

**DOSSIER DE CANDIDATURE
A UNE ALLOCATION DE RECHERCHE
(Contrat doctoral)
POUR LA RENTREE 2022**

Dossier complété et revêtu des signatures à transmettre impérativement pour le :
14 décembre 2021 12h00 au plus tard,
A la Direction de la Recherche et Valorisation
secretariat.recherche@univ-littoral.fr

Titre de la thèse en français *

« Les aérosols organiques secondaires: micro-solvatation, hygroscopicité et réactivité atmosphérique des précurseurs.»

Titre de la thèse en anglais *

« The secondary organic aerosols: Micro-solvation, hygroscopicity and reactivity of the precursors»

Mots clés en français *: AOS, précurseurs, micro-solvatation, hygroscopicité, spectroscopie rovibrationnelle, chambre de simulation atmosphérique

Mots clés en anglais *: SOAs, gas phase precursors, micro-solvation, hygroscopicity, rovibrational spectroscopy, atmospheric simulation chamber

Laboratoire d'accueil ULCO *: LPCA

Equipe : PCMI

Spécialité * : Milieux dilués et optique fondamentale

Priorité du laboratoire:

Directeur de thèse ULCO : Arnaud Cuisset

Date d'obtention de l'HDR : 19/11/2014

Nombre de doctorats en préparation
sous la direction du directeur de thèse : 2 dont 1 à 50%

N° de téléphone ULCO : 0328237613

Adresse mail ULCO: arnaud.cuisset@univ-littoral.fr

Y-a-t'il un co-encadrant : Oui Non

Si oui, précisez : Manuel Goubet, MCF HDR, Laboratoire PhLAM, Université de Lille

- *Champ obligatoire sur ADUM
- *Champ obligatoire en Français et Anglais sur ADUM

Le sujet est-il en cotutelle : Oui Non

Si oui, précisez :

Financement* :

Merci de renseigner l'ensemble des demandes de financements envisagées pour ce sujet (NB : Les demandes peuvent porter sur plus de deux cofinanceurs envisagés):

Région 50 % (Dans ce cas, ne pas oublier de remplir également le dossier « Région »)

PMCO 50 %

ULCO 50 %

ULCO 100 %

ADEME 50 %

ADEME 100 %

Merci de nous indiquer si d'autres financements ont été demandés pour ce sujet :

Autre Financier 50 %, préciser le financier : Labex Cappa

Autre Financier 100 %, préciser le financier :

Catégories de partenaires financiers sollicités

Entreprise (SA, SAS...)

Université étrangère

Etat et Etablissement publique national (EPIC, agence, organisme national de recherche...)

Collectivités (Commune, EPCI, Syndicat Mixte...)

Association, Fondation, Centres hospitaliers

Autres

LABORATOIRE D'ACCUEIL

Nombre de HDR dans le laboratoire : 12

Nombre de thèses encadrées dans le laboratoire (rentrée 2021) : 15

Avis détaillé du directeur de thèse :

- *Champ obligatoire sur ADUM
- *Champ obligatoire en Français et Anglais sur ADUM

Ce projet de thèse est de la plus haute importance car il constitue un aboutissement au travail mené dans le cadre du 1^{er} groupe de travail du Labex CaPPA (ANR-11-LABX-0005-01) qui se conclura en 2024. Nous proposons de fédérer les compétences en spectroscopie en phase gazeuse du PhLAM et du LPCA avec les compétences en réactivité des composés organiques volatils (COVs) du LPCA développées autour de la chambre de simulation CHARME (CHamber for Atmospheric Reactivity and Metrology of the Environment), équipement phare la plateforme IRENÉ. Il s'agit d'un projet original qui a l'ambition de faire le lien entre une approche phase gazeuse consistant à étudier la micro-solvatation des composants clés des aérosols organiques secondaires (AOS) par spectroscopie rotationnelle en jet supersonique et une approche particulière où l'hygroscopicité de ces même AOS pourra être étudiée par différentes techniques expérimentales. Ce projet servira de rampe de lancement aux activités menées par les deux équipes dans le cadre du CPER ECRIN. Le doctorant choisi pour mener à bien ce projet aura la chance d'utiliser une large variété d'équipements et de techniques uniques en région à la pointe de la physico-chimie atmosphérique.

