

BIOSOA

Influences biogéniques sur les oxydants et l'Aérosol Secondaire Organique: études théoriques, de laboratoire et de modélisation

DUREE DU PROJET
15/12/2010 – 15/12/2014

BUDGET
1.156.978 €

MOTS CLES

Aérosol organique secondaire; composition troposphérique; capacité oxydante; biogénique; isoprène, monoterpènes

CONTEXTE

En raison de leurs émissions élevées (~1000 mégatonnes par an globalement), les composés organiques volatils biogéniques (COVBs) produits par les plantes jouent un rôle-clé pour la qualité de l'air et le système climatique. Leur oxydation atmosphérique est une grande source de l'aérosol organique secondaire (AOS), une composante importante de la matière particulaire fine ; elle influence également fortement l'ozone troposphérique et la capacité oxydante de l'atmosphère, et donc l'abondance de gaz à effet climatique important comme le méthane. De grandes incertitudes subsistent, cependant, concernant (1) l'influence de l'isoprène, le COVB le plus important à l'échelle globale, sur la concentration du radical hydroxyle (OH), (2) les chemins de formation de constituants majeurs de l'AOS, et (3) la magnitude de la source d'AOS due aux différents COVBs.

DESCRIPTION DU PROJET

Objectifs

Sur la base de deux projets du précédent programme SSD (IBOOT et BIOSOL, 2006-2010), nous proposons de mener des études théoriques, de laboratoire et de modélisation afin de mieux comprendre et quantifier le rôle des COVBs comme source d'AOS et en tant que facteur majeur influençant la capacité oxydante de l'atmosphère. Ce projet veut fournir une base scientifique améliorée aux politiques environnementales, surtout au niveau international, puisque les effets de contrôles d'émissions de polluants sur par ex. la qualité de l'air ne peuvent être déterminés sans une meilleure connaissance des processus d'oxydation de BVOCs et de formation d'AOS

Les objectifs spécifiques de BIOSOA sont

1. déterminer l'impact des émissions d'isoprène sur la concentration des oxydants,
2. de mettre en lumière les chemins de formation de constituants clés de l'AOS de plusieurs COVBs,
3. de quantifier la contribution de COVBs spécifiques à l'aérosol atmosphérique, et
4. de déterminer l'impact des émissions de COVBs sur les aérosols organiques à l'échelle globale.

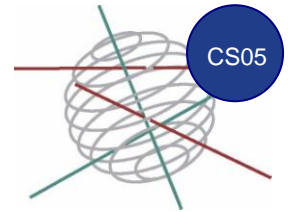
Méthodologie

- Des expériences de laboratoire seront menées (UA, IFT) dans le but d'élucider les mécanismes de formation de traceurs-clés de l'AOS d'isoprène et de α -pinène, qu'on a trouvé en quantité substantielle dans l'aérosol ambiant. La structure de traceurs inconnus de l'AOS de α -pinène sera également élucidée.
- Une méthode appropriée sera développée (UA) afin d'estimer la contribution de isoprène et α -pinène aux concentrations ambiantes d'aérosol. Cette méthode sera appliquée aux aérosols échantillonnés lors de campagnes de mesures en Finlande, en Hongrie et peut-être en Amazonie.
- Un mécanisme complet d'oxydation d'isoprène par le radical hydroxyle sera développé (KULeuven), en appliquant les méthodes avancées utilisées précédemment, et il sera évalué à l'aide de données de laboratoire et de terrain (KULeuven, IASB-BIRA).
- Un modèle détaillé de chimie gazeuse et aqueuse sera développé (IASB-BIRA), basé sur des méthodes nouvellement élaborées pour l'estimation des propriétés thermodynamiques des constituants de l'aérosol, dans le but de déterminer le rôle de la chimie des nuages sur le bilan de l'AOS. Ce modèle sera testé à l'aide de données de laboratoire et de terrain.
- Une réaction-clé pour cette chimie multi-phases sera étudiée au laboratoire (KULeuven).
- L'impact des émissions de COVBs sur le bilan et la distribution d'AOS sera étudiée avec un modèle global (IASB-BIRA). Les contributions calculées de différents COVBs seront comparées aux estimations basées sur les observations de composés-marqueurs..



