



**HAL**  
open science

# Caractérisation des produits d'oxydation d'un monoterpène par spectrométrie de masse haute résolution : Formation de produits oxygénés complexes

Zahraa Dbouk, Nesrine Belhadj, Maxence Lailliau, Roland Benoit, Philippe Dagaut

## ► To cite this version:

Zahraa Dbouk, Nesrine Belhadj, Maxence Lailliau, Roland Benoit, Philippe Dagaut. Caractérisation des produits d'oxydation d'un monoterpène par spectrométrie de masse haute résolution : Formation de produits oxygénés complexes. SEP 2023, 16ème Congrès Francophone sur les Sciences Séparatives et les Couplages, Mar 2023, Paris, France. 2023. hal-04028846

**HAL Id: hal-04028846**

**<https://hal.science/hal-04028846v1>**

Submitted on 16 Mar 2023

**HAL** is a multi-disciplinary open access archive for the deposit and dissemination of scientific research documents, whether they are published or not. The documents may come from teaching and research institutions in France or abroad, or from public or private research centers.

L'archive ouverte pluridisciplinaire **HAL**, est destinée au dépôt et à la diffusion de documents scientifiques de niveau recherche, publiés ou non, émanant des établissements d'enseignement et de recherche français ou étrangers, des laboratoires publics ou privés.

