

Vague C :
campagne d'évaluation 2016 - 2017

Unité de recherche

Dossier d'évaluation

N.-B. : on renseignera ce dossier d'évaluation en s'appuyant sur l' « Aide à la rédaction du dossier d'évaluation d'une unité de recherche ».

Nom de l'unité : Groupe de Spectrométrie Moléculaire et Atmosphérique

Acronyme : GSMA, UMR CNRS 7331

Nom du directeur pour le contrat en cours :

Georges DURRY

Nom du directeur pour le contrat à venir :

Georges DURRY



Type de demande :

Renouvellement à l'identique

Restructuration

Création ex nihilo

Établissements et organismes de rattachement :

Liste des établissements et organismes de rattachement de l'unité de recherche pour le prochain contrat (tutelles) :

- CNRS
- Université de Reims Champagne Ardenne

Choix de l'évaluation interdisciplinaire de l'unité de recherche :

Oui

Non

SOMMAIRE DU DOSSIER D'ÉVALUATION

I. Présentation synthétique de l'unité

<i>1.1 Politique scientifique</i>	3
<i>1.2 Profil d'activité</i>	9
<i>1.2 Organisation et vie de l'unité</i>	9
<i>1.3 Faits marquants</i>	15

II. Réalisations

<i>2.1 Physique Moléculaire Théorique (PMT, E1)</i>	18
<i>2.2 Mesures Spectroscopiques et Analyses (MSA, E2)</i>	26
<i>2.3 Spectrométrie Laser et Applications (SLA, E3)</i>	34
<i>2.4 Réactivité des Processus Atmosphériques (RPA, E4)</i>	42
<i>2.5 Effervescence Champagne et Applications (ECA, E5)</i>	49
<i>2.6 Aéronomie (E6)</i>	62

III. Implications de l'unité dans la formation par la recherche 73

IV. Stratégie et perspective pour le futur contrat 76

ANNEXE : présentations synthétiques	107
ANNEXE : équipements, plateformes	112
ANNEXE : organigramme fonctionnel	112
ANNEXE : liste des réalisations et des produits de la recherche	113
ANNEXE : liste des contrats	134
ANNEXE : liste des personnels	138
ANNEXE : liste des thèses soutenues et des contrats doctoraux	139

DOSSIER D'ÉVALUATION

1. Présentation de l'unité

Le Groupe de Spectrométrie Moléculaire et Atmosphérique (GSMA), unité mixte de recherche entre le CNRS et l'Université de Reims-Champagne-Ardenne, est un laboratoire interdisciplinaire qui combine spectroscopie moléculaire (théorie et mesure) et applications aux sciences de l'environnement et à la planétologie. Le laboratoire est organisé pour le quinquennat en cours en six équipes et un Département Technique recouvrant deux grands champs thématiques, « aéronomie » et « physique moléculaire ». Le laboratoire s'appuie sur une forte composante instrumentale en spectrométrie optique tant pour l'analyse de spectres moléculaires en laboratoire que pour le développement de senseurs de terrain de gaz atmosphériques. Cette compétence dans la mesure de gaz par lasers a donné lieu à la création par le laboratoire d'une start-up, « Aérovia ». Le laboratoire a également une équipe axée sur l'étude de l'effervescence du champagne, créée en 2012, qui renforce l'ancrage régional de l'unité. Le laboratoire est rattaché principalement à l'Institut de Physique du CNRS, avec l'INSU et l'INEE en rattachements secondaires. Le laboratoire est composé de 22 EC (dont 1 PR-émérite), majoritairement en section 30, mais également des sections 31, 34, 37 et 64 du CNU. Le laboratoire compte 4 chargés de recherche CNRS (2 en section 04, 1 en section 19, 1 en section 17). Le Département technique du laboratoire comprend 10 agents BIATSS et 2 ITA CNRS. Le laboratoire comprend également environ 15 doctorants et postdocs avec des financements variés : Région, Ministère, cotutelles, CIFRE, ANR, ADEME, CNES, DGA, CEA et CNRS.

Politique scientifique

Le Groupe de Spectrométrie Moléculaire et Atmosphérique (GSMA) pour le contrat en cours continue sa stratégie d'interdisciplinarité en développant de façon équilibrée les deux axes "spectroscopie atmosphérique" et "aéronomie" et en mettant en avant ses compétences instrumentales dans la mesure de gaz par spectrométrie pour ses actions de valorisation. Comme expliqué dans le rapport AERES de 2011, le laboratoire a réussi à construire une reconnaissance internationale dans ces deux thématiques malgré le nombre réduit de ses personnels. Le contexte actuel entourant les questions climatiques est favorable aux activités du laboratoire car les enjeux futurs sur le climat sont majeurs. Le laboratoire se positionne donc à l'interface entre la spectroscopie fondamentale et appliquée et les sciences de l'environnement. Il a la capacité à étudier les molécules depuis la compréhension et la modélisation du spectre d'absorption infrarouge jusqu'à la mesure de la concentration moléculaire dans l'atmosphère par spectrométrie. La convention de partenariat entre le GSMA et l'Institut Pierre Simon Laplace (IPSL), fédération de recherche des sciences de l'environnement d'Ile de France signée en 2008 permet à l'unité de maintenir un nombre de collaborations important avec les unités CNRS du domaine de l'environnement en Ile de France. L'analyse des projets de recherche montre que la majeure partie des activités du laboratoire associe des unités de recherche de cette fédération (LATMOS, LMD, LISA, LSCE). Le laboratoire de recherche est ainsi très tourné vers l'Ile de France tant pour ses collaborations académiques qu'industrielles.

