

## Ecole Doctorale des Sciences Fondamentales

### SUJET DE THESE

#### **Titre de la thèse : Nouveaux fluides technologiques pour la production de froid : étude thermodynamique expérimentale et modélisation**

Directeur de thèse : Jean-Yves Coxam – Karine Ballerat-Busserolles

Unité de rattachement : ICCF

Equipe : TIM

Etablissement de rattachement : Université Clermont-Auvergne

Courriel et téléphone : j-yves.coxam@uca.fr / karine.ballerat@uca.fr

0473407190 / 0473407189

Co-encadrant éventuel : Yohann Coulier

Unité de rattachement : ICCF

Etablissement de rattachement : Université Clermont-Auvergne

#### **Résumé :**

L'objectif de cette thèse est la caractérisation de systèmes  $\{CO_2 - HFO\}$ (1) ou  $\{CO_2 - \text{molécules organiques oxygénées}\}$  pour l'étude de leur potentiel d'utilisation dans des machines thermiques destinées à la production de froid (pompes à chaleurs, ORC). Ces nouveaux systèmes permettront une alternative à l'utilisation des chlorofluorocarbures (CFC) et Hydrochlorofluorocarbure (HCHC) en réfrigération<sup>(1)</sup>. Le développement de pompes à chaleur de machine à cycle organique de Rankine nécessite la connaissance des grandeurs thermodynamiques et des diagrammes de phases associés aux systèmes mis en jeu. La représentation des propriétés thermodynamiques repose sur le développement d'équations d'état, de modèle d'énergie de Gibbs ou d'outils de simulation moléculaire. Le développement de l'ensemble de ces outils théoriques nécessite l'existence d'un ensemble de données expérimentales. Ces données sont indispensables pour ajuster des paramètres d'interactions moléculaires, ainsi que pour les tests de robustesse des modèles dans l'estimation des propriétés physicochimiques. A l'heure actuelle il existe peu de techniques expérimentales pour l'étude des propriétés énergétiques ou des diagrammes de phases aux températures sub ambiantes. Le volet expérimental de ce projet sera centré sur la mise au point de techniques calorimétriques pour la détermination de capacité calorifiques et d'enthalpies. Le traitement des données expérimentales nécessitant les connaissances des propriétés volumiques, ce développement expérimental inclura des techniques de détermination de masses volumiques dans les mêmes conditions de température. Les développements se feront sur la base de l'expérience au laboratoire sur la mesure des capacités calorifiques<sup>(2)</sup> et enthalpiques<sup>(3-4)</sup> à basses températures. Les modèles d'énergie de Gibbs seront développer dans le projet, le travail sur les équations d'états et de simulation moléculaires pourront se faire par le biais de collaboration avec des laboratoires et équipes extérieures.

1- European Environment Agency, Fluorinated greenhouse gases 2013, EEA Technical report No 15/2014

## Ecole Doctorale des Sciences Fondamentales

- 2- R. Hykrda, J.-Y. Coxam, V. Majer. *Int. J. Thermophys.*, 2004, 25 (6), 1677-1694.
- 3- J.Y. Coxam, S. E. Gillespie, J. L. Oscarson, and R. M. Izatt, *J. Chem. Thermodyn.* 27, 1133 (1995).
- 4- Y. Coulier, A. Iowe, P. Tremaine, J-Y. Coxam, K. Ballerat-Busserolles. *Int. J. Greenh Gas Cont.*, 2016,47, 322-329