

## THESE INRS-LRGP

### Étude des réactions entre des COV présents dans les atmosphères de travail et l'ozone

#### Contexte

La crise COVID a entraîné la mise sur le marché d'un grand nombre de purificateurs d'air combinant différents procédés de traitement tels que la filtration, l'adsorption, les plasmas froids...soit pour leur effet bactéricide soit pour éliminer les COV L'INRS a constaté que l'utilisation de ces purificateurs conduit parfois à la formation d'ozone ( $O_3$ ) dans des concentrations élevées, entre 100 et 1000 ppbv. La présence de composés organiques volatils (COV) dans les environnements de travail combinée à l' $O_3$  mène à une production rapide de molécules organiques et d'aérosols de taille nanométrique qui sont potentiellement nocifs pour la santé de l'être humain.

La réactivité de l'ozone ( $O_3$ ) à température ambiante avec des molécules insaturées, notamment des terpènes comme l'alpha-pinène est connue depuis des décennies comme étant l'une des sources principales d'aérosols dans l'atmosphère. La réaction de l' $O_3$  avec un COV initie un processus d'oxydation menant rapidement à la formation de molécules poly-oxygénées et de faible volatilité qui par condensation sont des précurseurs de particules.<sup>1-3</sup> Cependant, leurs structure moléculaire et concentration ne sont pas connues, même dans le cas d'une molécule caractéristique comme l' $\alpha$ -pinène.<sup>4</sup> La revue de Bianchi et al.<sup>5</sup> donne un aperçu de la littérature sur les molécules poly-oxygénées en chimie atmosphérique.

#### Objectifs de la thèse

Le but de la thèse INRS-LRGP est d'étudier la chimie spécifique de l' $O_3$  avec des COV représentatifs des environnements de travail à l'aide de réacteurs idéaux (parfaitement agité ou piston) pour identifier et quantifier les produits en phase gazeuse, notamment ceux toxiques pour la santé des travailleurs. *In fine* ces données mèneront à des recommandations sur l'amélioration de la qualité de l'air des environnements de travail.

- 1) La première partie de la thèse consistera à effectuer une étude bibliographique approfondie à partir des bases de données type Web of Sciences, sur les expériences de laboratoire et la modélisation portant sur la réactivité des principaux COV observés dans le secteur tertiaire avec l' $O_3$  et la formation d'aérosols organiques secondaires (AOS) associée. Une attention particulière sera apportée sur les COV insaturés.
- 2) Le travail de thèse comprendra ensuite une partie importante d'expériences en laboratoire à l'aide de réacteurs à écoulements de gaz. Le couplage à des outils analytiques de type spectromètre de masse à temps de vol et micro-chromatographe en phase gazeuse permettra d'identifier et quantifier le plus grand nombre de produits/polluants. La caractérisation et la spéciation des AOS potentiellement produits constituera un enjeu important de ce travail. Cet aspect de l'étude reposera sur les compétences et la métrologie dont dispose le département Ingénierie des Procédés de l'INRS.
- 3) Sur la base des données expérimentales obtenues, la troisième partie de la thèse portera sur le développement de modèles cinétiques chimiques pour une prédiction quantitative des produits stables, comme les aldéhydes et si possible les AOS pour lesquels on s'attend à une production importante. La modélisation de la formation des molécules poly-oxygénées sera également abordée via des techniques de globalisation (lumping) des espèces et réactions dans les modèles grâce à l'expérience dont bénéficie le LRGP dans la modélisation de la chimie d'oxydation des composants de carburants.

#### Profil

Nous recherchons un(e) candidat(e) titulaire d'un diplôme d'ingénieur ou d'un master en génie des procédés avec si possible des connaissances en cinétique chimique. Le candidat devra être capable d'intégrer les aspects de prévention des risques du partenaire INRS. Anglais courant, capacité à travailler en équipe sont nécessaires.

**Références :**

<sup>1</sup>Ehn+ (2014). *Nature*, 506(7489), 476-479.

<sup>2</sup>Schobesberger+ (2013). *Proceedings of the National Academy of Sciences*, 110(43), 17223-17228.

<sup>3</sup>Riccobono+ (2014). *Science*, 344(6185), 717-721.

<sup>4</sup>Iyer+ (2021). *Nature communications*, 12(1), 1-6.

<sup>5</sup>Bianchi+ (2019) *Chemical Reviews*, 119(6), 3472-3509

**Responsables scientifiques :**

Frédérique Battin-Leclerc, DR CNRS [frederique.battin-leclerc@univ-lorraine.fr](mailto:frederique.battin-leclerc@univ-lorraine.fr)

Jérémy Bourgalais CR CNRS, [jeremy.bourgalais@cnrs.fr](mailto:jeremy.bourgalais@cnrs.fr)

Olivier Herbinet, Maître de conférence UL [olivier.herbinet@univ-lorraine.fr](mailto:olivier.herbinet@univ-lorraine.fr)

**Encadrants INRS :**

Fabien Gérardin, responsable d'études [fabien.gerardin@inrs.fr](mailto:fabien.gerardin@inrs.fr)

Denis Bemer, responsable d'études

**Rémunération :** 2547 € brut mensuel

**Durée et Date de début de la thèse :** 3 années avec un démarrage en 2024 à l'issu du recrutement

**Information pratique :** la thèse se déroulera principalement au LRGP de Nancy mais comprendra des essais à grande échelle à l'INRS de Vandoeuvre-lès-Nancy.