Public Domain

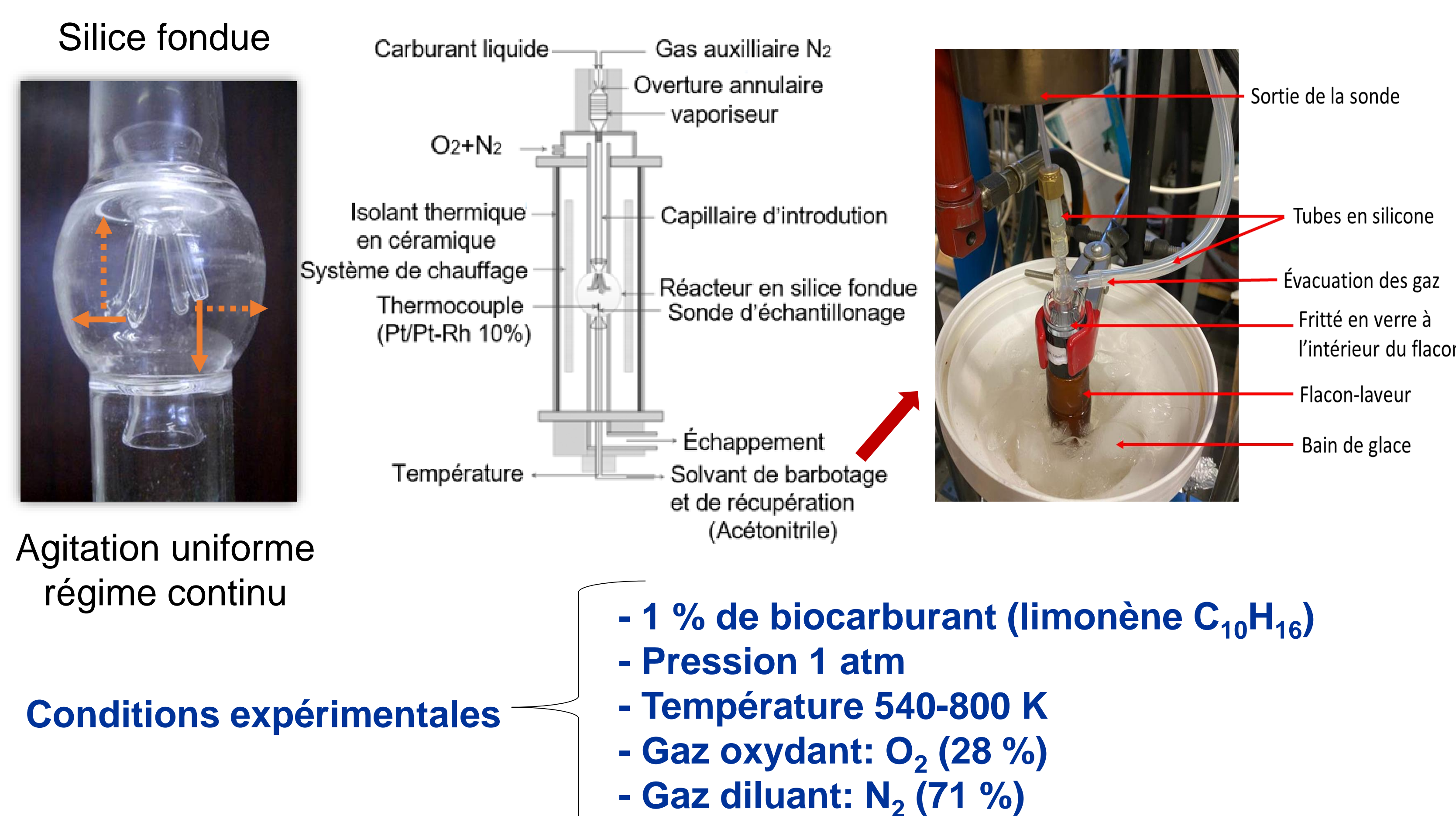


## Introduction et objectifs

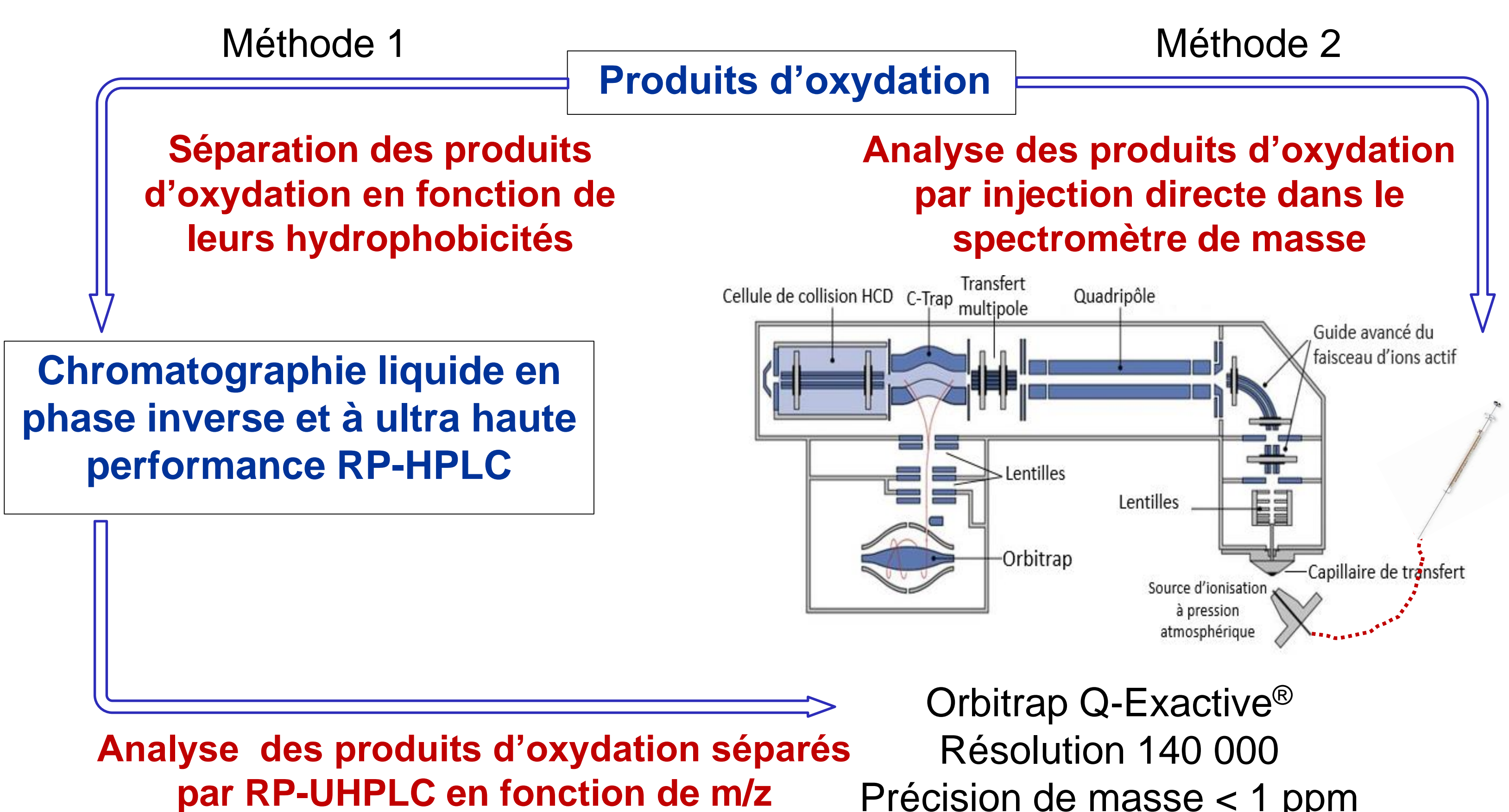
Les monoterpènes ( $C_{10}H_{16}$ ) sont des composés organiques volatiles [1] abondants dans l'atmosphère qui conduisent à la production d'aérosols organiques secondaires nuisant à la qualité de l'air [2]. À cause de leur indice de cétane d'environ 20, ils sont également considérés comme possibles combustibles pour le transport terrestre [3]. Leurs cinétiques d'oxydation avec les oxydants atmosphériques ( $O_3$ ,  $NO_x$ , ...) ont été largement étudiées. Cependant, on trouve peu d'études concernant la combustion de ces espèces à basse température et à des températures intermédiaires. Dans le cadre de notre travail, une étude expérimentale sur l'oxydation du limonène a été menée dans un réacteur parfaitement agité à jets gazeux (JSR) [4] dans une large gamme de températures (520–800 K) et à pression atmosphérique.

