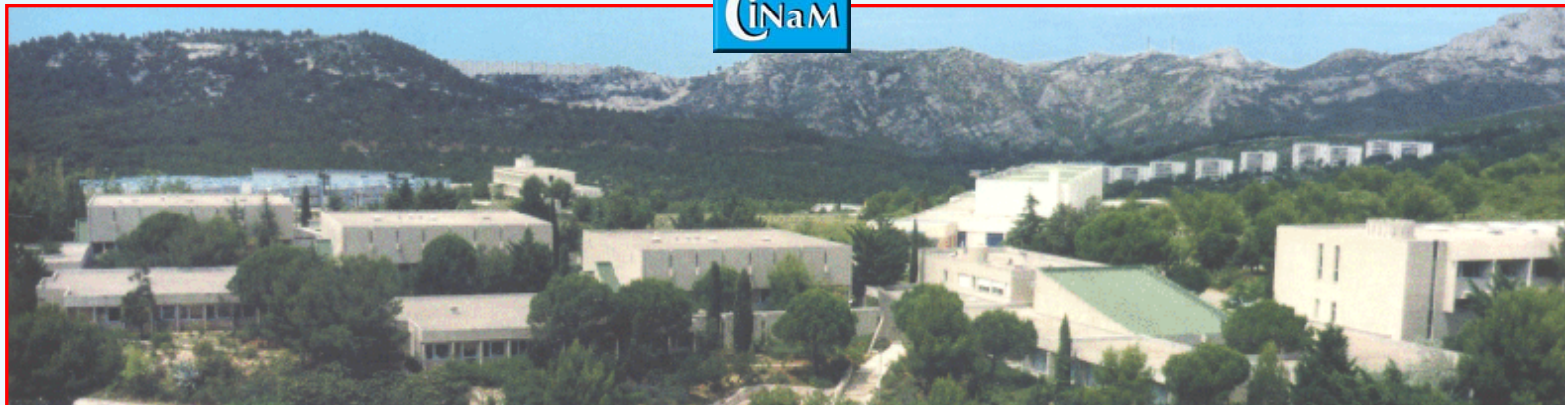


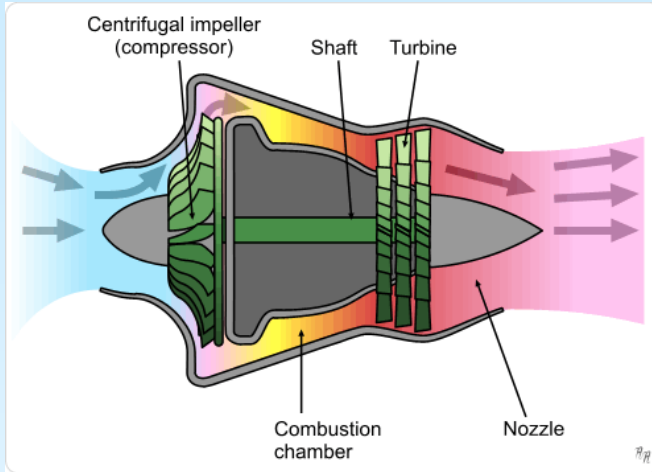
# Structure et dynamique de l'eau/glace adsorbée sur des suies d'avion – Implications atmosphériques

**B. Demirdjian, V. Tishkova\*, D. Ferry**

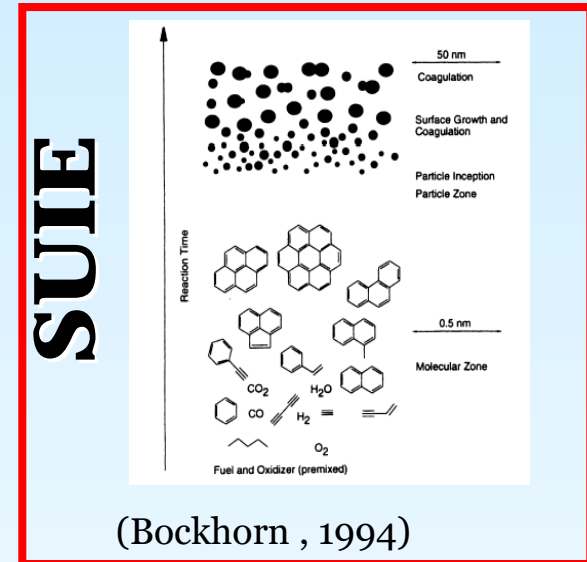
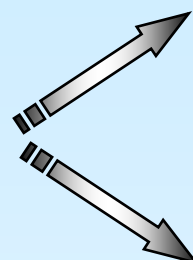
*\*CEMES / UPR CNRS 8011, 29 rue Jeanne Marvig, Toulouse*

*e-mail: demirdjian@cinam.univ-mrs.fr*





**Emission gas :**  
 $H_2O$  ,  $CO$  ,  $CO_2$  ,  $C_xH_y$  ,  $NO_x$  ,  $SO_x...$



(Bockhorn , 1994)



- **Mécanisme de croissance?**
- **Distribution en taille?**
- **Structure ?**
- **Composition chimique?**