BIOSEA

Influences biogéniques sur les oxydants et l'Aérosol Secondaire Organique: études théoriques, de laboratoire et de modélisation



INTERACTION ENTRE LES DIFFERENTS PARTENAIRES

Une coopération étroite entre les partenaires sera essentielle au succès de BIOSOA. Les résultats théoriques et de laboratoire obtenus à KULeuven seront utilisés dans les modèles de dégradation de COVBs et de formation d'AOS développés à IASB-BIRA. L'évaluation de ces modèles à l'aide de données expérimentales (de laboratoire et de terrain) devrait fournir de nouvelles contraintes sur le mécanisme basé sur les développements théoriques.

Les expériences de laboratoire sur la formation et la transformation de traceurs d'AOS seront menées dans une chambre de réaction à IFT ; l'analyse chimique des échantillons d'aérosol et l'interprétation des résultats sera effectuée à UA. Les résultats de modélisation globale seront évalués grâce aux contributions relatives des différents COVBs aux concentrations d'AOS estimées sur la base de concentrations de composés marqueurs.

RESULTATS ATTENDUS

- Une meilleure compréhension des processus menant à la formation d'AOS biogénique, provenant en particulier d'isoprène et α -pinène
- Une meilleure quantification de la contribution des différents COVBs aux concentrations d'aérosols
- Un mécanisme chimique détaillé pour l'oxydation d'isoprène par OH évalué à l'aide de données de laboratoire et de données de terrain
- Un modèle détaillé de formation d'AOS, considérant la chimie dans les nuages ainsi que les processus de transformation d'AOS ;
- L'évaluation des influences respectives des émissions biogéniques et anthropiques sur le bilan et l'abondance de l'AOS.

PARTENAIRES

Activités

Le groupe de modélisation de chimie troposphérique de IASB-BIRA contribue à la modélisation des émissions, le développement et l'évaluation de mécanismes chimiques, la modélisation de la formation d'AOS et la modélisation globale.

Le groupe de KULeuven contribue à la cinétique chimique de réactions élémentaires, ainsi qu'à l'application de méthodes avancées de chimie quantique pour l'élaboration de mécanismes chimiques et la cinétique réactionnelle.

Le groupe de UA est spécialisé dans la caractérisation de traceurs d'AOS de composés organiques biogéniques, ainsi que dans le développement de méthodes appropriées pour la détermination des contributions de l'AOS à l'aérosol ambiant.

Le groupe de IFT a une longue expérience dans les études de laboratoire et est bien équipé pour les expériences en chambre réactionnelles en conditions atmosphériques simulées.

COORDONNEES

Coordinateur

Jean-François Müller

Institut d'Aéronomie Spatiale de Belgique
Avenue Circulaire 3

B-1180 Bruxelles

Tél. : +32 (0)2 373.03.66

Fax : +32 (0)2 374.84.23

Email : Jean-Francois.Muller@aeronomie.be

<http://tropo.aeronomie.be>

Promoteurs

Shaun Carl & Jozef Peeters

Katholieke Universiteit Leuven

Division of Quantum Chemistry and Physical
Chemistry, Department of Chemistry

Celestijnenlaan 200F

B-3001 Heverlee

Tél.: +32(0)16 32.73.82

Fax: +32(0)16 32.79.92

Email: Jozef.Peeters@chem.kuleuven.ac.be,

Shaun.Carl.chem.kuleuven.ac.be

<http://arrhenius.chem.kuleuven.ac.be/labpeeters>

Magda Claeys & Willy Maenhaut

Universiteit Antwerpen (UA)

Campus Drie Eiken

Department of Pharmaceutical Sciences

Universiteitplein 1

B-2610 Antwerpen

Tel.: 03 265 2707

Fax: 03 265 2734

Email: Magda.Claeys@ua.ac.be

Partenaire international

Yoshiteru Iinuma & Hartmut Herrmann

Leibniz Institute for Tropospheric Research (IFT)

Permoserstrasse 15

04318 Leipzig, Germany

Tel: 49 341 2352535

Fax: 49 341 2352325

Email: yoshi@tropos.de

Website du projet

<http://tropo.aeronomie.be/>

Comité de suivi

Pour la composition complète et la plus à jour du Comité de suivi, veuillez consulter notre banque de données d'actions de recherche

fédérales (FEDRA) à l'adresse :

<http://www.belspo.be/fedra>

