostics optiques laser (LIF / LII), Spectrométrie de masse

Date de recrutement envisagée : 1^{er} Octobre 2026

Contact (adresse e-mail) :

Xavier Mercier – xavier.mercier@univ-lille.fr

Alessandro Faccinnetto – alessandro.faccinnetto@univ-lille.fr

Remarques / commentaires supplémentaires :

Ce projet de thèse s'inscrit dans les activités de recherche du laboratoire PC2A sur la formation des suies et le développement de diagnostics optiques avancés pour l'étude des flammes de combustion. Le doctorant ou la doctorante bénéficiera d'un environnement expérimental de pointe (lasers, diagnostics optiques, spectrométrie de masse, plateformes analytiques du CERLA). Des collaborations internationales ainsi que des expériences utilisant le rayonnement synchrotron (notamment au synchrotron SOLEIL) pourront également être envisagées dans le cadre du projet.

Evolution of the Optical Properties of Soot Precursors in Flames: A Multi-Diagnostic Approach

Soot formation in combustion systems remains one of the major unresolved problems in combustion science due to the complexity of the transition from molecules in the gas phase to carbonaceous nanoparticles in the condensed phase. Understanding this transition is crucial for improving combustion efficiency and reducing pollutant emissions. In this context, the PC2A laboratory develops advanced laser diagnostics and spectroscopic approaches to investigate the earliest stages of soot formation in flames.

This transition occurs in the so-called soot inception region and involves a wide variety of intermediate species, such as polycyclic aromatic hydrocarbons (PAHs), resonance-stabilized aromatic radicals, and various types of molecular clusters. Despite their central role in soot inception, the nature and evolution of these species remain poorly understood.

The objective of this PhD project is to better characterize the evolution of the optical and radiative properties of species involved in soot formation, from molecular precursors to the first nanoparticles (< 2 nm). The proposed approach relies on a multi-diagnostic experimental strategy combining laser-based optical techniques with physicochemical analyses of species present in flames. Optical diagnostics such as Laser-Induced Fluorescence (LIF) and Laser-Induced Incandescence (LII) will be used to investigate the radiative emission mechanisms associated with the different stages of soot formation. These measurements will make it possible to track the evolution of optical signatures characteristic of aromatic species, molecular clusters, and incipient nanoparticles. To identify the nature of the emitters responsible for the observed optical signals, these diagnostics will be combined with complementary analyses including mass spectrometry (MS), particle size distribution measurements using a Scanning Mobility Particle Sizer (SMPS), and Electron Paramagnetic Resonance (EPR) for the detection of radical species.

In addition to these approaches, the project may be extended through experiments using synchrotron radiation, in particular at the DESIRS beamline of the SOLEIL synchrotron. Mass-selected photoelectron spectroscopy (ms-PES) measurements would enable the direct identification of key aromatic radical species involved in the earliest stages of soot formation and provide insight into their electronic properties. These experiments would establish a direct link between the electronic structure of molecular precursors and the optical signatures observed in flames.

By correlating optical signatures with the physicochemical properties of species present in the flame, this PhD project aims to improve our understanding of the fundamental mechanisms governing the transition from aromatic molecules to soot particles. The expected results will help improve the interpretation of optical diagnostics used to study soot and contribute to a better understanding of carbon nanoparticle inception processes in combustion environments.

Keywords: Soot formation, Aromatic precursors (PAHs and radicals), Laser optical diagnostics (LIF / LII), Mass spectrometry

Expected starting date: October 1st, 2026

Contact:

Xavier Mercier – xavier.mercier@univ-lille.fr

Alessandro Faccinnetto – alessandro.faccinnetto@univ-lille.fr

Additional comments:

This PhD project is part of the research activities of the PC2A laboratory on soot formation and the development of advanced optical diagnostics for combustion studies. The PhD candidate will benefit from a state-of-the-art experimental environment including laser systems, optical diagnostics, mass spectrometry, and analytical platforms available within the CERLA facility. International collaborations as well as experiments using synchrotron radiation (notably at the SOLEIL synchrotron) may also be conducted as part of the project.