## Partie expérimentale

### A- Oxydation du limonène dans un réacteur parfaitement agités par jets-gazeux (JSR)

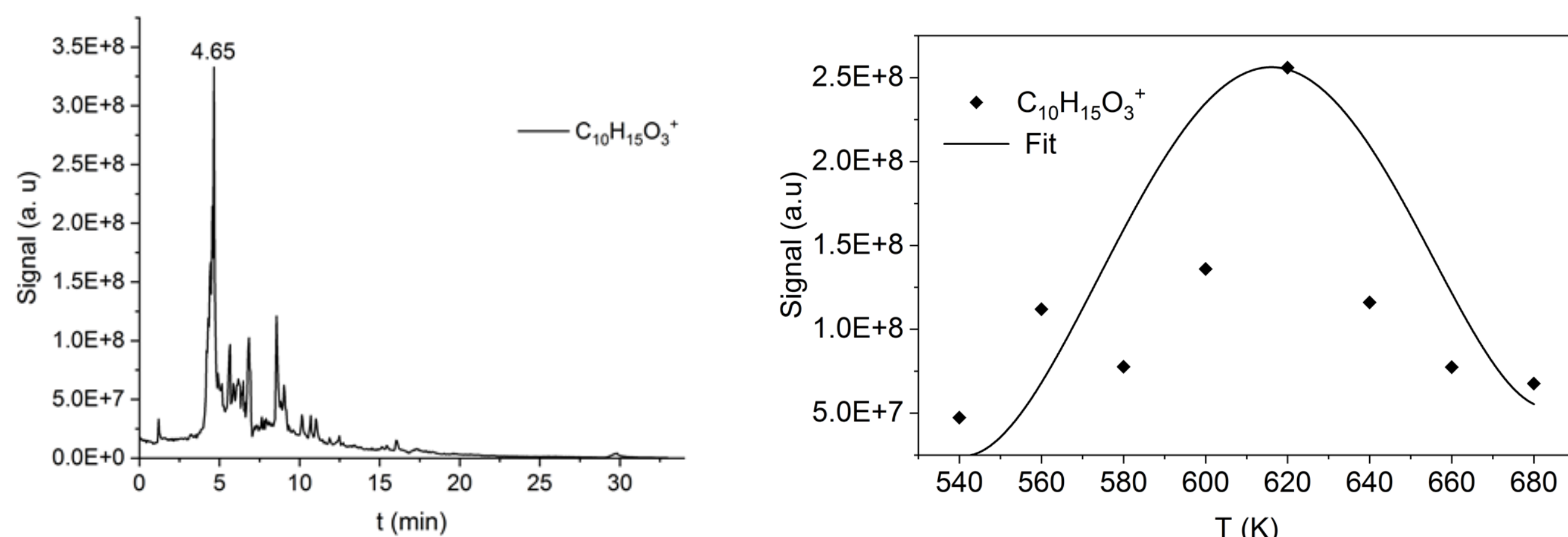
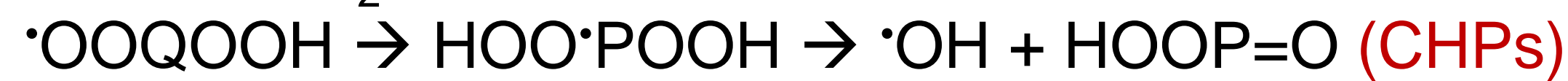
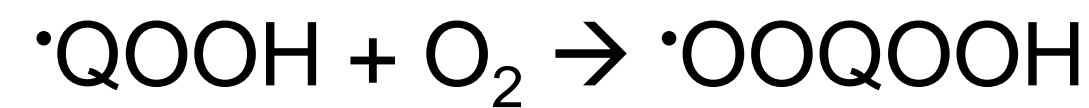
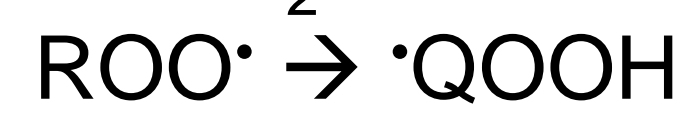
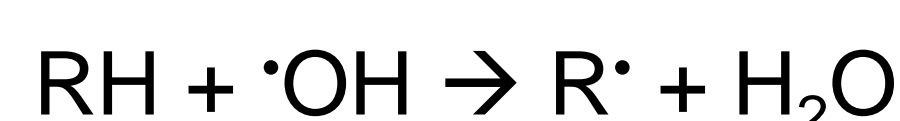


### B- Analyse des produits d'oxydation du limonène par Chromatographie liquide couplée à la spectrométrie de masse haute résolution