Signature du directeur de thèse



Avis détaillé du directeur de laboratoire :

Signature du directeur de laboratoire

- *Champ obligatoire sur ADUM
- *Champ obligatoire en Français et Anglais sur ADUM

PROJET DE THESE

Intitulé du projet de thèse :

« Les aérosols organiques secondaires: micro-solvatation, hygroscopicité et réactivité atmosphérique des précurseurs.»

Domaine scientifique : Optique et matière diluée

Résumé en français *:

Les Aérosols Organiques Secondaires (AOS) ont un impact certain et mal connu sur le bilan climatique et sur la qualité de l'air. Ils sont produits dans l'atmosphère par oxydation des composés organiques volatils (COV) et semi-volatils (COSV) émis dont 90% sont de nature biogénique. Au sein du WP1 du Labex CaPPA, les laboratoires PhLAM et LPCA ont travaillé indépendamment à caractériser les propriétés physico-chimiques des précurseurs d'AOS et de leurs complexes hydratés d'une part par spectroscopie rotationnelle dans le cadre d'études de micro-solvatation et d'autre part à étudier leur réactivité et leur capacité à former des AOS en chambre de simulation. Les propriétés d'hygroscopicité de ces AOS ont aussi été l'objet d'investigation par le LPCA. Dans le cadre de ce projet de thèse, nous ambitionnons pour la première fois de fédérer ces différentes approches afin de faire le lien entre les propriétés physico-chimiques à l'échelle moléculaire de composés hydratés (composés identifiés dans les AOS) et l'hygroscopicité des AOS formés en chambre de simulation atmosphérique par différents processus d'oxydation. Ce projet de thèse original, ambitieux et fédérateur se déclinera en trois études complémentaires : (i) la réactivité des précurseurs et la capacité à former des AOS dans la chambre de simulation atmosphérique CHARME; (ii) la micro-solvatation de COVs ou COSVs identifiés dans les AOS, étudiée par spectroscopie centimétrique à dérive de fréquences en jet supersonique; (iii) les propriétés d'hygroscopicité des AOS formés étudiées par des approches complémentaires (mesures de noyaux de condensation, spectroscopie IR en cellule d'hydratation).

Résumé en anglais *:

Secondary Organic Aerosols (SOA) have an obvious but misunderstood impact on the climate balance and on air quality. They are produced in the atmosphere by oxidation of volatile organic compounds (VOCs) and semi-volatile organic compounds (SVOCs) emitted of which 90% are biogenic. Within the WP1 of Labex CaPPA, the PhLAM and LPCA laboratories worked independently to characterize the physicochemical properties of these precursors and their hydrated complexes on the one hand by rotational spectroscopy as part of micro-solvation studies and on the other hand by studies of their reactivity and their ability to produce SOAs in the simulation chamber CHARME including the study of their hygroscopic properties. This PhD thesis project aims for the first time to combine these different approaches in order to make the link between the physicochemical properties at the molecular scale of hydrated complexes (with the compounds identified in the SOAs) and the hygroscopicity properties of the SOAs at the particle scale. This original, ambitious and unifying project proposes three complementary studies: (i) the reactivity of precursors and the ability to form SOA in CHARME; (ii) the micro-solvation of VOCs and SVOCs identified in AOS, studied by chirped-pulse spectroscopy in jet-cooled conditions; (iii) the hygroscopic properties of the AOS studied by complementary approaches (measurements of condensation cloud nuclei, IR spectroscopy in hydration cells).