L'analyse du panorama national montre que le nombre de laboratoires de spectroscopie à haute résolution des milieux dilués a fortement diminué ces quinze dernières années, les équipes de spectroscopie infrarouge ayant souvent été intégrées à de grosses unités multidisciplinaires. En outre les laboratoires purement de sciences de l'atmosphère ou de planétologie correspondant à l'axe « aéronomie » du GSMA sont des unités de tailles bien plus importantes (>100) que le GSMA avec un nombre conséquent de personnels d'organismes de recherche (CNRS, CEA, IRD, CNAP, Météo-France,...) et la plupart du temps intégrés à de grosses structures (OSU, fédération de recherche

comme l'IPSL, ...). A cela se rajoutent les structurations en COMUEs qui viennent renforcer certains grands pôles universitaires dans nos thématiques, notamment à Saclay ou à Grenoble, renforcés par des IDEX ou des ISITES à la suite du Programme d'Investissement d'Avenir, dont la montée en puissance ne sera pas sans nous impacter. Régionalement, le GSMA est très isolé thématiquement. Les grands pôles de compétitivité de la région Champagne-Ardenne sont axés sur les agro-ressources, les matériaux et l'ingénierie des systèmes. L'unité s'intègre mal dans les thématiques phares mises en avant dans le projet d'Isite régional « Cube », i.e. la « Bioéconomie » et « l'Ingénierie des Systèmes », projet retoqué par le jury international mais actuellement toujours présenté comme structurant pour la future COMUE « Université de Champagne ». Au moment d'écrire ce document, il est difficile de comprendre comment va évoluer l'ESR régional avec en même temps la mise en place de la COMUE et de la grande région Est avec ses deux grands pôles universitaires Strasbourg et l'Université de Lorraine. Par conséquent, le laboratoire continue sa politique résolument tournée vers l'Île de France et l'international.

Cependant pour assurer un ancrage régional du GSMA, nous avons créé l'équipe Effervescence Champagne et Applications en 2012, équipe qui développe ses thématiques en étroites collaborations avec les maisons de champagne et les milieux professionnels champenois. Nous avons également créé en 2010 une start-up, « Aerovia », qui commercialise les technologies de mesure de gaz du GSMA par spectrométrie laser. Quatre chercheurs du GSMA sont co-fondateurs d'Aerovia (www.aerovia.fr). Cette entreprise a été lauréate en 2011 du concours national à l'innovation OSEO et s'est notablement développée en 2013 avec l'arrivée dans l'actionnariat de la multinationale Schlumberger. L'entreprise a quitté le GSMA début 2015 pour s'installer dans un ancien laboratoire municipal, à 500 m du GSMA ; elle compte aujourd'hui une dizaine de salariés. Cette action de valorisation a également été conduite avec le souhait de renforcer notre reconnaissance locale. En outre, toujours en termes d'implication locale, les équipes du GSMA faisant appel à de la modélisation numérique lourde en spectroscopie et aéronomie, s'impliquent fortement dans le méso-centre de calculs de Champagne-Ardenne (ROMEO) dont elles bénéficient en retour des ressources. Il faut noter également que, malgré son originalité thématique, le GSMA a toujours eu, du fait en partie de son statut d'UMR CNRS, un fort soutien de la Région (surtout pour les allocations de thèse). De même, le laboratoire a bénéficié en 2013 d'un fort soutien de la région et de l'Etat qui s'est traduit par l'acquisition d'un spectromètre par TF à très haute résolution spectrale Bruker couvrant l'UV et l'infrarouge. Ce grand équipement scientifique va jouer un rôle majeur dans le développement futur des projets de l'unité : il est d'ores et déjà partie intégrante de deux projets du GSMA, l'un avec l'ESA l'autre avec l'ADEME\BPI-France. A l'heure d'écrire ce document, une structure fédérative de recherche (SFR) axée sur les sciences de l'ingénieur est évoquée au sein de la COMUE Université de Champagne, dans laquelle le GSMA pourrait potentiellement s'impliquer pour renforcer son ancrage local.

