

CONTRACTS DOCTORAUX 2025

Titre du projet de thèse : Modélisation à l'échelle moléculaire de la réactivité complexe de l'ozone avec des molécules organiques en phase particulaire

Directeurs de thèse : C. Toubin (PhLAM) / D. Duflot (PhLAM)

Résumé du projet de thèse (en 20 lignes maximum) :

Les réactions entre les gaz traces de l'atmosphère terrestre et les particules d'aérosol sont régies par de multiples processus physico-chimiques. Ces processus incluent l'adsorption et la désorption des gaz traces à la surface des particules, leur transfert de la surface vers le volume des particules, ainsi que leur réaction avec des réactifs en phase particulaire. Les vitesses de chacune de ces étapes dépendent de l'identité du gaz trace, de la composition chimique de la particule, ainsi que de ses propriétés physiques telles que la viscosité et l'état de phase. L'interdépendance de ces processus de transport et de réaction, spécifiques au système, peut rendre les prévisions de cinétique complexes et exigeantes en termes de calcul, en particulier lorsque le mécanisme de réaction en phase particulaire est multi-étapes [1].

Cette thèse vise à explorer la dynamique des réactions hétérogènes en phase particulaire, en se concentrant sur l'ozonolyse des aérosols organiques dans une gamme de températures caractéristiques de la troposphère. Afin de quantifier les contributions des différents processus à la réactivité globale, diverses méthodes seront utilisées : calculs de chimie quantique, dynamique moléculaire classique et ab initio, ainsi que des méthodes dites hybrides (QM/MM ou QM/QM'). Cette thèse s'appuiera sur la méthodologie précédemment utilisée dans une étude antérieure [2] et bénéficiera des échanges avec le groupe expérimental de Kevin Wilson.

[1] Ryan Reynolds, Musahid Ahmed, and Kevin R. Wilson, *ACS Earth and Space Chemistry* **2023** 7 (4), 901-911, DOI:[10.1021/acsearthspacechem.3c00026](https://doi.org/10.1021/acsearthspacechem.3c00026)

[2] Rawan AbouHaidar, Denis Duflot & Céline Toubin (2023) Theoretical characterization of the kinetics of the multiphase ozonolysis of an aqueous maleic acid droplet, *Aerosol Science and Technology*, DOI: [10.1080/02786826.2023.2286341](https://doi.org/10.1080/02786826.2023.2286341)

Date de recrutement envisagée : 01/09/2025

Contact (adresse e-mail) : celine.toubin@univ-lille.fr

Remarques/commentaires supplémentaires :