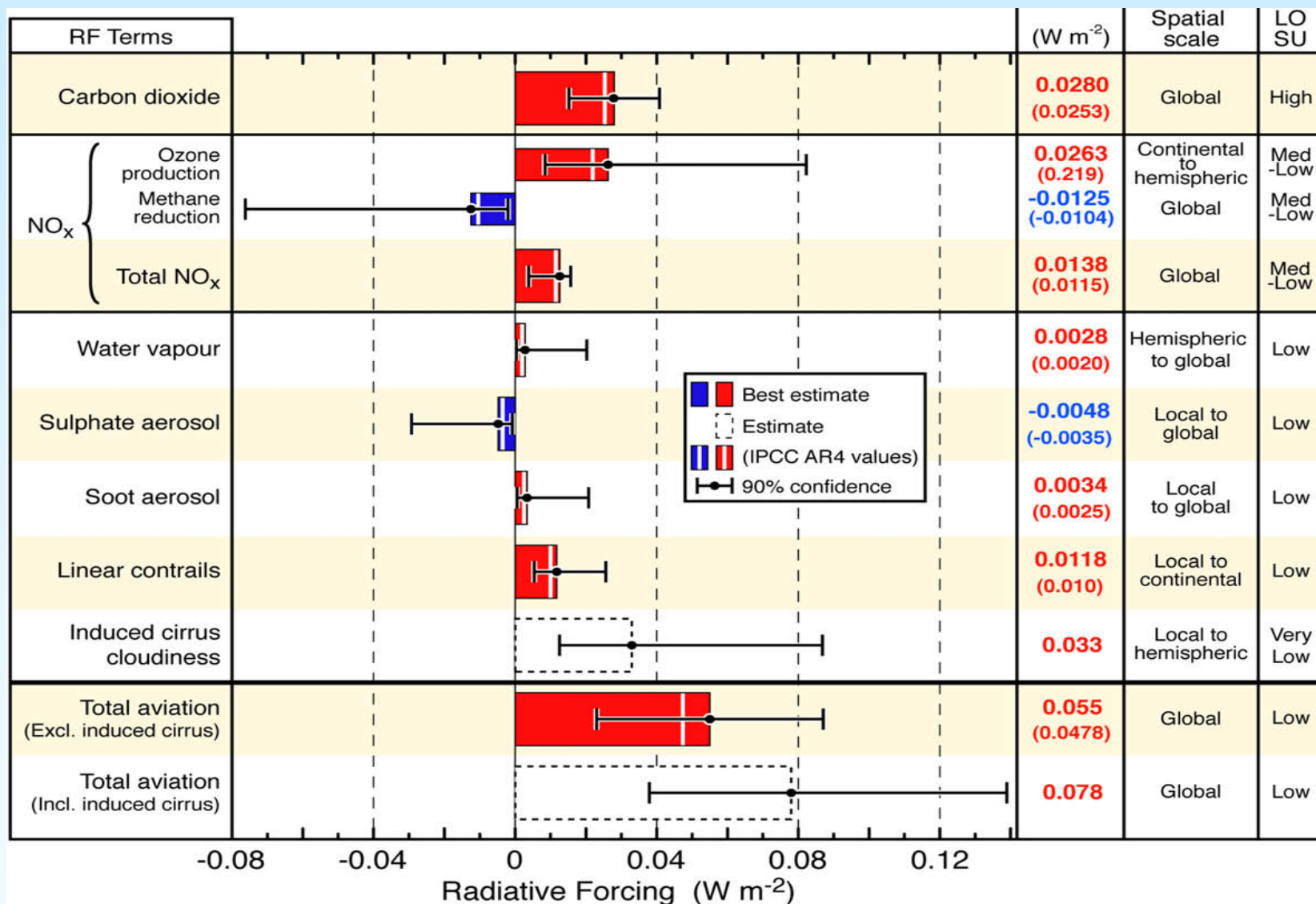
**Qualité de l'air, santé ?**



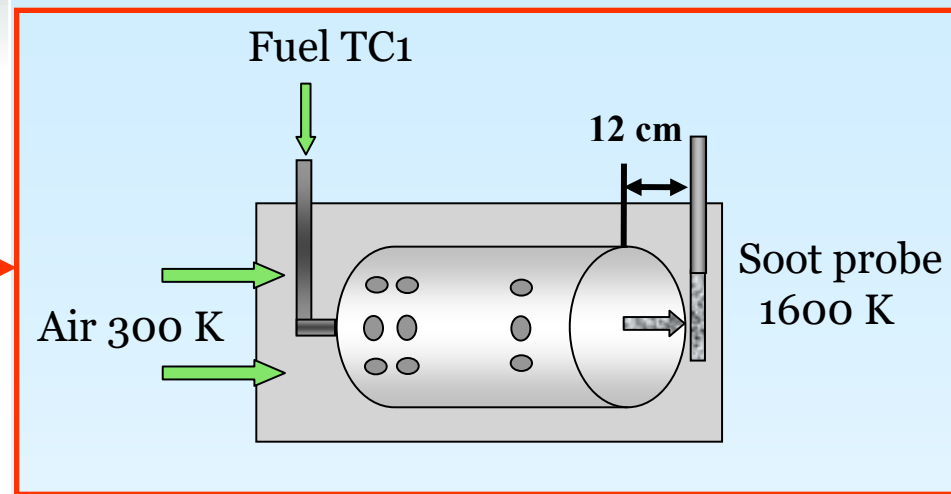
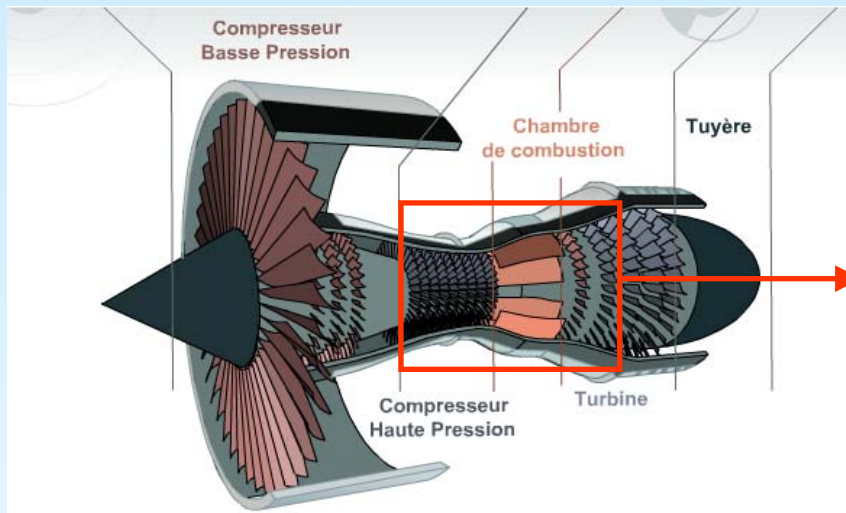
**Contrails / cirrus**



