

## **Atelier: « Réactivité hétérogène et processus de nucléation dans les milieux atmosphériques, astrochimiques et en combustion »**

**Dates proposées : Jeudi 31 mai –Vendredi 1<sup>er</sup> juin**  
**A Villeneuve d'Ascq – Amphithéâtre du Cerla**

Les études théoriques et expérimentales relevant de la chimie atmosphérique permettent de caractériser les processus élémentaires à l'échelle moléculaire et d'obtenir des informations fondamentales sur les mécanismes qui gouvernent des processus à l'impact plus global tels que les changements climatiques, la pollution de l'air ou la destruction de l'ozone stratosphérique. Les constantes de vitesse de réactions, rapports de branchement, coefficients de collage (uptake) ou paramètres photochimiques impliqués dans la formation des aérosols organiques secondaires, etc... sont les paramètres fondamentaux qui sont incorporés dans les modèles de chimie-transport à plus grande échelle pour affiner les prédictions/projections et interprétations de la qualité de l'air ou de l'évolution du climat. Une démarche similaire est utilisée dans le domaine de l'astrochimie pour avancer notamment dans la compréhension de la physico-chimie à l'interface gaz/grain interstellaire et la nucléation de la poussière. Ces études sont nécessaires pour décrire l'évolution de la matière interstellaire et produire des données fiables à incorporer dans les bases de données alimentant les modèles astrophysiques. Concernant le domaine de la combustion, l'étude des processus de nucléation des particules de suies et de leur réactivité au sein des flammes est également une problématique qui requiert à la fois le développement de méthodes expérimentales (diagnostics laser, spectrométrie de masse...) et d'outils de modélisation cinétique pour permettre l'interprétation des données et établir les schémas réactionnels à l'œuvre dans ces processus.

Établir des connexions entre les expériences de laboratoire et la modélisation théorique est également crucial pour améliorer notre compréhension de ces processus, mais ce lien théorie /expérience n'est pas toujours simple et évident à mettre en place compte-tenu des différences d'échelle et de la complexité des particules mises en jeu. Au niveau de la modélisation à l'échelle moléculaire, les développements méthodologiques pour décrire les interactions (potentiels réactifs, DFTB, QM/MM) et la dynamique classique ou quantique (MD, PIMD, MCTDH...) permet d'envisager des systèmes de plus en plus complexes en prenant en compte explicitement la phase condensée (glace, suies, particules carbonées ou minérales).

L'objectif de cet atelier est de réunir, sur deux jours, les chercheurs s'intéressant aux processus hétérogènes, en particulier à la réactivité et à la nucléation, en lien avec la chimie atmosphérique ou un domaine d'application connexe (chimie interstellaire, chimie de la combustion...). Ces journées permettront des discussions entre théoriciens et expérimentateurs afin d'identifier les développements théoriques et les protocoles expérimentaux permettant de faire progresser nos connaissances dans ce domaine de la physico-chimie.

Les points suivants avec leurs applications couvrant notamment les domaines de la chimie de l'atmosphère, de la combustion et l'astrochimie seront plus spécifiquement développés :

- Synergie entre études théoriques et expérimentales (faisabilité/limitations)
- Réactivité en phase hétérogène (présence de surface/ grains/ particules)
- Croissance des grains/ aérosols /nuages: réactivité chimique
- Formation des aérosols secondaires dans l'atmosphère, des particules de suie dans les flammes (nucléation)
- Influence du milieu : température, confinement, humidité relative, composition chimique etc.

## **Programme prévisionnel**

Jeudi 31 mai

9h30 - 13h Communications orales (5)

13h - 14h30 Déjeuner

14h30 - 16h30 Communications orales (4)

16h30 - 18h30 Séance poster « Beer and Cheese »

Vendredi 1<sup>er</sup> juin

9h - 12h Communications orales (5)

12h – 13h Table ronde

13h - 14h30 Déjeuner

14h30 – 16h Visites d'expériences (PhLAM, PC2A...)

### **Intervenants confirmés :**

Ludovic Martin Gondre (UTINAM, Besançon)

Jérôme Cuny (LCPQ, Toulouse)

Eric Michoulier (LCAR, Toulouse)

Sébastien Zamith (LCAR, Toulouse)

Marie-Pierre Gageot (LAMBE, Evry)

Claire Pirim (PhLAM, Lille)

Denis Duflot (PhLAM, Lille)

Xavier Mercier (PC2A Lille)

Emilie Perraudin (EPOC, Bordeaux)

Ismael Ortega (Onera)

Alexandre Tomas (IMT-Lille Douai)

### **Comité Scientifique/d'organisation**

Pascale Desgroux (PC2A, Lille) (GDR Suie)

Xavier Mercier (PC2A, Lille) (GDR Suie)

Emilie Perraudin (EPOC, Bordeaux) (GDR Suie)

Cristian Focsa (PhLAM, Lille GDR Suie)

Aude Simon (LCPQ, Toulouse)(GDR EMIE)

Céline Toubin (PhLAM, Lille) (GDR EMIE, GDR Suie)

Denis Duflot (PhLAM, Lille) (GDR EMIE)