- *Champ obligatoire sur ADUM
- *Champ obligatoire en Français et Anglais sur ADUM

1. Le sujet de recherche choisi :

a. Contexte et état de l'art :

Au sein du laboratoire d'excellence CaPPA (Chemical and Physical Properties of the Atmosphere), nous nous intéressons à la fois au système « aérosol » et à ses précurseurs pour mieux appréhender leur rôle sur le forçage climatique et le cycle hydrologique ainsi qu'à l'évolution de la qualité de l'air à différentes échelles. La thématique Physico-Chimie Moléculaire & Instrumentation du laboratoire de Physico-Chimie de l'Atmosphère (LPCA) de Dunkerque et l'équipe physique moléculaire aux interfaces (PMI) du laboratoire Physique des Lasers, Atomes et Molécules (PhLAM) de Lille se sont investis conjointement dans le premier groupe de travail du Labex CaPPA dédié à l'étude des composés organiques volatils (COVs) précurseurs d'aérosols atmosphériques. L'ambition de ce groupe de travail est de faire le lien entre les propriétés moléculaires des précurseurs en phase gazeuse et les aérosols formés dans l'atmosphère à partir de divers processus d'oxydation.

Disposant d'outils d'analyses complémentaires, notamment au niveau spectroscopique, les deux équipes dunkerquoise et lilloise, qui collaborent régulièrement depuis plus de 15 ans, se sont intéressées en particulier aux COVs d'origine biogénique (90% des COVs émis) précurseurs d'aérosols organiques secondaires (AOS) dans l'atmosphère. Au-delà du labex CaPPA, on peut considérer que ces études ont contribué à faire avancer le projet CPER CLIMIBIO dans le cadre de son premier groupe de travail puisque nous avons caractérisé des espèces clés de la dynamique atmosphérique et du changement climatique en utilisant en particulier des technologies uniques en région Hauts de France (Spectroscopie à impulsions micro-ondes, spectroscopie THz, métrologie optique en chambre de simulation atmosphérique ...).

Dans ce contexte, l'équipe du PhLAM s'est concentrée sur l'étude des monoterpènes (α -pinène, limonène oxyde,...) et de leurs principaux produits d'oxydation troposphérique (métacroléine, méthylvinylcétone, méthylglyoxal^[1]...). Leurs études associent des calculs de chimie quantique à haut niveau de théorie et des mesures par spectroscopie rotationnelle refroidie en jet supersonique dans le but de comprendre certaines propriétés physico-chimiques des précurseurs d'AOS. Par exemple, cette approche permet d'identifier les structures moléculaires les plus stables en énergie et de déterminer un jeu de paramètres spectroscopiques initial, étape nécessaire aux mesures spectroscopiques haute-résolution réalisées à température ambiante notamment par le LPCA dans le domaine millimétrique. Par ailleurs, les conditions de jet supersonique permettent de stabiliser des complexes moléculaires hydratés avec une ou plusieurs molécules d'eau afin de réaliser des études de micro-solvatation. De nombreux COVs biogéniques hydratés ont été étudiés par les spectroscopistes du PhLAM (fenchone, fenhol, myrtenal, nopinone, verbenone, perillaldéhyde^[2], naphaldéhyde...). Ces études ont permis de démontrer qu'il était possible d'identifier la position des sites de micro-solvatation, d'anticiper les modifications structurelles de la molécule en présence de solvant et de déterminer des données théoriques fiables concernant l'énergie d'hydratation jugeant du caractère hydrophile ou hydrophobe de la molécule.

Le LPCA s'est quant à lui intéressé aux COV aromatiques oxygénés issus de la combustion de la biomasse, une source prédominante de particules atmosphériques surveillées de près pour leurs impacts sur la santé et le climat. Les physiciens et chimistes du LPCA, respectivement spécialisés en spectroscopie TéraHertz (THz) et dans les études de réactivité

- *Champ obligatoire sur ADUM
- *Champ obligatoire en Français et Anglais sur ADUM