**Interaction eau / suie ?**

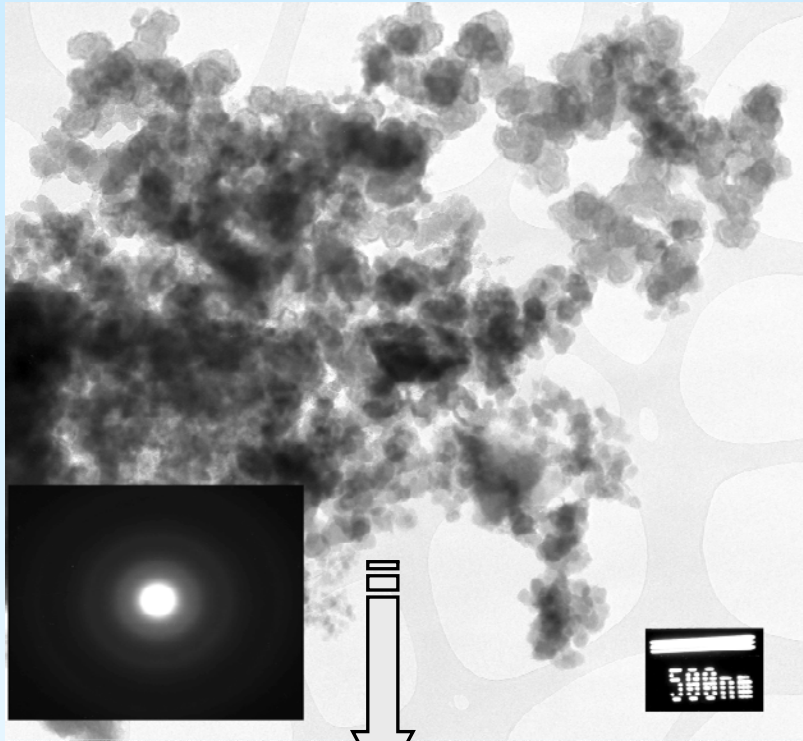


Lee et al., Atmospheric Environment 43 (2009)



Réacteur d'avion	$T_{inlet}$ (K)	$T_{outlet}$ (K)	Air / fuel ratio	Pression (atm)
D30-KU	300	1250-1450	4 - 4.5	3 - 5

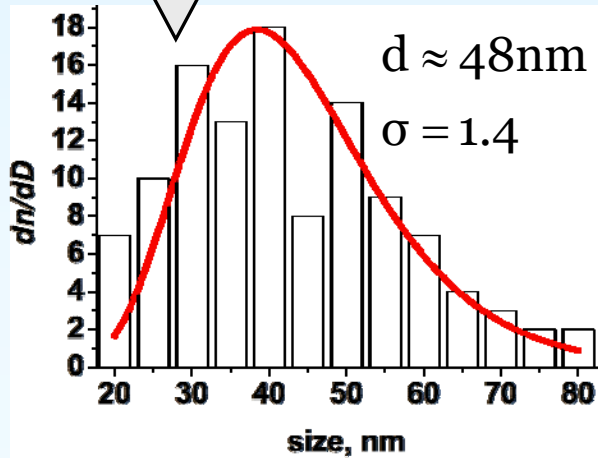
Aviation kerosene TC1 sulfur content:  $1100 \mu\text{g.g}^{-1}$



C=69.0 wt%,  
 O=20.9 wt%  
 S=2.5 wt%

20 nm

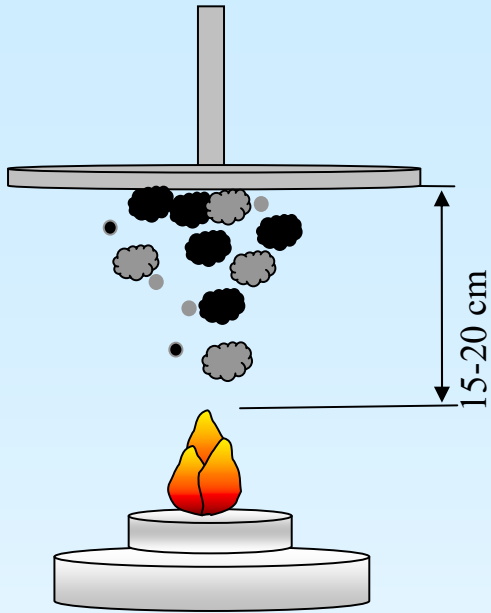
C  $\approx$  96.6 wt%  
 O  $\approx$  3.1 wt%  
 S  $\approx$  0.3 wt%



