

MODELISATION DES MARQUEURS MOLECULAIRES D'AEROSOLS ORGANIQUES POUR EVALUER LE PARTAGE GAZ/PARTICULES DES COMPOSES ORGANIQUES DANS L'ATMOSPHERE

Nos réf. : Ineris - [CGR] - ID 2726173

Date de publication : 11/04/2022

Lieu : Verneuil-en-Halatte (60) - accessible en transport en commun, à 40 mn au Nord de Paris

Type de contrat : Thèse

Contact : florian.couvidat@ineris.fr

Les aérosols atmosphériques ont un impact sur la qualité de l'air et le climat. La composante organique (AO, aérosols organiques) représente une large part des aérosols. Les AO peuvent aussi bien être émis de façon directe (AO primaires) que formés par l'oxydation des composés organiques volatils à partir de précurseurs d'aérosols organiques secondaires (AOS). Les sources, primaires et secondaires, peuvent aussi bien être d'origine biogénique que d'origine anthropique.

De nombreux phénomènes complexes interviennent dans la formation des AO (partage gaz/particule de composés semi-volatils influencé notamment par l'effet de la viscosité, chimie gazeuse ou aqueuse complexe et non-linéaire, propriétés hydrophiles ou hydrophobes des composés, oligomérisation, etc...). Du fait des manques de connaissances sur ces processus, les modèles de Chimie-Transport (comme le modèle CHIMERE codéveloppé par l'INERIS et le CNRS) utilisent des paramétrisations simplifiées ne représentant pas l'ensemble de ces phénomènes et tendent à sous-estimer la formation des AO. Par ailleurs, de nombreuses études pointent une dépendance complexe de la formation des AO aux concentrations de radicaux (HO₂, RO₂, OH), d'ozone, d'oxydes d'azotes (NO_x), mais aussi aux concentrations d'aérosols inorganiques.

Les marqueurs moléculaires des AO sont des composés chimiques caractéristiques des sources d'émissions primaires des AO ou des processus de formation des AOS à partir de précurseurs spécifiques. Intégrer de tels composés dans les modèles permet d'améliorer la représentation des AO dans les modèles. Nous avons auparavant démontré, en utilisant une telle approche, que les modèles sous-estimaient fortement le partage gaz/particule des composés organiques et ne prenaient pas en compte certains précurseurs d'AOS ([thèse de Grazia Lanzafame soutenue en 2019](#)).

L'objectif principal du travail de thèse proposée ici consistera à améliorer la représentation des AO, des marqueurs et plus particulièrement du partage gaz/particule dans le modèle de qualité de l'air CHIMERE. A terme, ce travail apportera des éléments clés sur les processus de formation des marqueurs moléculaires afin de rendre compte de l'utilisation potentielle de leur représentation dans le modèle CHIMERE dans un but de traçage et d'évaluation des sources et précurseurs d'AO.

Dans ce contexte, des études récentes montrent que le partage gaz/particule pourrait être fortement affecté par la viscosité des AO. En effet, celle-ci pourrait affecter la dynamique de condensation/évaporation des composés organiques et pourrait par exemple piéger des composés au sein de la particule. Le partage gaz/particule s'éloignerait alors de l'équilibre thermodynamique, habituellement supposé en modélisation 3D. Dans la modélisation 3D, la méthodologie couramment utilisée pour développer les mécanismes de formation des AO est basée sur des données expérimentales (obtenues lors d'essais en chambre de simulation atmosphériques). Cependant, elle ne permet pas de prendre en compte de manière adéquate la faible volatilité des AO ainsi que l'effet de la viscosité qui influence les processus de condensation/évaporation des composés organiques. Une nouvelle méthodologie a ainsi été développée pour pallier ces difficultés en générant des mécanismes réduits à partir de mécanismes complexes (outil GENOA, thèse de Zhizhao Wang, soutenance prévue en 2022).

Les étapes de ce travail de thèse concerneront :

(1) L'amélioration des mécanismes réduits de formation de divers marqueurs moléculaires d'AO secondaires d'origines biogénique et anthropique à partir des mécanismes disponibles dans la littérature et de l'outil GENOA. La liste des marqueurs traités durant la thèse de Grazia Lanzafame sera étendue à de nouveaux composés (notamment des marqueurs des sesquiterpènes et des spores ou l'oxalique acide).

(2) L'implémentation de ces nouveaux mécanismes dans le modèle de qualité de l'air CHIMERE et l'évaluation des résultats du modèle par comparaison à des mesures in-situ (données INERIS des thèses de Grazia Lanzafame et Deepchandra Srivastava, programme CARA, projet Landex).

(3) L'évaluation de l'effet de la viscosité sur le partage gaz/particule des marqueurs moléculaires.

PROFIL

- Diplôme de Master ou école d'ingénieurs en chimie ou en modélisation
- Solides compétences en programmation et en modélisation
- Des connaissances en chimie seraient également appréciées
- Autonomie, rigueur scientifique, adaptabilité, capacités de communication et de rédaction.
- Bon niveau d'anglais

Ce poste est ouvert aux personnes en situation de handicap.