des COVs en chambre de simulation atmosphérique, ont rassemblé leurs compétences pour étudier les composés de la famille des méthoxyphénols et les dérivés furaniques issus respectivement de la pyrolyse de la lignine et de la cellulose du bois. Du point de vue de la spectroscopie THz, il s'agissait d'apporter des données spectroscopiques permettant d'envisager à terme un suivi quantitatif par spectroscopie rovibrationnelle de ces COVs à température ambiante présents à l'état de traces dans l'atmosphère. Pour la première fois les spectres rotationnels des isomères du méthoxyphénol^[3], du catéchol^[4] ou des méthyl furanes ont été enregistrés, résolus et attribués à température ambiante dans la gamme millimétrique. Par ailleurs, des expériences ont été menées sur la ligne infrarouge lointain AILES du synchrotron SOLEIL fournissant des sections efficaces ro-vibrationnelles permettant de fiabiliser la quantification de ces espèces dans la colonne atmosphérique.^[5] La réactivité de ces espèces a été étudiée en parallèle dans la chambre de simulation atmosphérique CHARME (CHamber for Atmospheric Reactivity and Metrology of the Environment) en présence des principaux oxydants atmosphériques (OH, O₃, NO₃...) et la capacité de ces espèces à former des AOS a été mesurée dans cet environnement contrôlé.^[6] Les intermédiaires réactionnels impliqués dans leurs formation ont été identifiés et les propriétés hygroscopiques des AOS formés ont été étudiés par spectroscopie IR (dispositif ATR-FTIR de la ligne AILES) révélant des caractères hydrophiles ou hydrophobes selon le précurseur ou l'intermédiaire ciblé.^[7]

b. Objectifs :

Lors de leur transport dans l'atmosphère, les AOS se transforment (vieillessement) via des mécanismes encore mal connus, ce qui implique une modification de leurs propriétés physico-chimiques. En particulier en milieu humide, les AOS se chargent plus ou moins en molécules d'eau selon leur composition chimique. Dans ce contexte, la caractérisation des propriétés moléculaires des COVs ou semi-volatils (COSVs) ainsi que de leurs processus de nucléation/dégradation est capitale en physico-chimie de l'atmosphère. Les équipes PMI du PhLAM et PCMI du LPCA ont, indépendamment l'une de l'autre, avec des méthodes d'analyse différentes, abordé l'étude de l'influence de l'humidité sur les propriétés physico-chimiques des AOS et de leurs précurseurs. Les spectroscopistes du PhLAM ont démontré que la spectroscopie micro-onde en jet supersonique associée aux calculs de chimie quantique permettait de comprendre à l'échelle moléculaire le processus d'hydratation sur un précurseur ou un intermédiaire réactionnel donné. Néanmoins, ils ignorent si le caractère hydrophile estimé pour un composé moléculaire hydraté donné se retrouve à l'échelle de l'AOS qui sera formé dans l'atmosphère. Le LPCA quant à lui est en mesure de produire les AOS en chambre de simulation atmosphérique par oxydation de précurseurs gazeux et de caractériser leurs nombres, tailles et propriétés physico-chimiques. Néanmoins les mécanismes moléculaires menant aux propriétés d'hygroscopicité de l'AOS sont difficiles à appréhender. Le sujet de thèse que nous proposons ici vise à mener à terme les ambitions du WP1 CaPPA, à savoir faire le lien entre les précurseurs gazeux et la particule (AOS) dans des études du processus d'hydratation des particules selon trois études complémentaires : (i) la réactivité des précurseurs et la capacité à former des AOS dans la chambre de simulation atmosphérique CHARME (CHamber for Atmospheric Reactivity and Metrology of the Environment); (ii) la micro-solvatation des COVs et COSVs identifiés dans les AOS, étudiée par spectroscopie centimétrique à dérive de fréquences en jet supersonique; (iii) les propriétés hygroscopiques des AOS formés étudiées par des approches complémentaires (mesures de noyaux de condensation, spectroscopie IR en cellule d'hydratation).

- *Champ obligatoire sur ADUM
- *Champ obligatoire en Français et Anglais sur ADUM

c. Méthodologie & Résultats attendus :

i. Réactivité des précurseurs et formation des AOS dans CHARME :