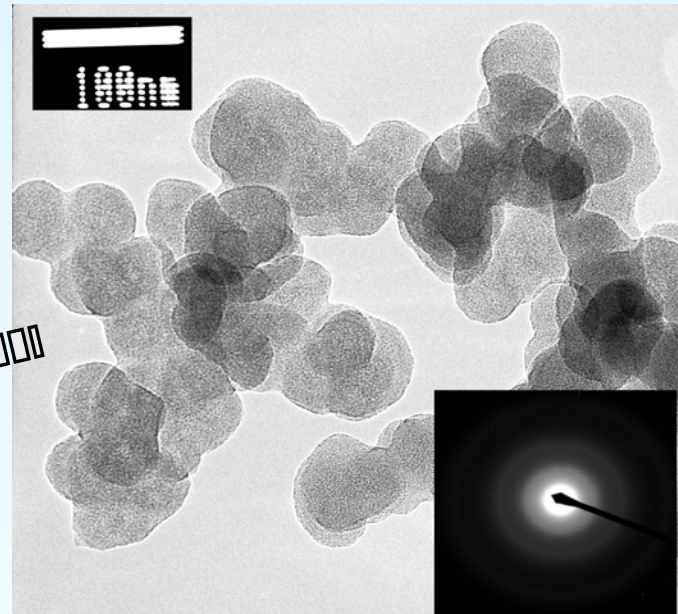
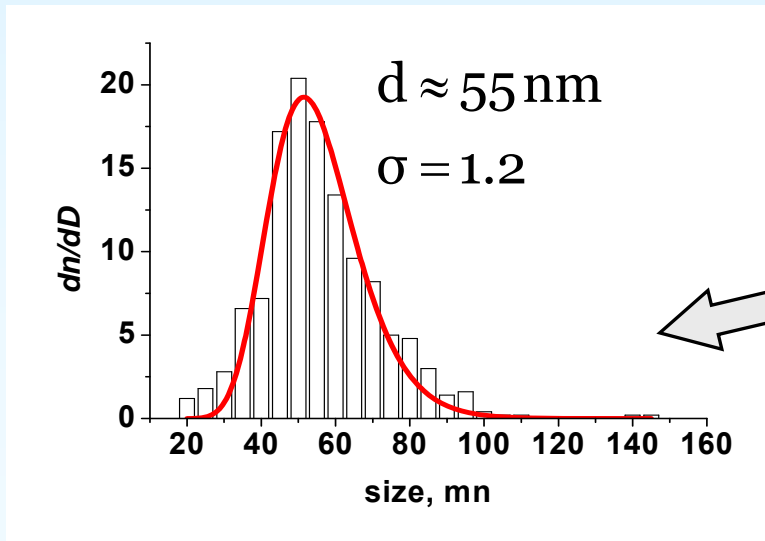
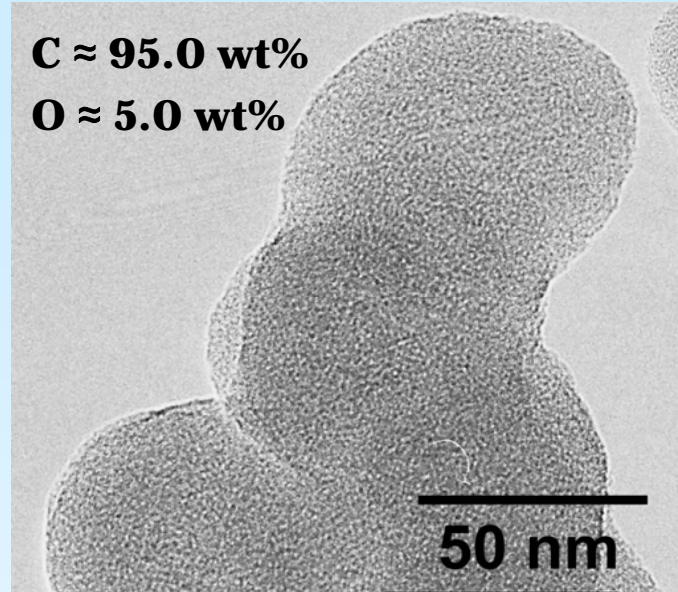
FeO

