

ETABLISSEMENT :

Laboratoire(s) de Rattachement : Unité de Catalyse et Chimie du Solide (UCCS, UMR 8181)

Domaine scientifique, Spécialité : **DS4 | Chimie organique, minérale, industrielle**

Direction de thèse : Sauthier Mathieu, Professeur, mathieu.sauthier@univ-lille.fr

Co-direction : Merle Nicolas, Maître de conférences, nicolas.merle@univ-lille.fr

Co-encadrement (personnel non HDR) : Rigoulet Mathilde, Chercheuse MSCA, mathilde.rigoulet@univ-lille.fr

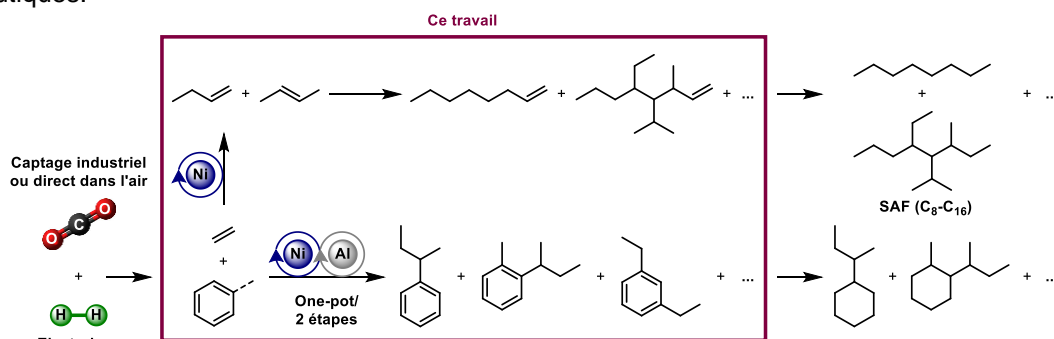
Financement : Thèse labélisée obtenue

Titre de la thèse : Cycloalcanes issus du CO₂ comme carburant d'aviation durable

Contexte : La trajectoire visant à réduire les émissions de CO₂ poussent l'aviation européenne à recourir massivement aux carburants durables (SAF). La réglementation ReFuelEU impose qu'en 2050, 70 % des carburants fournis aux aéroports de l'UE soient des SAF, dont 35 % de carburants synthétiques, soit 50 Mt. Les e-fuels actuels, produits à partir de CO₂ et d'hydrogène via la synthèse Fischer-Tropsch, présentent toutefois des limites : faible sélectivité et production majoritaire de chaînes linéaires dont le point de fusion trop élevé ne répond pas aux normes aéronautiques.

Projet de recherche :

Ce projet vise à développer une voie synthétique alternative plus sélective. La stratégie comporte trois étapes (voir schéma) : la conversion du CO₂ en aromatiques et en oléfines légères, déjà



largement documentée dans la littérature^[1] ; **la dimérisation des oléfines suivie de l'alkylation directe des aromatiques dans un même réacteur**, qui sera réalisée à l'UCCS ; afin d'obtenir des alkylaromatiques C₁₀-C₁₆. Ces composés seront ensuite hydrogénés pour produire des cycloalcanes de haute qualité,^[2] mieux adaptés aux exigences des carburants aéronautiques durables.

Objectifs : L'étape d'oligomérisation/alkylation peut être catalysée par des systèmes Ni/Al en phase homogène,^[3] offrant de bonnes activités et sélectivités, mais posant des problèmes de séparation du nickel et de l'aluminium après réaction et se prêtant mal aux procédés industriels de grande capacité. L'immobilisation du catalyseur sur un support solide constitue une alternative, mais les catalyseurs hétérogènes actuels sont moins performants et présentent une recyclabilité limitée, notamment en raison du fort excès d'aluminium requis (>400 équivalents). Le développement d'un catalyseur hétérogène actif, sélectif et recyclable pour produire des alkyl-aromatiques dans la gamme du kérosène est donc nécessaire. Récemment, grâce à l'approche SOMC (Surface Organometallic Chemistry),^[4] un nouveau système de nickel supporté sur silice montré une sélectivité prometteuse vers les alkylbenzènes compatibles avec les carburants d'aviation. Le projet vise à améliorer ce concept.

Profil recherché : Le projet comprendra la préparation, la caractérisation et l'évaluation de catalyseurs ; la personne candidate idéale doit donc faire preuve de curiosité scientifique et être capable d'effectuer plusieurs tâches à la fois. Des connaissances en chimie organométallique, en catalyse et sur plusieurs techniques spectroscopiques telles que l'IR et la RMN, ainsi qu'une expérience des techniques de manipulation en atmosphère inerte (ligne Schlenk, boîte à gants) seront appréciées. Si la personne le souhaite, elle pourra suivre une formation en modélisation moléculaire (calculs DFT). Les articles et présentations seront rédigés en anglais.

Bibliographie

- [1] I. Nezam, W. Zhou, G. S. Gusmão, M. J. Realf, Y. Wang, A. J. Medford, C. W. Jones, *Journal of CO2 Utilization* **2021**, *45*, 101405.
- [2] A. Stanislaus, B. H. Cooper, *Catal. Rev.* **1994**, *36*, 75–123.
- [3] H. Olivier-Bourbigou, P. A. R. Breuil, L. Magna, T. Michel, M. F. Espada Pastor, D. Delcroix, *Chem. Rev.* **2020**, *120*, 7919–7983.
- [4] C. Copéret *et al.* *Chem. Rev.* **2016**, *116*, 323–421.

