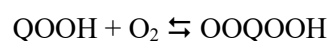
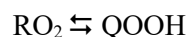
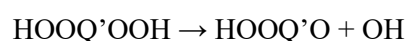


Il s'agira de développer des méthodes de chimie analytique pour identifier et quantifier des composés poly-oxygénés formés lors de l'oxydation de composés organiques (éthers, terpènes). Ces composés peuvent être formés à la fois lors de l'auto-inflammation de composés organiques et dans la troposphère. Ces travaux permettront de mieux comprendre la formation de tels polluants.

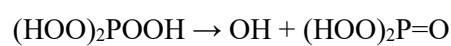
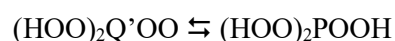
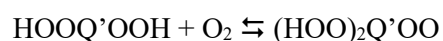
Les expériences seront effectuées dans des réacteurs. La température des réacteurs seront variable (300-900K). Les produits seront piégés pour les analyser ultérieurement. La formation de cétohydroperoxydes et de composés hautement oxygénés résultant d'une troisième addition d'O₂ sur les radicaux du réactif organique (R) sera étudiée. On admet que les réactions passent par $R + O_2 \rightleftharpoons RO_2$



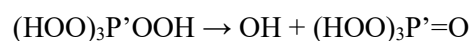
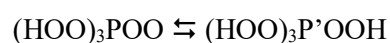
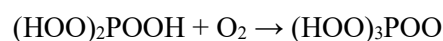
$OOQOOH \rightleftharpoons HOOQ'OOH$ suivi de la formation de radicaux hydroxyle et d'un cétohydroperoxyde :



Les di-hydroperoxydes peuvent aussi s'oxyder (3^{ème} addition d'O₂):



La réaction peut se poursuivre avec une 4^{ème} addition d'O₂:



Les produits des troisième et quatrième additions d'oxygène ont été observés dans des expériences antérieures. Ils confirment les voies d'oxydation étendues proposées précédemment dans une étude collaborative impliquant ICARE (*Proceedings of the National Academy of Sciences* 114 (50), 2017). On recherchera d'autres voies possibles et on tentera de caractériser les isomères des produits de réaction.

Les méthodes de chimie analytique utiliseront des couplages spectrométrie de masse à haute résolution - chromatographie en phase liquide et gazeuse. Ces travaux soutenus par le labex Caprysses s'inscrivent aussi dans un programme de recherche soutenu par la région Centre Val de Loire 'APROPOR-E' visant à identifier et mesurer des polluants non- réglementés.

Prérequis : master 2 en chimie analytique, pratique des couplages UHPLC-Orbitrap