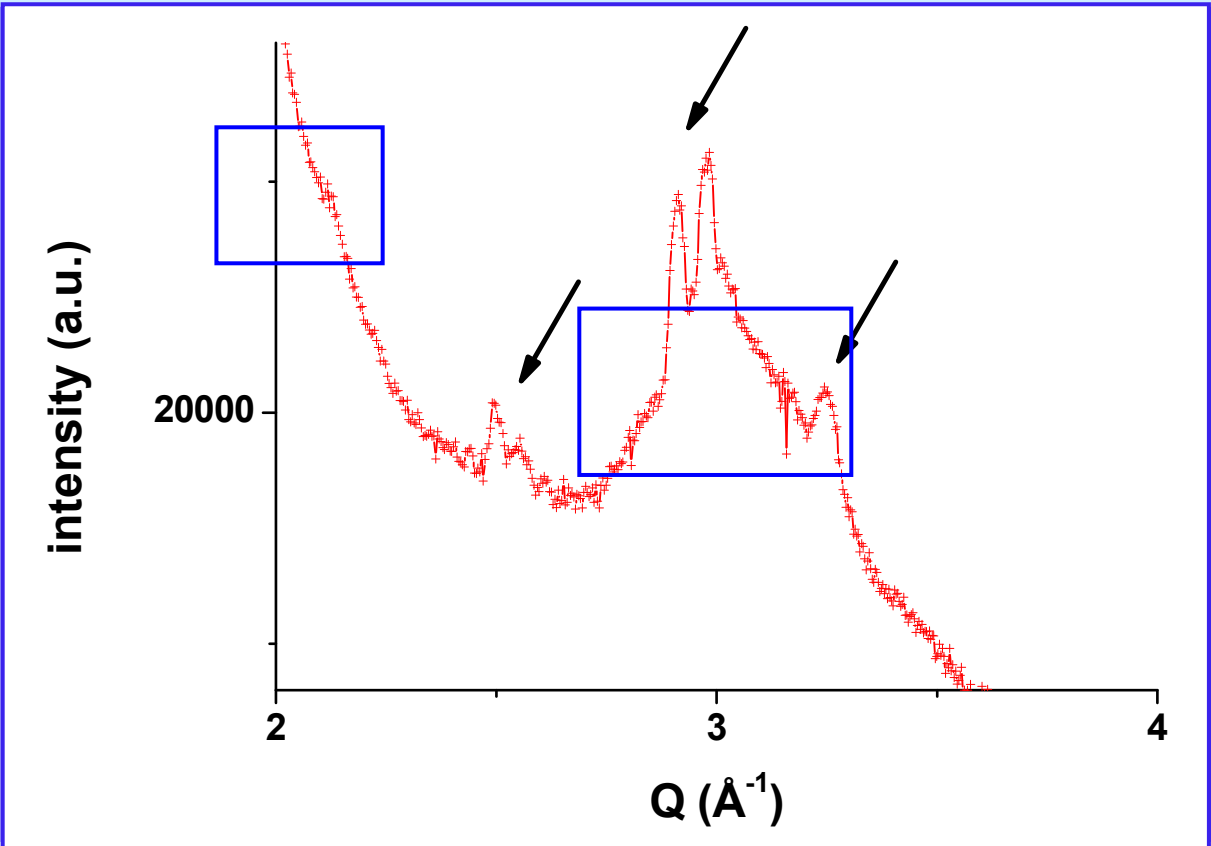
100 nm

C=61.2 wt%  
 O=6.1 wt%  
 Fe=32.0 wt%  
 S=0.7 wt%

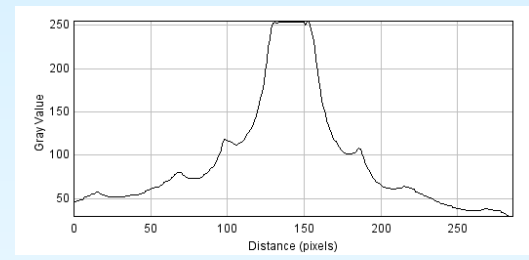
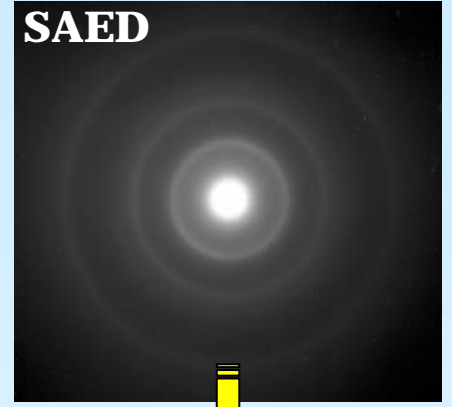


Combustion du kérosène TC1 dans une lampe à huile de laboratoire





$d_{002} = 3.58 \pm 0.20 \text{ \AA}$      $d_{10} = 2.07 \pm 0.10 \text{ \AA}$     ← chbre de combustion  
 $d_{002} = 3.58 \pm 0.19 \text{ \AA}$      $d_{10} = 2.05 \pm 0.09 \text{ \AA}$     ← lampe

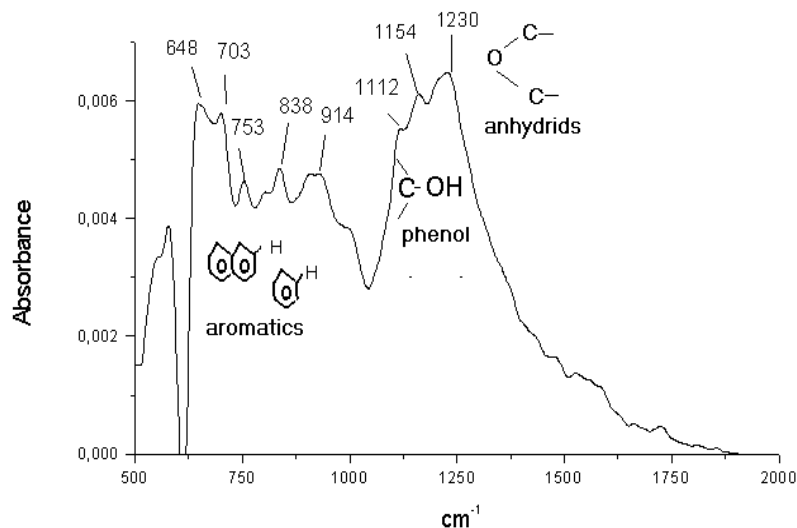


$d_{002} = 3.50 \pm 0.18 \text{ \AA}$      $d_{002} = 3.60 \pm 0.21 \text{ \AA}$   
 $d_{10} = 2.07 \pm 0.11 \text{ \AA}$      $d_{10} = 2.07 \pm 0.11 \text{ \AA}$   
 $d_{11} = 1.19 \pm 0.07 \text{ \AA}$      $d_{11} = 1.23 \pm 0.06 \text{ \AA}$

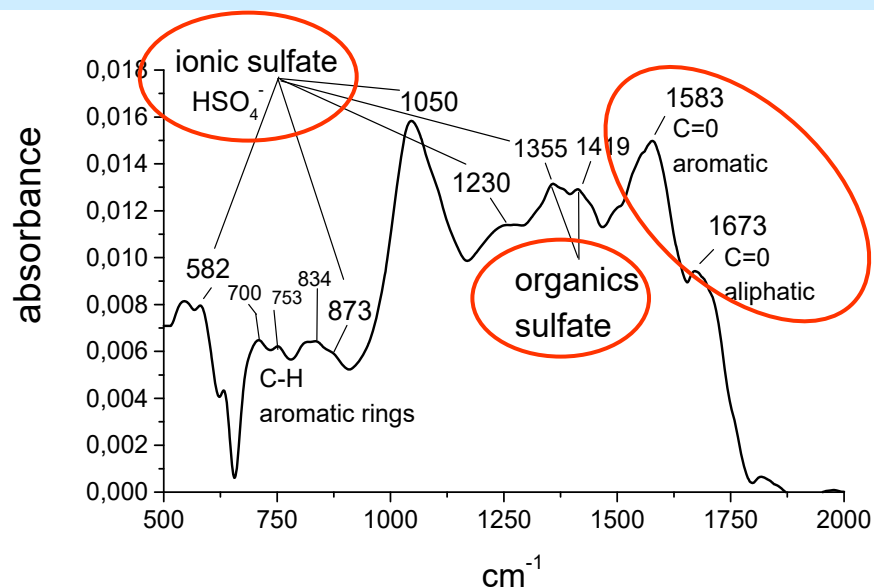
**C graphite turbostratique**

Dans la suie de chambre de combustion on observe des impuretés métalliques contenant du fer **FeO, FeO(OH)**, du cuivre **CuO, Cu<sub>2</sub>O** et de l'aluminium **Al(OH)<sub>3</sub>**.