Cette partie du travail de thèse sera effectuée au LPCA dans la chambre de simulation atmosphérique CHARME, équipement phare de la plateforme IReNE (Innovation Recherche en Environnement). Les AOS seront formés directement dans CHARME par oxydation des précurseurs gazeux. Les concentrations de ces derniers seront déterminées en fonction du temps avec un PTR-ToF-MS (*Proton Transfer – Time of Flight - Reaction Mass Spectroscopy*). La même technique permettra d'identifier des COVs et COSVs intervenant dans la composition des AOS. Ceux-ci feront l'objet des études de micro-solvatation (cf (ii)). Le nombre et la taille des AOS formés seront contrôlés par un SMPS (*Scanning Mobility Particle Sizer spectrometer*). Pour chaque précurseur ciblé, le doctorant aura la charge de déterminer les constantes cinétiques des réactions d'oxydation et de caractériser et quantifier les produits d'oxydation gazeux et les particules formées (AOS). Nous ciblerons en premier lieu les terpénoïdes (*e.g* : périllaldéhyde) et leurs produits d'oxydation (*e.g* : méthyleglyoxal) ayant fait l'objet d'études de micro-solvatation par spectroscopie rotationnelle au laboratoire PhLAM. Nous choisirons des molécules présentant des degrés d'hydrophilie différents selon les études des complexes hydratés par spectroscopie rotationnelle afin de voir si oui ou non cela se retranscrit sur la caractéristique hydrophile et/ou hydrophobe des AOS formés (cf (iii)).

ii. Micro-solvatation des COVs biogéniques : spectroscopie rotationnelle de complexes hydratés

Pour cette partie de la thèse, le doctorant travaillera sur la spectroscopie rotationnelle de complexes hydratés produits en jet supersonique. Le doctorant devra prendre en main les spectromètres à dérives de fréquence du PhLAM et du LPCA pour mesurer les spectres rotationnels refroidis en jet supersonique des COVs et de leurs hydrates. Côté PhLAM, il s'agit d'un instrument récemment développé avec le soutien du CPER CLIMIBIO opérant dans la gamme 8 – 18 GHz. Côté LPCA, l'instrument travaillant dans la gamme 18 – 26 GHz fait partie des équipements prioritaires qui seront acquis au début du CPER ECRIN. En plus des mesures expérimentales, le doctorant devra s'appuyer sur des calculs de chimie quantique réalisés grâce au cluster informatique haute performance du PhLAM. L'enregistrement et la modélisation du spectre de la molécule isolée conduit entre autres à l'identification expérimentale des structures les plus stables en énergie sur la base des calculs quantiques. En retour, les données expérimentales permettent de calibrer les calculs par le choix de la méthode reproduisant au mieux les paramètres issus de l'analyse des spectres. Les études théoriques et expérimentales sur les complexes hydratés donneront accès à la position des sites de micro-solvatation et aux modifications structurales liées à l'hydratation. Par la même méthode, il s'agira d'accéder à des données théoriques fiables telles que l'énergie d'hydratation (hydrophilie). Nous ciblerons dans un premier temps des COSVs aromatiques oxygénés déjà identifiés dans des AOS produits par le LPCA dans CHARME à partir de l'oxydation de métoxyphénols ou des dérivés furaniques produits par la combustion de biomasse.

iii. Hygroscopicité des AOS formés dans CHARME :

Dans le but de faire le lien avec les conclusions déduites des expériences de micro-solvatation sur les précurseurs gazeux (cf (ii)), il est nécessaire d'étudier les propriétés hygroscopiques des AOS formés dans CHARME (cf (i)). Dans ce projet de thèse, le LPCA propose deux approches :

- La première consiste à reproduire des expériences menées en 2017 sur les AOS formés par l'oxydation du guaiacol et du syringol avec le radical OH.^[7] Les AOS produits dans CHARME

- *Champ obligatoire sur ADUM
- *Champ obligatoire en Français et Anglais sur ADUM

avaient été prélevés sur des filtres en fibre de quartz transparents dans l’IR lointain et nous avons mesurés par ATR-FTIR (*Attenuated Total Reflection – Fourier Transform InfraRed spectroscopy*) les spectres IR lointain et moyen de ces AOS. Ces expériences avaient été réalisées avec la ligne AILES du synchrotron SOLEIL (partenaire privilégié du PhLAM et du LPCA depuis près de 15 ans) où une cellule d’hydratation avait été mise à disposition pour étudier l’influence du niveau d’humidité relative sur les bandes vibrationnelles des COSVs présents dans les AOS formés à partir du guaiacol et du syringol. Les expériences avaient révélé des caractères hygroscopiques différents, respectivement hydrophobe et hydrophile pour les AOS issus du guaiacol et du syringol, non expliqués à ce jour. Des demandes de temps de faisceau seront réalisées afin d’obtenir au cours de la thèse une ou plusieurs campagnes de mesures sur la ligne AILES du synchrotron SOLEIL pour réaliser ce type d’expériences avec les AOS produits dans CHARME au cours de la phase (i) du projet. Ce sera l’occasion pour le doctorant de réaliser des expériences sur un grand instrument.

