



**HAL**  
open science

## Outils de modélisation de la chimie de l'atmosphère : Etude de l'accident de Fukushima Daiichi

Valérie Fevre-Nollet, Patrick Lebègue, Florent Louis, Sonia Taamalli

### ► To cite this version:

Valérie Fevre-Nollet, Patrick Lebègue, Florent Louis, Sonia Taamalli. Outils de modélisation de la chimie de l'atmosphère : Etude de l'accident de Fukushima Daiichi. CNRIUT 2023 Saint Pierre - La Réunion, IUT de Saint Pierre, Jun 2023, Saint Pierre (La Réunion), La Réunion. hal-04326696

**HAL Id: hal-04326696**

**<https://hal.science/hal-04326696>**

Submitted on 6 Dec 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.

---

## Outils de modélisation de la chimie de l'atmosphère : Etude de l'accident de Fukushima Daiichi

---

Valérie Fèvre-Nollet<sup>1</sup>      Patrick Lebègue<sup>1</sup>  
valerie.fevre-nollet@univ-lille.fr    patrick.lebegue@univ-lille.fr

<sup>1</sup> IUT, Université de Lille  
Physicochimie des processus de combustion et de l'atmosphère, UMR 8522

Florent Louis<sup>2</sup>    Sonia Taamalli<sup>2</sup>

<sup>2</sup> Université de Lille  
Physicochimie des processus de combustion et de l'atmosphère, UMR 8522

**Thèmes** – Chimie - Environnement - Informatique

**Résumé** – *La chimie de l'atmosphère est un champ de recherche pluridisciplinaire qui comprend, entre autres, des spécialistes en chimie, physique, modélisation informatique, météorologie et sciences environnementales. Afin de synthétiser l'ensemble de leurs connaissances, des modèles sont développés et appliqués à l'étude de phénomènes d'actualité tels que le changement climatique, la pollution atmosphérique ou les incidents et accidents industriels. Nous allons présenter dans ce papier un exemple d'utilisation de 3 types de modèles, rarement mis en relation : un modèle de chimie théorique, un modèle de réactivité chimique 0D et un modèle de chimie-transport 3D. Ils sont conjointement appliqués à l'étude de l'accident de la centrale nucléaire de Fukushima Daiichi.*

**Mots-Clés** – Chimie, atmosphère, modélisation



Fukushima, nous développons donc dans un premier temps un mécanisme chimique complet de l'iode gazeux : il intègre toutes les connaissances thermocinétiques et réactions déterminées par chimie théorique publiées à ce jour. Ce mécanisme est ensuite analysé par modélisation 0D et 3D afin de déterminer l'impact de divers paramètres de la qualité de l'air sur l'iode.

## 4 Résultats

Dans ce type de mécanisme, compte tenu du manque de données dans les publications, il est courant de faire des analogies entre éléments d'une même famille. Nous avons démontré par calcul de chimie théorique que cela ne peut pas être appliqué à l'iode par la détermination des paramètres thermo cinétique de la réaction  $X + H_2O_2 =$  produits, avec  $X = Br$  ou  $I$ , Fortin C. [1]

La mise en œuvre du mécanisme 0D a permis de mettre au jour une forte réactivité de l'iode dans l'atmosphère. Il fait clairement apparaître un cycle jour/nuit (Figure 3, Table1) et l'influence des polluants atmosphériques ( $NO_2$  et composés organiques) sur la formation d'iode organique suffisamment stable pour être transporté à plus longue distance et d'oxydes d'iode qui se déposeront rapidement au sol, Fortin C. [2]

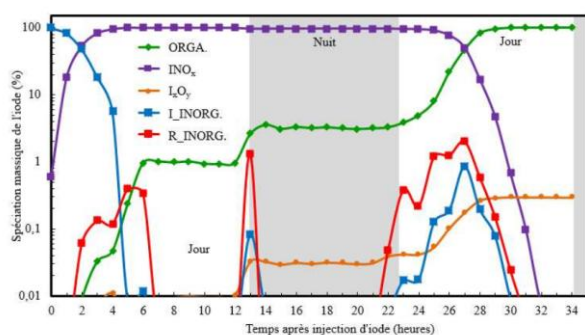


Figure 3 – Evolution de la spéciation massique de l'iode en fonction du temps (injection de  $I_2$  à 6h le 12/03/2011)

Table 1 – famille chimique des espèces iodées

Nom de la famille	Notation	Espèces chimiques
Nitroxydes d'iode	$INO_x$	$INO, INO_2, IONO_2$
Oxydes d'iode	$I_xO_y$	$I_2O, I_2O_2, I_2O_3, I_2O_4, I_2O_5, I_2O_6, I_2O_7, I_2O_8, I_2O_9, I_2O_{10}, HOIO_2$
Espèces iodées inorganiques	$I\_INORG.$	$I_2, HOI, HI$
Radicaux inorganiques	$R\_INORG.$	$I, IO, OIO$
Espèces iodées organiques	$ORGA.$	Espèces iodées comportant au moins un carbone

La simulation 3D a enfin confirmé les tendances observées en 0D, nous donnant des profils de concentration d'espèces assez similaires tout au long de la trajectoire 3D (Figure 4).

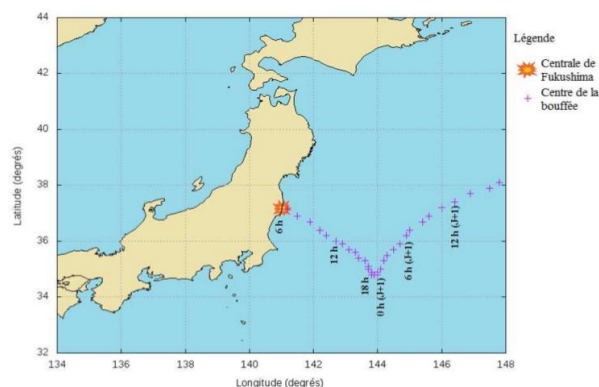


Figure 4 – Déplacement de la bouffée (injection de  $I_2$  à 6h le 12/03/2011)

## 5 Conclusions

Les résultats obtenus dans le cadre de l'étude de l'accident de Fukushima démontrent l'intérêt de l'utilisation conjointe de modèles de chimie théorique, 0D et 3D. Cette complémentarité est étendue à de nouveaux travaux afin d'étudier l'impact du chlore sur le changement climatique (coopération avec Météo France, modèle 3D Mocage). Une étude en chimie théorique est également en cours sur la réactivité des produits phytosanitaires avec les polluants de l'atmosphère.

## 6 Remerciements

Les auteurs expriment leur gratitude au LABEX CaPPA (Chemical and Physical Properties of the Atmosphere) "ANR-11-LABX-0005-01" pour son soutien financier ainsi que le conseil régional "Hauts de France" et "the European Funds for Regional Economic Development"

## Références

- [1] Camille Fortin, Sarah Khanniche, Dora Khiri, Valérie Fèvre-Nollet, Patrick Lebègue, Frédérique Cousin, Ivan Černusak, Florent Louis, *Reactivity of Hydrogen Peroxide with Br and I Atoms*. J. of Phys. Chem. A, 122(4):1053-1063, 2018.
- [2] Camille Fortin, Valérie Fèvre-Nollet, Frédérique Cousin, Patrick Lebègue, Florent Louis, *Box modelling of gas-phase atmospheric iodine chemical reactivity in case of a nuclear accident*, Atmos. Env., 214, 116838, 2019