## Suie de lampe



## Suie de chambre de combustion



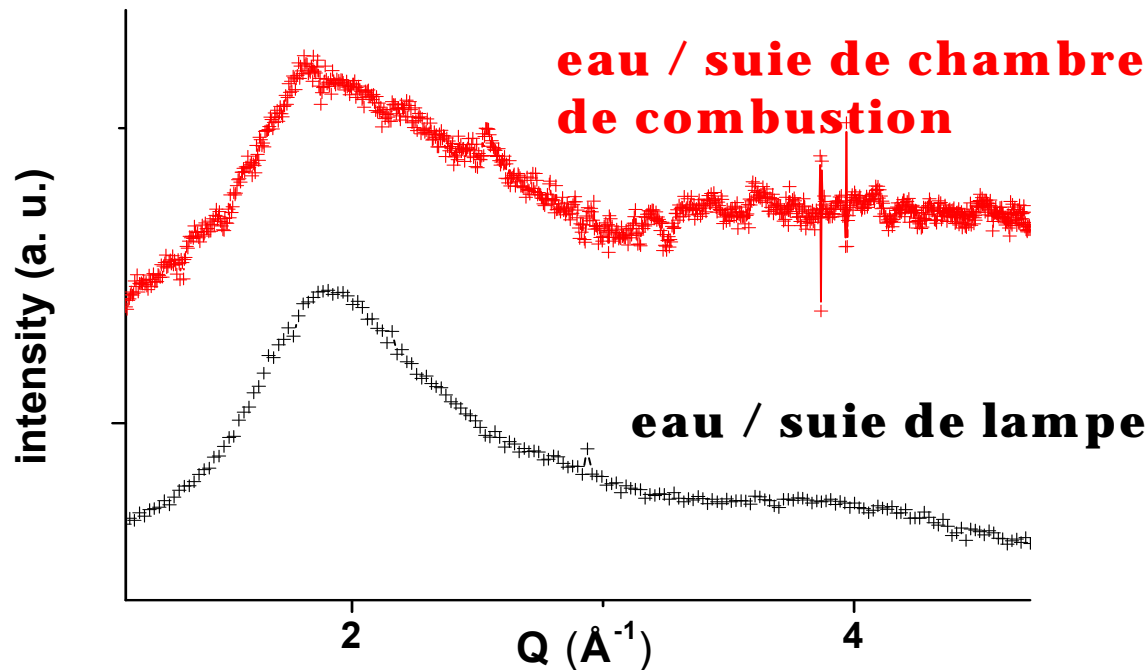
Suie de lampe suie de chambre	Bandes ( $\text{cm}^{-1}$ )	Hydrophilicité
CH déformation, aromatiques	650-920	faible
-C-O-C- anhydrides, aryles	1230	moyenne
C-OH stretch, phénols	1154, 1112	moyenne
-O- aromatique ester	1154, 1112	faible
O-H stretch, hydroxyle	3290	haute

Suie de chambre	Bandes ( $\text{cm}^{-1}$ )	Hydrophilicité
<b>C=O carbonyle, aliphatique</b>	1673	<b>haute</b>
<b>C=O carbonyle, aromatique</b>	1583	<b>haute</b>
<b><math>\text{HSO}_4^-</math> ion</b>	1355, 1230 1050, 873, 582	<b>haute</b>
<b>Sulfates organiques</b>	1355, 1419	<b>haute</b>