- Enfin nous proposons au sein de cette thèse d’étudier les propriétés hygroscopiques des AOS en mesurant directement dans CHARME le paramètre d’hygroscopicité κ permettant de décrire la relation entre le diamètre d’une particule « sèche » et sa capacité d’agir comme un noyau de condensation avec la vapeur d’eau ambiante.^[8] Il s’agit là de reproduire des expériences récemment menés par le LPCA dans le cadre d’une collaboration avec les laboratoires PC2A à Lille et SAGE de l’IMT Nord Europe.^[9] Le doctorant pourra s’appuyer sur deux approches : (i) des mesures par HTDMA (*Hygroscopic Tandem Differential Mobility Analyzer*) où κ est déduit en mesurant le facteur de croissance hygroscopique de l’AOS en condition de sous-saturation ; (ii) des mesures avec un CCNc (*Cloud Condensation Nuclei Counter*) où κ est déduit du rapport entre le nombre de gouttelettes formées et le nombre de particules sèches déterminé dans des conditions de super-saturation. Le doctorant pourra réaliser en parallèle ces deux approches pour définir au mieux le paramètre d’hygroscopicité κ des AOS formés.

2. Le programme et l’échéancier de travail

		S1	S2	S3	S4	S5	S6
Tâche 1	Etat de l’art : spectroscopie des COV & COSVs identifiés dans les AOS et de leurs hydrates + Calculs de chimie quantique nécessaires à la prédiction des structures stable en énergie et des spectres rotationnels	Jaune	Jaune				
Tâche 2	Étude de la réactivité des précurseurs et formation des AOS dans CHARME			Rouge	Rouge		
Tâche 3	Mesures des spectres centimétriques des COV & COSVs identifiés dans les AOS et de leur complexes hydratés avec les spectromètres à dérive de fréquence		Jaune	Jaune	Jaune	Rouge	Rouge
Tâche 4	Mesure des propriétés hygroscopiques des AOS formés dans CHARME et sur la ligne AILES du synchrotron SOLEIL					Rouge	Rouge
Tâche 5	Établissement du lien entre la micro-solvation des précurseurs et les propriétés hygroscopiques des AOS Rédaction d’articles et du manuscrit de thèse + communications orales				Jaune	Jaune	Rouge

En jaune, l’activité du doctorant qui sera réalisée au laboratoire PhLAM de Lille ; En rouge, celle qui sera réalisée au laboratoire LPCA de Dunkerque. La thèse sera inscrite à l’Ecole Doctorale Sciences Technologie Santé de l’alliance Artois-ULCO-UPJV (ED585), la soutenance aura lieu à la Maison de la Recherche en Environnement Industriel de Dunkerque.

3. Les retombées scientifiques et économiques attendues

Durant toute la durée du Labex CaPPA, au sein du WP1, les études spectroscopiques des COV biogéniques précurseurs d’AOS et de leurs hydrates se sont faites indépendamment des mesures de réactivité en chambre de simulation atmosphérique et de l’étude des propriétés

- *Champ obligatoire sur ADUM
- *Champ obligatoire en Français et Anglais sur ADUM

d'hygroscopicité des AOS. Ce projet de thèse qui arrive en fin de contrat pour le Labex CaPPA constitue un véritable aboutissement scientifique puisqu'il s'agit de faire le lien entre l'approche moléculaire / phase gazeuse de composés identifiés dans les AOS et l'approche particulaire / phase condensée des AOS. La compréhension de ce lien apportera par ailleurs une réelle plus-value pour le projet CPER ECRIN dont l'un des objectifs est de mieux caractériser la physico-chimie des environnements péri-urbains et ruraux où les émissions biogéniques sont importantes et où, par voie de conséquence, l'impact des AOS sur le climat et la qualité de l'air est source de préoccupations majeures.

