

CONTRACTS DOCTORAUX 2023

Titre du projet de thèse : **Caractérisation spectroscopique de précurseurs atmosphériques stables et instables ainsi que leurs micro-solvatation en phase gazeuse.**

Directeur de thèse : **Laurent Margulès**

Co-directeur et co-encadrants (le cas échéant) : **Elias Neeman**

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

Des grandes quantités de composés organiques volatils (COV) émises dans l'atmosphère par des sources naturelles (p. ex. écosystèmes terrestres et marins, volcans etc.) et anthropiques (p. ex. combustion de fossiles, activités industrielles etc.). Les COV subissent une série oxydation et de dégradation dans l'atmosphère en perturbant la qualité de l'air. Ils sont considérés comme des précurseurs d'aérosols organiques secondaires (AOS) et ont un impact direct ou indirect sur la santé humaine et affectent également l'équilibre énergétique global de la planète en diffusant ou en absorbant le rayonnement solaire entrant et en agissant comme des noyaux de condensation des nuages. Les AOS représentent la plus grande source d'incertitude dans la modélisation du climat car leur composition, formation et évolution restent mal comprises et méritent une plus grande attention. Leurs effets sur le climat sont très complexes et loin d'être bien connus, la première étape de la formation des AOS est le processus de pré-nucléation par un complexe moléculaire qui forme le "noyau critique" puis, par condensation continue, croît jusqu'à une taille d'aérosol détectable. Des approches expérimentales deviennent une nécessité afin de comprendre le rôle des COV dans la formation des aérosols en particulier à l'échelle moléculaire. Ce projet, à la fois expérimental et théorique, s'appuiera principalement sur la spectroscopie microonde dans le domaine centimétrique et millimétrique sous l'appui de calculs de chimie quantique, à l'aide des spectromètres et de moyens de calculs présents au laboratoire PhLAM.

PhD GRANTS 2023

PhD project title: **Spectroscopic characterization of stable and unstable atmospheric precursors as well as their micro-solvation in gas phase.**

PhD Supervisor: **Laurent Margulès**

Co-supervisor(s) (if any): **Elias Neeman**

PhD project summary (max. 20 lines):

Large quantities of volatile organic compounds (VOCs) are emitted into the atmosphere from both natural (e.g., terrestrial and marine ecosystems, volcanoes, etc.) and anthropogenic (e.g., fossil fuel combustion, industrial activities, etc.) sources. VOCs undergo a series of oxidation and degradation processes in the atmosphere, affecting air quality. They are considered as precursors of secondary organic aerosols (SOA) and have a direct or indirect impact on human health and also affect the global energy balance of the planet by scattering or absorbing incoming solar radiation and acting as cloud condensation nuclei. SOAs represent the greatest source of uncertainty in climate modeling because their composition, formation and evolution remain poorly understood and deserve greater attention. Their effects on climate are very complex and far from being well known, the first step in the formation of SOAs is the process of pre-nucleation by a molecular complex that forms the "critical nucleus" and then, by continuous condensation, grows to a detectable aerosol size. Experimental approaches are becoming a necessity in order to understand the role of VOCs in aerosol formation, especially at the molecular scale. This project, both experimental and theoretical, will rely mainly on microwave spectroscopy in the centimetric and millimetric range, supported by quantum chemistry calculations, using spectrometers and computational means present in the PhLAM laboratory.