

IBOOT

Impact des émissions biogéniques sur les aérosols organiques et les oxydants dans la troposphère

DURÉE DU PROJET

Phase 1: 15/12/2005 – 14/12/2007
Phase 2: 15/12/2007 – 31/01/2010

BUDGET

685.568 €

MOTS CLÉS

Emissions biogéniques, aérosols organiques secondaires, COV (composés organiques volatiles), mécanismes d'oxydation, ozone troposphérique, capacité d'oxydation de l'atmosphère

CONTEXTE

Ce projet vise à mieux comprendre et quantifier l'impact des Composés Organiques Biogéniques (COB) sur la qualité de l'air et le système climatique (les aérosols et les gaz à effet de serre méthane et ozone). Il supportera donc la prise de décision au niveau international (par ex. via le GIEC) ainsi qu'un niveau fédéral Belge. Des mécanismes détaillés de dégradation de COV importants (des mono- et sesquiterpènes) seront développés sur la base de méthodes théoriques avancées, et introduites dans un modèle à grande échelle de façon à déterminer leur impact dans l'atmosphère. Les mécanismes et le modèle seront validés à l'aide d'observations de laboratoire et sur le terrain, dont les mesures effectuées dans le projet BIOSOL.

DESCRIPTION DU PROJET

Objectifs

Nos objectifs généraux sont

- 1) Estimer l'impact des composés organiques biogéniques dans l'atmosphère
- 2) Etablir le mécanisme de dégradation photochimique et le potentiel de formation d'aérosols de plusieurs mono- et sesquiterpènes

Plus précisément, nous voulons

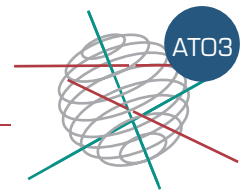
- 1) Fournir des contraintes expérimentales sur le mécanisme d'ozonolyse et le potentiel de formation d'aérosols de deux sesquiterpènes
- 2) Développer un modèle détaillé de l'oxydation en phase gazeuse de terpènes importants, ainsi que de la formation d'aérosols résultant de cette dégradation
- 3) Déterminer l'impact de ces terpènes sur l'ozone et les aérosols organiques à l'échelle globale
- 4) Déterminer l'impact des réactions de composés organiques oxygénés dans la troposphère supérieure

Méthodologie

Pour atteindre ces buts, nous nous proposons de

- 1) Réaliser des expériences d'oxydation de deux sesquiterpènes, β -caryophyllène et α -humulène par l'ozone, dans un grand réacteur (Partenaire International MPI-Mainz), où les produits gazeux et particulaires seront analysés, et les rendements, tailles et activités CCN (Cloud Condensation Nuclei) seront déterminés. L'influence des conditions de réaction (par exemple, la température) sera étudiée.
- 2) Employer les méthodes théoriques les plus avancées pour développer les outils prédictifs (Relations de Structure-Activité ou RSAs) nécessaires au développement de mécanismes complets de dégradation de terpènes et d'autres espèces chimiques (KULeuven). Développer de tels mécanismes pour plusieurs monoterpènes et sesquiterpènes particuliers. Les chemins chimiques menant à la formation d'espèces clés à faible volatilité seront élucidés. Ces mécanismes pourront servir de bases pour le développement de mécanismes d'oxydation d'autres terpènes.
- 3) Développer un modèle de partitionnement entre phases gazeuse et particulaire des produits d'oxydation des mono- et sesquiterpènes, sur la base de méthodes avancées de prédiction de leurs propriétés thermodynamiques. Coupler ce modèle à un modèle « de boîte » pour la dégradation en phase gazeuse de plusieurs mono- et sesquiterpènes (IASB). Valider ce modèle couplé par la confrontation avec des mesures de laboratoire en conditions variées. Déterminer dans quelle mesure la formation observée d'aérosols peut être reproduite avec ou sans paramétrisation des réactions hétérogènes.
- 4) Introduire une version simplifiée de ce modèle dans un modèle de chimie-transport de l'atmosphère globale, et déterminer l'impact des émissions de terpènes sur le bilan et la distribution d'oxydants et d'aérosols organiques (IASB).
- 5) Déterminer les vitesses et produits des réactions de nombreux composés organiques oxygénés avec les radicaux OH et/ou HO₂, en fonction de la température et de la pression, sur la base de méthodes théoriques avancées, et déterminer l'impact de ces composés dans l'atmosphère (KULeuven).