**Suie de chambre de combustion présente des groupes fonctionnels de surface plus hydrophiles que la suie de lampe.**



T = 280 K



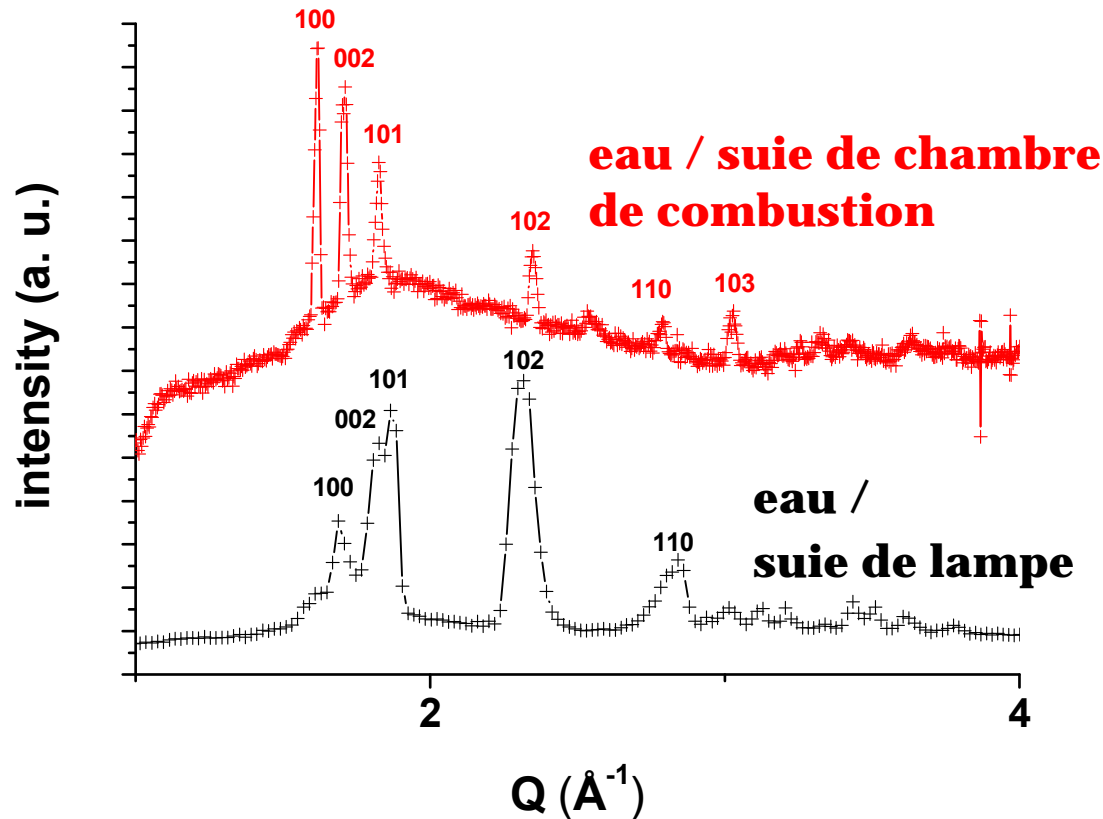
Eau adsorbée /  
suie de chambre  
de combustion  
> eau / suie de  
lampe

Pic eau liquide à  
280 K vers  $1.9 \text{ \AA}^{-1}$   
(*asymétrique*  
*pour l'eau / suie*  
*de chambre de*  
*combustion*)

Diffractogrammes différence correspondant à l'eau adsorbée sur les différentes suies (RH = 100 %)

Isothermes d'adsorption de l'eau sur les suies à t° ambiante

T = 260 K (après recuit)

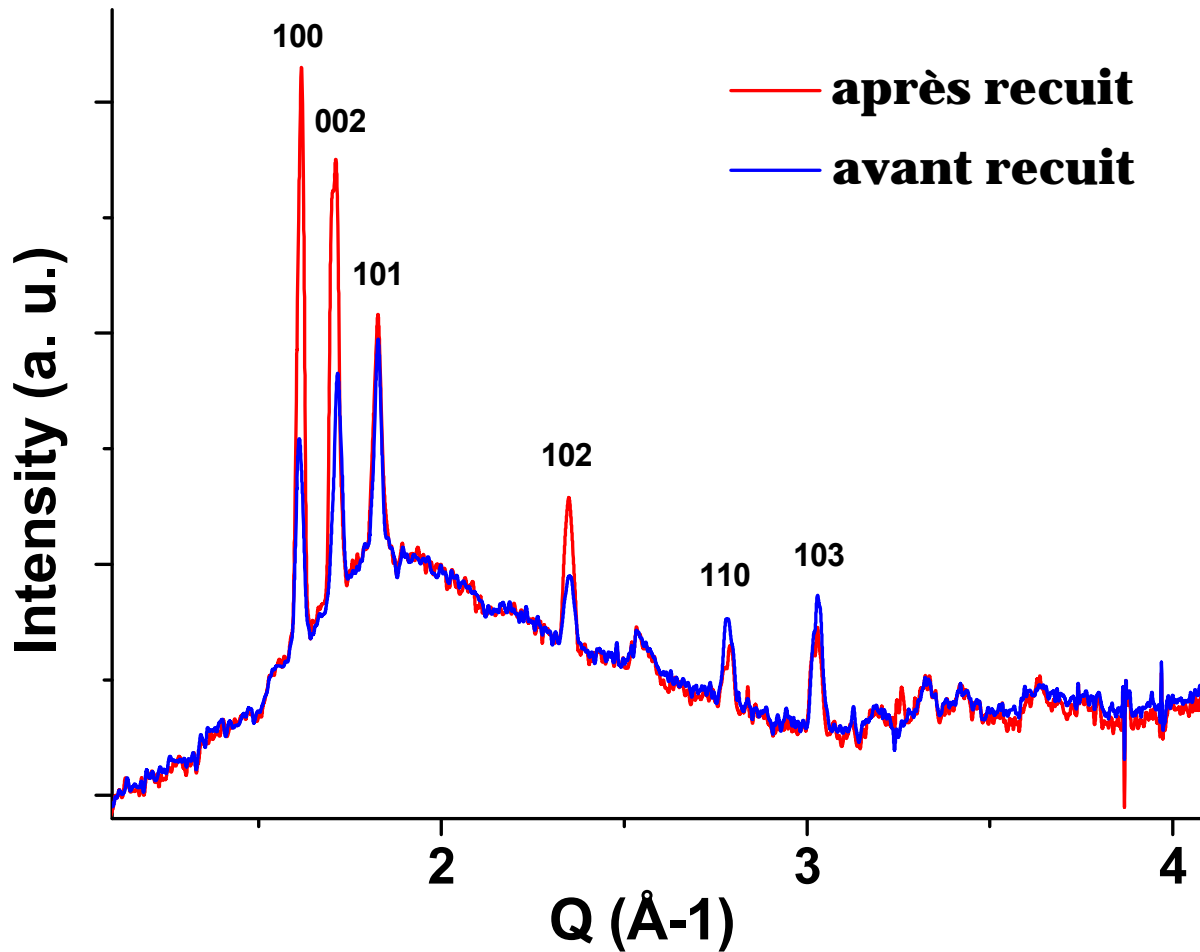


Coexistence d'un pic large (vers 1.8 Å<sup>-1</sup>) + pics de Bragg de la glace Ih

Le recuit induit une forte modification du diffractogramme de la glace / suie de lampe :