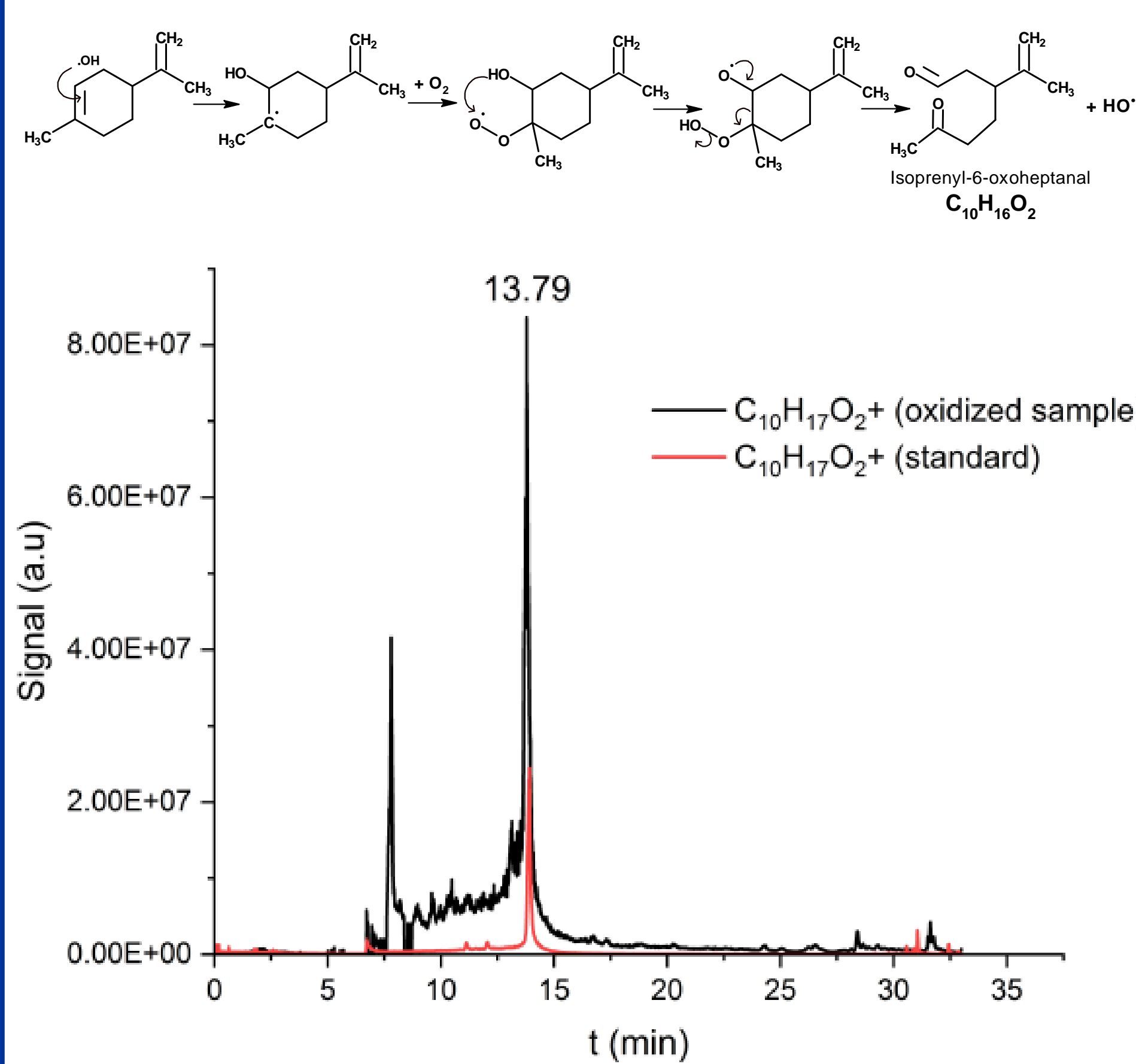


## Résultats et discussion

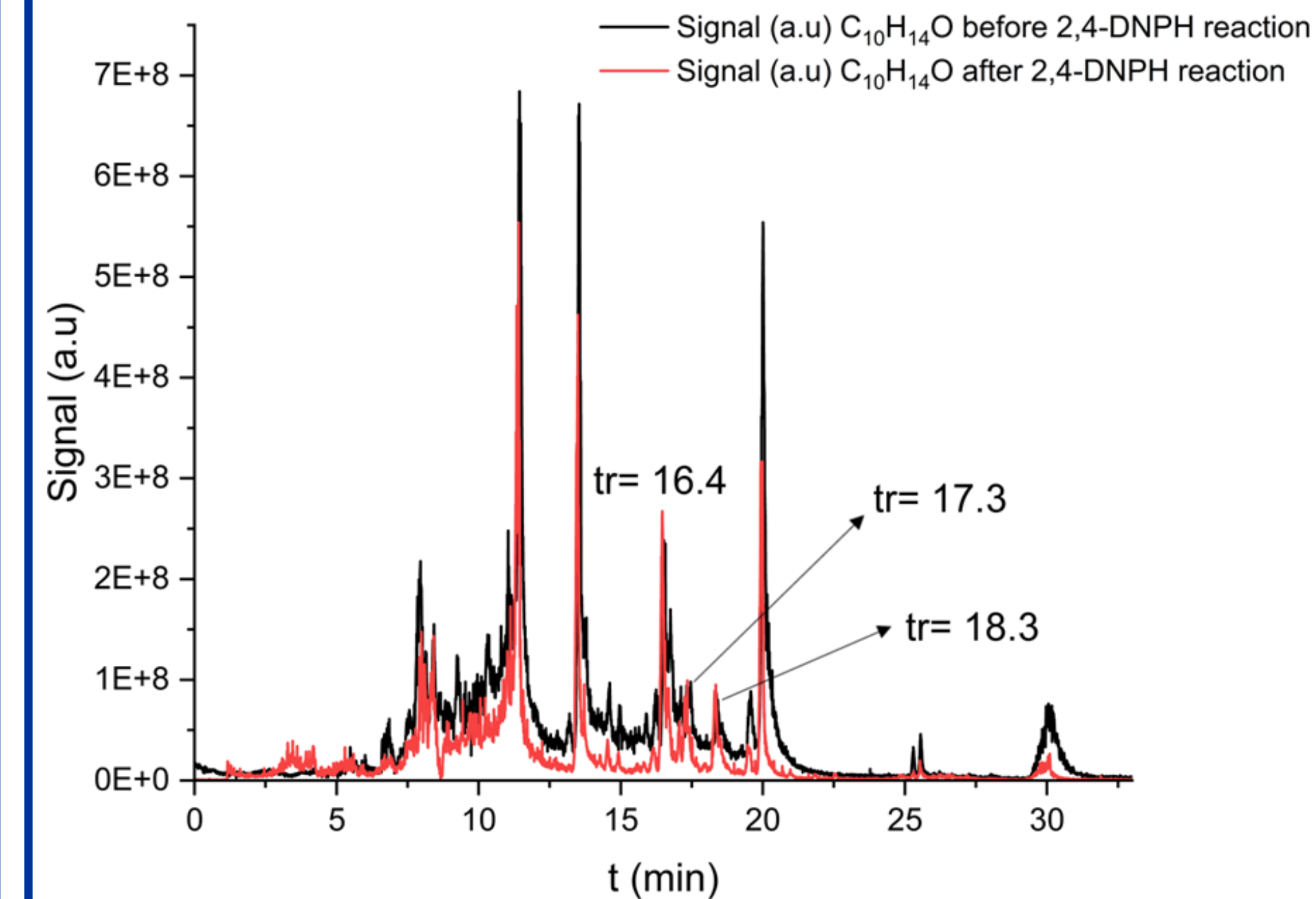
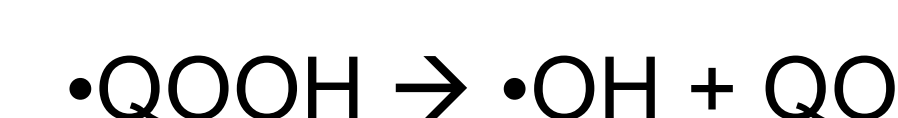
### Formation des céto-hydroperoxides CHPs