Date de recrutement envisagée : 01/10/2026

Contact : mathieu.sauthier@univ-lille.fr, nicolas.merle@univ-lille.fr, mathilde.rigoulet@univ-lille.fr

ESTABLISHMENT:

Laboratory(ies) of affiliation: Unité de Catalyse et Chimie du Solide (UCCS, UMR 8181)

Scientific field, Speciality: DS4 | Organic, Inorganic and Industrial Chemistry

Thesis director: Sauthier Mathieu, Professor, mathieu.sauthier@univ-lille.fr

Co-director: Merle Nicolas, Assistant Professor, nicolas.merle@univ-lille.fr

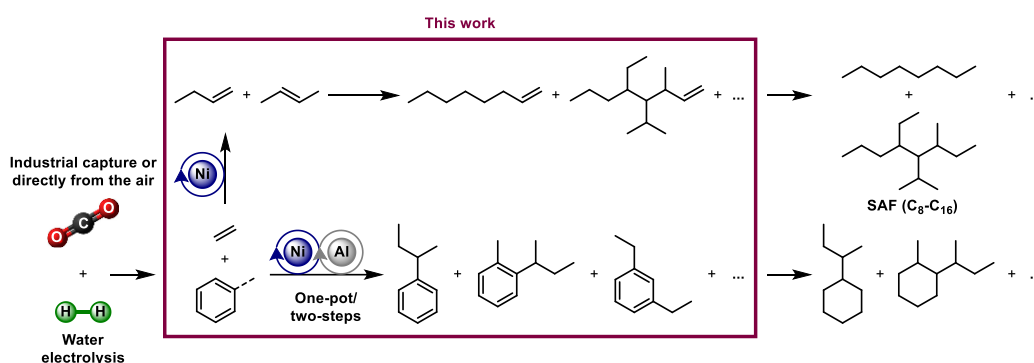
Co-supervisor (non HDR): Rigoulet Mathilde, MSCA Researcher, mathilde.rigoulet@univ-lille.fr

Funding: Certified thesis obtained

Title of the thesis: Cycloalkanes derived from CO₂ as a sustainable aviation fuel

Context: The trajectory towards reducing CO₂ emissions is pushing European aviation to make extensive use of sustainable aviation fuels (SAF). The ReFuelEU regulation requires that by 2050, 70% of the fuel supplied to EU airports be SAF, including 35% synthetic fuels, or 50 Mt. However, current e-fuels, produced from CO₂ and hydrogen via Fischer-Tropsch synthesis, have limitations: low selectivity and major production of linear chains with melting points that are too high to meet aviation standards.

Research project: This project aims to develop an alternative synthetic route, more selective. The strategy involves three steps (see scheme): the conversion of CO₂ into aromatics and light olefins, already widely documented in the literature^[1]; the dimerization of olefins followed by the direct alkylation of aromatics in the same reactor, which will be carried out at UCCS; in order to obtain C₁₀–C₁₆ alkylaromatics. These compounds will then be hydrogenated to produce high-quality cycloalkanes,^[2] better suited to the requirements of sustainable aviation fuels.



Objectives: The oligomerization/alkylation step can be catalyzed by homogeneous Ni/Al systems,^[3] which offer good activity and selectivity but are problematic for the separation of nickel and aluminum after the reaction and are not well suited to large-scale industrial processes. Immobilizing the catalyst on a solid support is an alternative, but current heterogeneous catalysts are less efficient and have limited recyclability, particularly due to the high excess of aluminum required (>400 equivalents). The development of an active, selective, and recyclable heterogeneous catalyst for producing alkyl aromatics in the kerosene range is therefore necessary. Recently, using the SOMC (Surface Organometallic Chemistry) approach,^[4] a new nickel system supported on silica has shown promising selectivity towards alkylbenzenes compatible with aviation fuels. The project aims to improve this concept.

Profile of the candidate: The project will include preparation characterization and evaluation of catalysts; thus the ideal candidate must have scientific curiosity and be able to multitask. Knowledge in organometallic chemistry, catalysis and several spectroscopic technics such as IR and NMR as well as experience in inert atmosphere handling technics (Schlenk line, glove box) will be appreciated. If desired, the candidate may receive training in molecular modeling (DFT calculations). Articles and presentations will be written in English.

Bibliographie

- [1] I. Nezam, W. Zhou, G. S. Gusmão, M. J. Realf, Y. Wang, A. J. Medford, C. W. Jones, *Journal of CO2 Utilization* **2021**, *45*, 101405.
- [2] A. Stanislaus, B. H. Cooper, *Catal. Rev.* **1994**, *36*, 75–123.
- [3] H. Olivier-Bourbigou, P. A. R. Breuil, L. Magna, T. Michel, M. F. Espada Pastor, D. Delcroix, *Chem. Rev.* **2020**, *120*, 7919–7983.
- [4] C. Copéret *et al.* *Chem. Rev.* **2016**, *116*, 323–421.

Expected date of recruitment: 1st October 2026

Contact: mathieu.sauthier@univ-lille.fr, nicolas.merle@univ-lille.fr, mathilde.rigoulet@univ-lille.fr