- Disparition du pic large et apparition de pics de Bragg de la glace Ih

T = 260 K

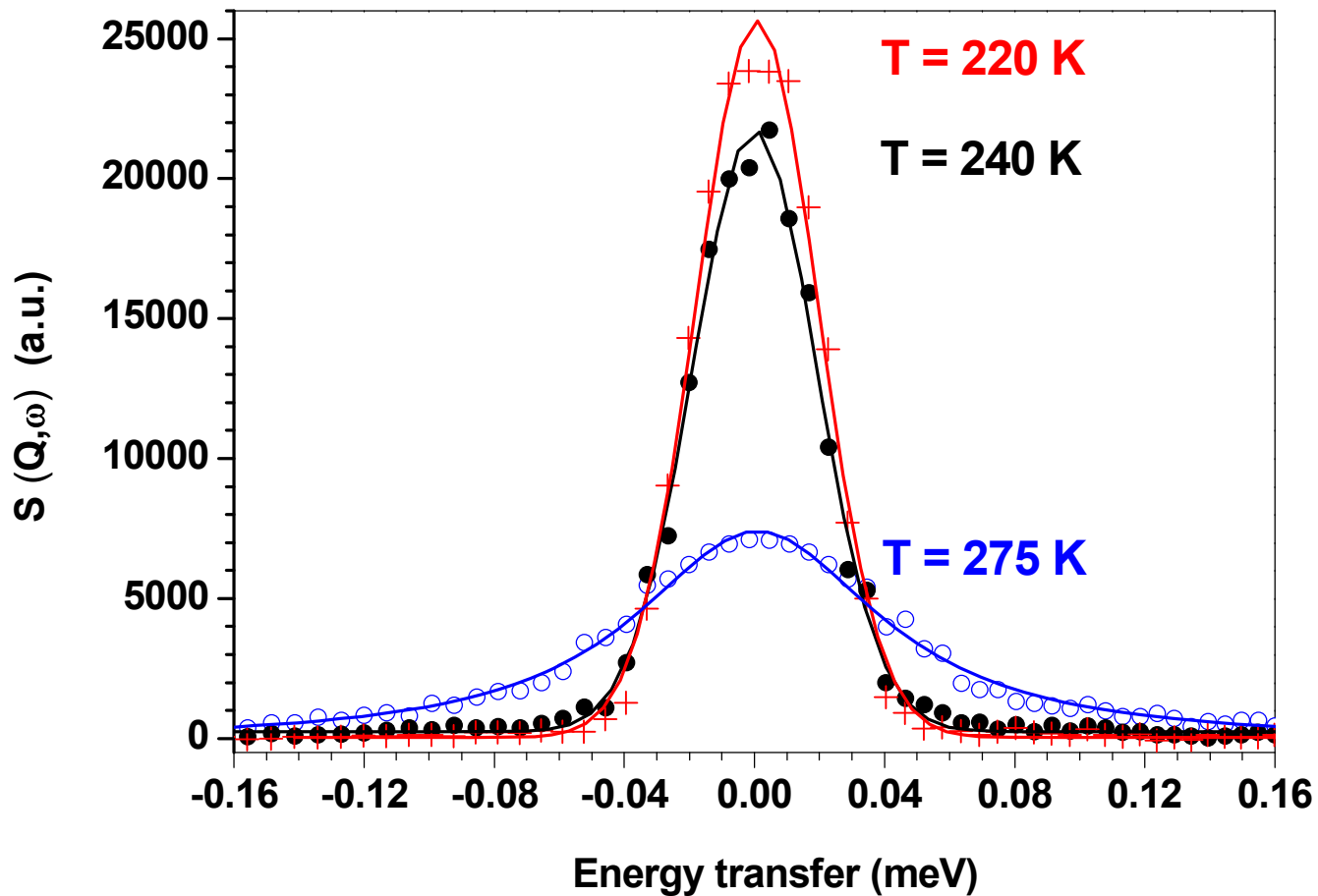


Le pic large à 1.8 Å<sup>-1</sup> existe toujours (eau confinée micropores / glace amorphe ?)

Seuls les ratio d'intensité des pics de Bragg de Ih sont modifiés

**T (contrails) : 220 – 240 K**

**Q = 0.63 Å<sup>-1</sup>**



*B. Demirdjian et al., Chemical Physics Letters 480 (2009) 247–252*

<b>T (K)</b>	$D_t$ ( $10^{-5}$ cm <sup>2</sup> /s)	Tau (ps)	Fraction liquide (%)	Fraction solide (%)
<b>275</b>	1.5±0.8	-	62	38
<b>240</b>	0.8±0.4	8±4	33	67
<b>220</b>	0.5±0.3	17±8	25	75

- eau surfondue observée jusqu'à 220 K  
 → confinement eau dans les micropores
- fraction quasi-solide à 275 K (confinement, sites actifs de surface)

Propriétés physico-chimiques des particules de suies :

- **hygroscopicité et adsorption de l'eau**
- **nucléation et structure de la glace**

Dans les conditions de formation des contrails/cirrus ( $220 \text{ K} < T < 240 \text{ K}$ ) pour les 2 types de suie plus de 50 % de l'eau est sous forme de glace

- **particules de suie = bons noyaux potentiels pour la condensation de la glace dans l'atmosphère (contrails)**
- **effet recuit important sur la structure des cristaux de glace : simulation effet vieillissement dans l'atmosphère (formation des cirrus)**

- O.B. Popovicheva (Univ Moscou)
- B. Beuneu, I. Mirebeau, R. Kahn (LLB, Saclay)
- M. Johnson, Th. Hansen (ILL, Grenoble)
- Tous les services communs du CINaM,  
en particuliers le service de Microscopie Électronique (D. Chaudanson et S. Nitsche)