

Proposition de communication pour l'EAC 2012:

## DÉVELOPPEMENT D'UN MODÈLE DE FORMATION D'AÉROSOLS ORGANIQUES SECONDAIRES EN PHASE AQUEUSE

F. Couvidat (1), K. Sartelet (1) et C. Seigneur (1)

(1) CEREAs, Laboratoire Commun École des Ponts ParisTech/EDF R&D, Université Paris-Est, 77455 Marne la Vallée, France

H<sub>2</sub>O (Hydrophilic/Hydrophobic Organics) est un modèle de formation d'Aérosols Organiques Secondaires (AOS), basé sur une représentation moléculaire des AOS et sur le partage de deux types de composés: les composés hydrophiles (qui se condensent préférentiellement sur une phase aqueuse) et les composés hydrophobes qui se condensent uniquement sur une phase organique. Ce modèle intègre l'état de l'art des connaissances et permet de prendre en compte la condensation des composés semi-volatils, la formation d'AOS à partir de différents précurseurs et divers processus. Cependant, ce modèle ne prend pas en compte la formation dans la phase aqueuse des nuages de composés peu volatils qui, après évaporation du nuage, peuvent conduire à la formation d'AOS.

Le but de cette étude est donc de prendre en compte l'influence de la chimie aqueuse des nuages et d'évaluer son influence sur la formation d'AOS. Les réactions incluses dans le modèle comprennent la formation d'AOS à partir du glyoxal et du méthylglyoxal, formation des tétrols en phase aqueuse ainsi que celle d'AOS provenant de l'oxydation de la méthacroléine et de la méthylvynylcétone. Ce nouveau mécanisme repose sur des schémas réactionnels publiés d'une part et sur la base de données expérimentales récentes d'autre part. Le vieillissement en phase aqueuse d'AOS formé par oxydation de divers précurseurs en phase gazeuse est aussi inclus dans le modèle. L'impact de la chimie des nuages sur les concentrations de particules atmosphérique en Europe est estimé avec le modèle pour différentes conditions météorologiques.

## DEVELOPMENT OF AN AQUEOUS PHASE MECHANISM FOR SECONDARY ORGANIC AEROSOL FORMATION

F. Couvidat (1), K. Sartelet (1) et C. Seigneur (1)

(1) CEREAs, Joint Laboratory École des Ponts ParisTech/EDF R&D, Université Paris-Est, 77455 Marne la Vallée, France

H<sub>2</sub>O (Hydrophilic/Hydrophobic Organics) is a Secondary Organic Aerosol (SOA) model based on the molecular representation of SOA and on the partition of two types of compounds: hydrophilic species (which condense preferentially on an aqueous phase) and hydrophobic species (which condense only on an organic phase). This model integrates the state of art knowledge and takes into account the condensation of semi-volatile compounds, formation of SOA from various precursors and several processes. However, this model does not take into account the aqueous phase chemistry of clouds and the formation of low-volatility compounds which can lead to SOA formation after cloud evaporation.

The aim of this study is to take into account cloud chemistry and to estimate its impact on SOA formation. SOA formation from glyoxal, methylglyoxal, methacrolein, methylvinylketone tetrols formation in an aqueous phase are included in the model. This new mechanism relies on published mechanisms and on recent experimental data. Aging of SOA in the aqueous phase is also included. Impact of cloud chemistry on aerosols concentrations in Europe is estimated with the model for different meteorological conditions.