

CONTRACTS DOCTORAUX 2023

Titre du projet de thèse : Caractérisation à l'échelle moléculaire de l'activité de surface et de la réactivité des organosulfates. Implications pour l'atmosphère

Directeur de thèse : Denis Duflot (denis.duflot@univ-lille.fr)

Co-directeur et co-encadrants (le cas échéant) : Céline Toubin (celine.toubin@univ-lille.fr)

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

L'impact environnemental des composés atmosphériques est un sujet d'intérêt majeur pour les scientifiques aussi bien que pour le grand public et les décideurs. Parmi ceux-ci, les composés sulfurés constituent une partie importante des aérosols atmosphériques et des gouttelettes des nuages. Les effets sur le climat et la santé des molécules inorganiques telles que les sulfates sont bien connus. En revanche, le destin et l'impact environnemental de leurs dérivés organiques, dont les propriétés et toxicité peuvent être très différentes de leur contrepartie inorganique, restent largement mal connus. Parmi eux, les organosulfates (OS) constituent une composante majeure qui peuvent jouer un rôle important dans les propriétés des aérosols et des gouttelettes ⁽¹⁾. Il est donc crucial de mieux comprendre ces composés. A ce jour, même si leurs mécanismes de formation ont été élucidés, leurs voies de transformation restent largement inexplorées. Afin de combler ces lacunes, nous proposons d'étudier par des méthodes théoriques la réactivité hétérogène et l'activité de surface de ce type de composés.

Par ailleurs, lorsqu'elles sont situées à la surface d'aérosols aqueux, les molécules organiques peuvent notamment contribuer à la formation de noyaux de condensation des nuages (CCN) et sont impliquées dans la réactivité hétérogène. Des simulations de dynamique moléculaire seront conduites pour estimer la tension de surface des OS à la surface de particules aqueuses. De plus, la réactivité sera modélisée au moyen des méthodes de chimie quantique.

(1) [Xu, R., Ge, Y., Kwong, K. C., Poon, H. Y., Wilson, K. R., Yu, J. Z., Chan, M. N.*](#) (2020) "Inorganic Sulfur Species formed upon Heterogeneous OH Oxidation of Organosulfates: A Case Study of Methyl Sulfate", *ACS Earth and Space Chemistry*, 4, 2041–2049.

PhD GRANTS 2023

PhD project title: Theoretical Investigation of the Surface Activity and Reactivity of Organosulfate Aerosols

PhD Supervisor: : Denis Duflot (denis.duflot@univ-lille.fr)

Co-supervisor(s) (if any): Céline Toubin (celine.toubin@univ-lille.fr)

PhD project summary (max. 20 lines):

The environmental impacts of atmospheric compounds are of great interest to scientists, the general public, and policy makers. Among these, sulfur compounds are an important component of atmospheric aerosols and cloud droplets. The health and climate effects of inorganic sulfur compounds such as sulfates are well-documented. On the other hand, the fates and environmental impacts of organosulfur compounds, which can have very different properties and toxicity from their inorganic counterparts, are relatively unknown. Among these, organosulfates (OSs) as a type of major organosulfur compounds, can potentially play an important role in determining the properties of both aerosols and droplets⁽¹⁾. It is thus crucial to better understand these OSs. To date, even though their formation mechanisms have become better understood, their transformation pathways remain largely unexplored. To fill this gap, we propose to investigate by a theoretical approach the heterogeneous reactivity and surface activity of these compounds.

Moreover, when located at the surface of aqueous aerosols, organic molecules can potentially contribute to the formation of cloud condensation nuclei (CCN) and are involved in a series of chemical reactions with gas phase oxidants. Molecular Dynamics simulations will thus be conducted to measure and estimate the surface tension of OSs on aqueous particles. In addition, quantum chemistry calculations will be carried out to estimate the rate of the oxidation reactions in both gas and aqueous phases.

(1) [Xu, R.](#), Ge, Y., [Kwong, K. C.](#), [Poon, H. Y.](#), Wilson, K. R., Yu, J. Z., [Chan, M. N.*](#) (2020) "Inorganic Sulfur Species formed upon Heterogeneous OH Oxidation of Organosulfates: A Case Study of Methyl Sulfate", *ACS Earth and Space Chemistry*, 4, 2041–2049.