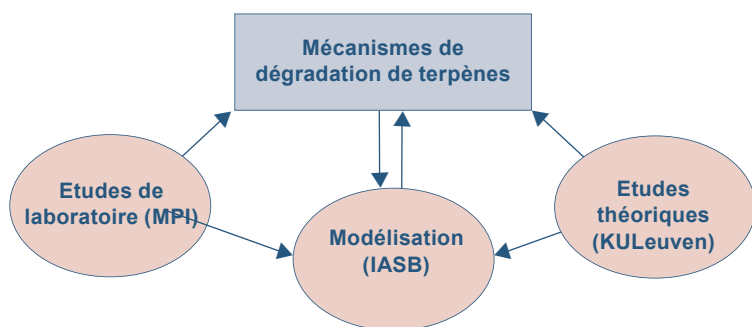
IBOOT

Impact des émissions biogéniques sur les aérosols organiques et les oxydants dans la troposphère

INTERACTION ENTRE LES DIFFÉRENTES PARTENAIRES

Les résultats de recherche de KU-Leuven et du partenaire international MPI seront nécessaires au développement des mécanismes de dégradation de terpènes. Ces mécanismes

seront introduits dans le modèle réalisé à IASB, qui sera validé à l'aide de données de laboratoire obtenues dans ce projet (par MPI) ainsi que d'études antérieures.



RÉSULTATS ET/OU PRODUITS ATTENDUS

Nos résultats de recherche seront mis en valeur par des publications dans des revues internationales, des communications lors de conférences, et par notre site web. En outre, les activités de mise en valeur incluront

- 1) Le développement d'un site web pour les Relations de Structure-Activité (RSAs) qui comportera des outils pédagogiques, une discussion des méthodes, les bases de données chimiques ainsi que

leur analyse statistique. Un programme sera développé pour l'application automatique des RSAs.

- 2) Un workshop/école sur le développement de mécanismes, en collaboration avec le projet BIOSOL, sous les auspices du programme INTROP de la NSF.
- 3) La soumission de nos résultats à des bases de données internationales (par exemple le FP6 European Network of excellence ACCENT).

PARTENAIRES - ACTIVITÉS

L'une des tâches principales de IASB est la recherche atmosphérique. Une grande part des travaux scientifiques effectués concerne la stratosphère et la troposphère, et comprend des activités de laboratoire, de modélisation et d'observations atmosphériques.

Les laboratoires de KULeuven impliqués dans le projet contribuent à la cinétique chimique de réactions élémentaires en phase gazeuse, ainsi qu'à l'application de méthodes de chimie quantique avancées à la ré-

solution de problèmes chimiques, dont les mécanismes réactionnels et la cinétique chimique.

La recherche au MPI se concentre sur l'ozone et sur le rôle des radicaux dans les mécanismes de photo-oxydation qui jouent un rôle central pour la capacité oxydante de l'atmosphère. MPI développe des instruments extrêmement sensibles de mesure de gaz en trace pour l'élucidation de chaînes de réactions photochimiques.

COORDONNÉES

Site web du projet :

www.oma.be/TROPO/IBOOT/Home.html

Coordinateur

Jean-François Müller

Institut d'Aéronomie Spatiale de Belgique (IASB)
Avenue Circulaire 3
B-1180 Bruxelles
Tel: +32 (0)2 373.03.66
Fax: +32 (0)2 374.84.23
Jean-Francois.Muller@aeronomie.be
www.oma.be/TROPO

Promoteurs

Jozef Peeters & Luc Vereecken

Katholieke Universiteit Leuven (KULeuven)
Afdeling Kwantumchemie en Fysicochemie, Department Chemie
Celestijnenlaan 200F
B-3001 Heverlee
Tel: +32 (0)16 32.73.82
Fax: +32 (0)16 32.79.92
Jozef.Peeters@chem.kuleuven.ac.be
arrhenius.chem.kuleuven.ac.be/labpeeters/

Geert Moortgat & Richard Winterhalter

Max-Planck Institute for Chemistry
Division of Atmospheric Chemistry
J.J.-Becherweg 27
D-55020 Mainz
Tel: +49 (0)6131 305.476
Fax: +49 (0)6131 305.436
moo@mpch-mainz.mpg.de

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> ou <http://www.belspo.be/ssd>.

