

## Développement d'un modèle chimique multiphasique pour l'oxydation des alcanes

### Sujet :

Les composés organiques volatils émis dans la troposphère sont oxydés selon des processus complexes impliquant une multitude d'intermédiaires. Ces intermédiaires jouent un rôle clé sur la chimie de la troposphère : (i) ils sont directement impliqués dans la production de O<sub>3</sub> et dans le bilan des NO<sub>x</sub> et de HO<sub>x</sub> aux échelles régionales et globale, (ii) ils conduisent à la production d'aérosols organiques secondaires (AOS) par nucléation et condensation sur des aérosols préexistants et/ou par polymérisation et (iii) ils sont hydrosolubles et interagissent avec la chimie des oxydants lors d'épisodes nuageux. Ces intermédiaires organiques peuvent ainsi avoir des effets significatifs sur le bilan radiatif (donc le climat), la réactivité de la troposphère et sa composition. Toutefois, l'importance de ces effets reste difficilement quantifiable, principalement par manque d'information sur la composition des phases gazeuse et condensées en composés organiques secondaires.

L'évaluation de l'effet des organiques secondaires sur les épisodes de pollution, la capacité oxydante de la troposphère ou le climat nécessite des outils de modélisation qui traquent l'identité et la réactivité du carbone organique dans les différentes phases jusqu'aux produits ultimes de l'oxydation, CO et CO<sub>2</sub>. Le LISA a développé, en collaboration avec le NCAR (Boulder, Colorado) un système expert permettant d'écrire de manière explicite et automatique le schéma d'oxydation des COV en phase gazeuse. Ce système repose sur deux éléments principaux :

- le protocole définissant le jeu des règles à appliquer pour sélectionner les chemins réactionnels et attribuer les constantes cinétiques nécessaires au développement du schéma chimique.
- le générateur, qui est le programme informatique permettant d'appliquer le protocole à un ensemble de composés primaires fournis en entrée pour créer automatiquement le schéma d'oxydation explicite.

Les alcanes sont des composés massivement émis par les activités humaines (près de 50 % des émissions). Ces composés jouent ainsi un rôle majeur dans le développement d'épisodes de pollution. Des études récentes de laboratoire montrent que les modèles chimiques actuels ne permettent pas de représenter de façon appropriée l'évolution de ces espèces. Des nouveaux mécanismes réactionnels sont actuellement proposés pour décrire leur évolution chimique dans l'atmosphère. Ceux-ci conduisent vraisemblablement à modifier le rôle des alcanes dans la production d'ozone et d'aérosols. Le travail proposé vise à tester ces mécanismes en les intégrant dans le générateur. La fiabilité des schémas chimiques ainsi développée sera testée par comparaison à des observations en chambre de simulation atmosphérique.

### Compétences souhaitées du candidat :

Le candidat devra disposer de notions élémentaires de physico-chimie.

### Collaborations et programme dans lequel s'insère ce sujet :

Une collaboration sur le sujet est engagée avec le National Center for Atmospheric Research (NCAR), Boulder, Colorado.

**Lieu du stage :** LISA, UMR CNRS 7583, Créteil

**Responsable :** B. Aumont, [aumont@lisa.univ-paris12.fr](mailto:aumont@lisa.univ-paris12.fr), Tel : 01 45 17 15 92