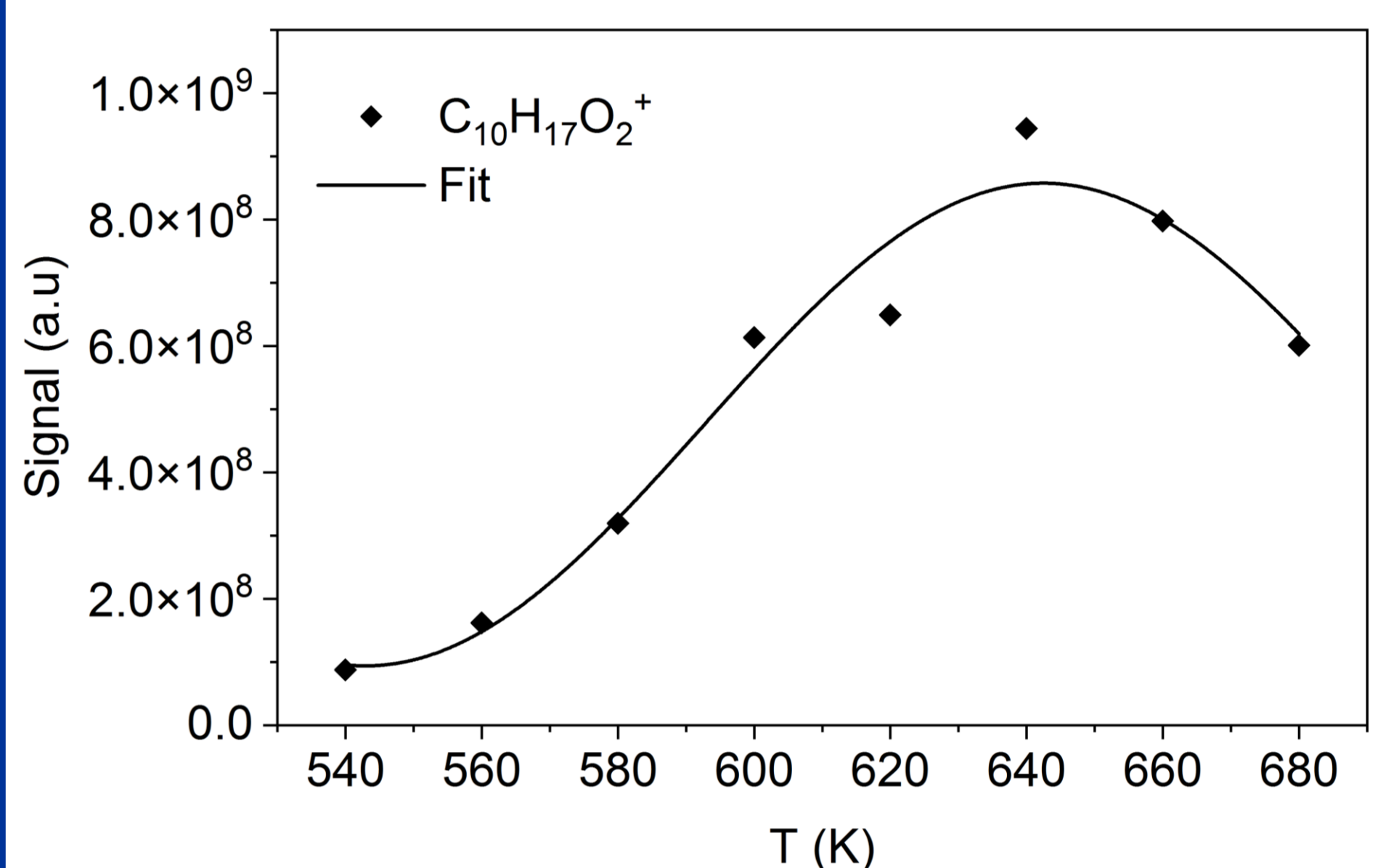
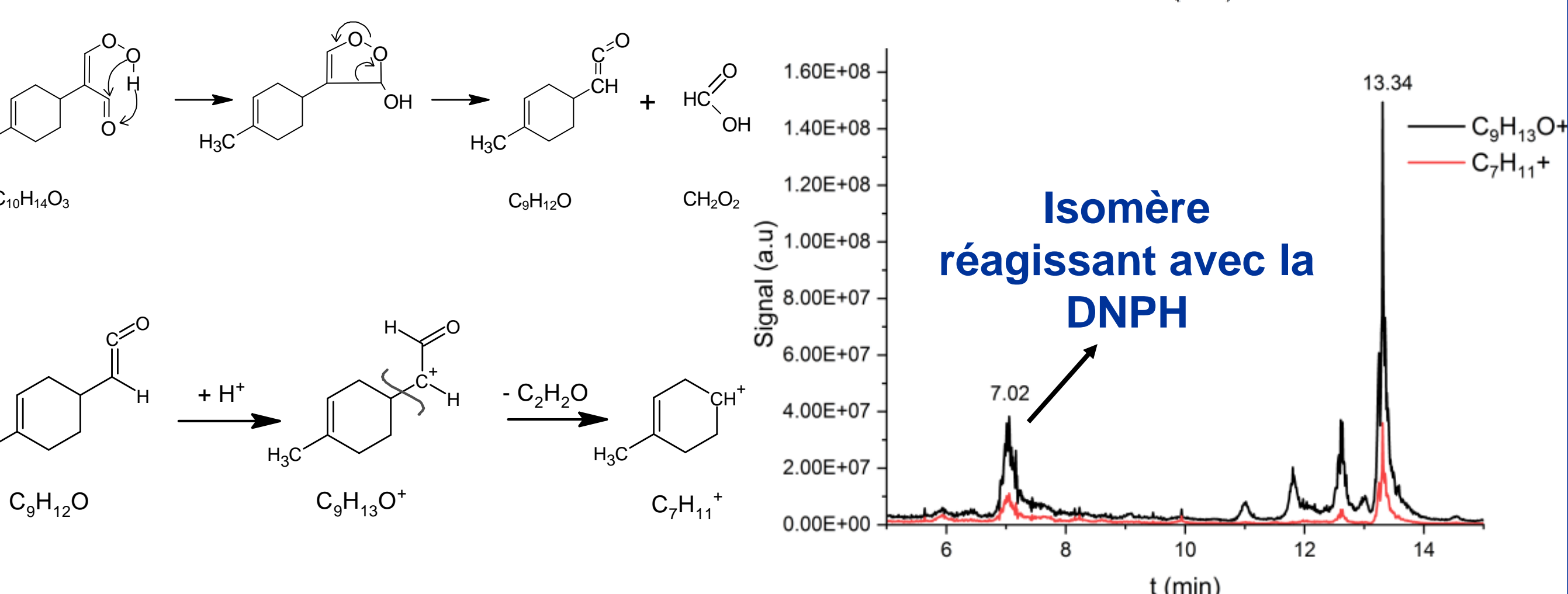
### Mécanisme de Waddington



### Ethers cycliques, cétone et aldéhydes



### Mécanisme de Korcek



## Conclusion

- Plusieurs produits d'oxydation ont été détectés parmi lesquels on trouve des molécules contenant  $\geq 6$  atomes d'oxygène.
- Les méthodes analytiques et les techniques physico-chimiques de caractérisation utilisées dans ce travail pourraient s'appliquer à la caractérisation des produits d'oxydation d'autres terpènes et de carburants modèles plus simples.

## Références

- [1] Banthorpe et al. <https://doi.org/10.1021/cr60276a002>.  
[2] Kanakidou, M. et al. <https://doi.org/10.5194/acp-5-1053-2005>.  
[3] Yanowitz, J. Compendium of Experimental Cetane Numbers. *Renewable Energy* 2017.  
[4] Dagaut, P. et al. <https://doi.org/10.1088/0022-3735/19/3/009>.