

Ecole doctorale : SMRE

Laboratoire : SAGE

Discipline : OLPCA

NOM/PRENOM DU CANDIDAT : Bouzidi Hichem

N° d'ordre : 41635

JURY :

Directeur de Thèse : Alexandre Tomas/Christa Fittschen

Rapporteurs : Estelle Roth/Véronique Daële

Membres : Patrice Coddeville/Aline Gratien

TITRE DE LA THESE :

**Réactivité de composés organiques volatils oxygénés multifonctionnels :
Evaluation de l'importance de la voie de photolyse**

RESUME :

Ce travail s'inscrit dans une meilleure compréhension du devenir atmosphérique des Composés Organiques Volatils Oxygénés (COVO) et multifonctionnels en phase gazeuse, composés attendus lors de l'oxydation des COV dans l'atmosphère. Les investigations sur la photolyse de deux α -dicétones (2,3-pentanedione (PTD) et 2,3-hexanedione (HEX)) et deux hydroxycétones (3-hydroxy-3-méthyl-2-butanone (3H3M2B) et 4-hydroxy-2-butanone (4H2B)) ont été réalisées dans deux chambres de simulation atmosphérique complémentaires, dont l'une équipée d'un spectromètre cw-CRDS permettant l'étude des effets de pression et la quantification des concentrations photostationnaires du radical HO_2^\bullet . Un temps de vie par photolyse dans l'atmosphère très court d'environ 2,5h est obtenu pour les α -dicétones avec des rendements quantiques globaux (Φ) significatifs d'environ 20%, confirmant la prédominance de la photolyse dans le devenir des α -dicarbonylés devant l'oxydation par OH^\bullet et Cl^\bullet . L'analyse des produits de photolyse (dont le radical HO_2^\bullet à basse pression) a permis de construire les mécanismes réactionnels de photolyse de ces composés. La 3H3M2B présente une photoactivité relativement importante avec un Φ dans l'atmosphère de l'ordre de 10% et une durée de vie de quelques jours. A l'inverse, pour la 4H2B, c'est principalement la réaction avec le radical OH^\bullet qui va contrôler son devenir atmosphérique. Enfin, les données cinétiques et mécanistiques obtenues ont permis de discuter l'impact atmosphérique de ces composés. L'ensemble des données obtenues montrent que la réactivité des COVO est fortement dépendante de leur structure chimique.

**Soutenance le 16 décembre 2014 à 13H30
Lieu Département SAGE (Mines de Douai)**