4. Les objectifs de valorisation des travaux de recherche du doctorant* : diffusion, publication et confidentialité, droit à la PI...

Les résultats de la thèse feront l'objet de publications dans des revues de rang A et le doctorant présentera son travail par le biais de communications orales lors de conférences internationales. Dans le but d'œuvrer pour une science ouverte, chaque publication sera déposée dans le portail HAL conformément aux recommandations du CNRS. Par ailleurs, nous privilégierons des publications open-access dont les frais de publication seront partiellement financés par l'ULCO. Par ailleurs, les nouvelles données acquises en tâche 3 seront mises à disposition des bases de données spectroscopiques internationales, celles obtenues en tâches 2 et 4 pourront alimenter les modèles de chimie atmosphérique.

5. Les collaborations prévues et une liste de 10 publications* maximum portant directement sur le sujet

Le projet est par essence collaboratif puisqu'il s'agit d'une co-direction de thèse entre le laboratoire LPCA/ULCO et le laboratoire PhLAM/ULille qui ont renforcé leur partenariat ces dernières années à travers des études spectroscopiques communes en lien avec les thématiques du Labex CaPPA et du CPER CLIMIBIO (5 publications communes ces 5 dernières années). Mais l'aspect collaboratif de la thèse s'étend à d'autres laboratoires impliqués directement ou indirectement. Notamment les mesures des propriétés hygroscopiques des AOS formés nécessiteront l'implication de la ligne AILES du synchrotron SOLEIL, des équipes du Pr. D. Petitprez au laboratoire PC2A à Lille et du Pr A. Tomas au laboratoire SAGE à l'IMT Lille Nord Europe.

Publications portant directement sur le sujet :

- [1]. S. Bteich et al. "Vibrational dynamic and spectroscopic molecular parameters of trans-Methylglyoxal, a gaseous precursor of secondary organic aerosols", *J. Mol. Spectrosc.*, **348**, pp. 124-129, (2018).
- [2]. M. Chrayteh et al. « Gas-Phase Hydration of Perillaldehyde Investigated by Microwave Spectroscopy Assisted by Computational Chemistry », *J. Phys. Chem. A*, **124 (32)**, pp 6511-6520, (2020).
- [3]. A. Jabri et al. "Conformational landscape and inertial defect of methoxyphenol isomers studied by mm-wave spectroscopy and quantum chemistry calculations", *J. Chem. Phys.*, **104303**, (2019).
- [4]. J. Bruckhuisen et al. "Intramolecular H-Bond Dynamics of Catechol Investigated by THz High-Resolution Spectroscopy of Its Low-Frequency Modes", *MOLECULES*, **26(12)**, 3645, (2021).
- [5]. A. Cuisset et al. "Infrared spectroscopy of methoxyphenols involved as atmospheric secondary organic aerosol precursors: Gas-phase vibrational cross-sections", *J. Quant. Spectrosc. Rad. Tansf.*, **179**, pp 51-58, (2016).
- [6]. A. Lauragais et al. "Atmospheric reactivity of hydroxyl radicals with guaiacol (2-methoxyphenol), a biomass burning emitted compound: Secondary organic aerosol formation and gas-phase oxidation products", *Atmos. Env.*, **55**, pp. 43-48, (2014).
- [7]. W. Ahmad et al. "Infrared spectroscopy of secondary organic aerosol precursors and investigation of the hygroscopicity of SOA formed from the OH reaction with guaiacol and syringol", *Appl. Opt.*, **56(11)**, pp. E116-E122, (2017).
- [8]. M. D. Petters et al. « A single parameter representation of hygroscopic growth and cloud condensation nucleus activity », *Atmos. Chem. Phys.*, **7**, pp. 1961 – 1971, (2006).
- [9]. H. Bouzidi et al. "Hygroscopicity and CCN activity of secondary organic aerosol produced from dark ozonolysis of γ -terpinene", *Sci. Tot. Envir.*; under review (November 2021).

- *Champ obligatoire sur ADUM
- *Champ obligatoire en Français et Anglais sur ADUM