Le GSMA étant une petite unité formée de surcroît essentiellement d'EC et donc de peu de personnels d'organismes de recherche (22 EC pour 4 CR), ne peut exister dans ce panorama qu'en faisant preuve d'originalité (interdisciplinarité) et en menant une politique active de propositions de recherche et de partenariats pour être ancrée solidement dans la communauté nationale et internationale. C'est cette analyse qui a été faite par les comités d'examen de l'unité en 2006 et 2011 et c'est cette politique qui est menée lors du présent quinquennat. Si l'on porte une analyse sur la période 2011-2015, le GSMA a pu obtenir (et coordonner) d'importants projets de recherche nationaux : ANRs blanches "Tro-Pico", « IDEO » et « APOSTIC », ANR ECOTECH « MIRIADE », ANR ASTRID « QUIGARDE », projet ESA « SEOM-IAS », projets spatiaux et ballons CNES, projet Eco-industries « ULIS », projet ADEME CORTEA « Nuages », ... Le laboratoire émerge également de façon importante dans les programmes nationaux de l'INSU : CHAT-LEFE et PNP. Par exemple en 2016, quatre projets du GSMA (L. Régalia, P. Lavvas, M. Rey, Vl. Tyuterev) ont été soutenus par le Programme National de Planétologie et trois (E. Rivière, A. Chakir, Vl. Tyuterev) l'ont été par le

programme national de chimie atmosphérique (CHAT-LEFE) couvrant ainsi l'ensemble des champs thématiques du GSMA (spectroscopie, chimie, planétologie, atmosphère). L'unité a également obtenu de nombreux cofinancements de bourses de thèses auprès de grands organismes de recherche sur cette même période : CNES (2 demi-allocations), CNRS (2 demi-allocations), DGA (3 demi-allocations) et CEA (1 demi-allocation). En termes de visibilité internationale, le laboratoire est membre fondateur du LIA « SAMIA » créé en 2015 avec la Russie autour de la spectroscopie atmosphérique. Le laboratoire a coordonné également une importante campagne de ballons internationale (plus de 30 vols stratosphériques) avec le Brésil dans le cadre de l'ANR blanche « Tropico », sur la période 2012-2013 en collaboration avec plusieurs laboratoires de l'INSU et de Météo-France (LATMOS, LMD, LPC2E, DT-INSU, LA, CNRM). Le laboratoire continue à s'impliquer fortement dans les campagnes internationales de ballons stratosphériques notamment les campagnes au Canada en 2014 et 2015 dans le cadre de l'accord entre le CNES et l'agence spatiale canadienne. Le laboratoire développe également des collaborations via les programmes PHC notamment avec les pays du Maghreb, la Belgique et la Hongrie. A noter aussi en termes de visibilité internationale, des liens forts avec le Jet Propulsion Laboratory (JPL) de la NASA\Caltech qui se sont traduits par des séjours sur plusieurs mois au GSMA, du Pr. Robert West et du Pr. Christophe Sotin, directeur scientifique de l'exploration du système solaire au JPL.

Au cours de cette période, nous avons également eu beaucoup de sollicitations de collaborations par des industriels ou des grands organismes, notamment pour les compétences en spectrométrie pour la mesure de gaz: Thalès "III-V Lab", plusieurs centres de l'INRA (Avignon, Bordeaux, Versailles-Grignon, ...), le CEA-Leti, la DGA, Environnement SA, Schlumberger.... Une politique dynamique de montage de projets de recherche est donc très importante pour que l'unité puisse perdurer dans ce contexte local et national complexe.

La stratégie en termes de ressources humaines est analysée plus en détails dans le chapitre suivant. En résumé, le laboratoire est « jeune » avec une moyenne d'âge proche de 44 ans. L'unité n'a pas pu recruter d'EC sur cette période 2011-2015, payant ainsi chèrement les faibles flux d'étudiants dans les disciplines scientifiques ; l'université a permis la conversion de certains supports d'EC en BIATSS pour renforcer notre département technique (2 IR, I Tech). Conscient de cette difficulté à recruter des ECs, le laboratoire a conduit une politique active vis-à-vis du CNRS qui a conduit au recrutement de deux chargés de recherche CNRS en 2011 et en 2015. Il est clair que la situation de non-recrutement ou de non-promotion d'EC que nous avons entre 2011-2015 et qui résulte d'une décision politique de l'université sera problématique à plus long terme, affaiblissant notre potentiel recherche. Pour compenser, dans une certaine mesure, le faible nombre de personnels d'organisme de recherche, nous utilisons de façon active les délégations CNRS (2 à 3 obtenues par an) et les demandes de CRCT.

En termes d'organisation du laboratoire, nous sommes actuellement toujours sur le schéma des six équipes même si pour le futur quinquennat nous réfléchissons à un autre mode d'organisation (deux équipes comme recommandé par le comité AERES pour avoir un nombre plus conséquent d'ETP).

Trois équipes constituent la partie "Physique moléculaire": ces équipes conduisent des travaux de spectroscopie théorique et des analyses des spectres de rotation-vibration pour des molécules d'intérêt atmosphérique et planétologique (O_3 , H_2O , CO_2 , CH_4 , isotopes...). Ces travaux s'appuient sur une forte composante instrumentale, notamment un spectromètre « maison » par TF de type Connes et un spectromètre Bruker à très haute résolution spectrale, des cuves optiques cryogéniques et une cuve optique à réflexions multiples de 50 m de base, unique en Europe, permettant des parcours d'absorption de plusieurs kilomètres. L'objectif essentiel de ces travaux est de fournir des données moléculaires très précises pour les études atmosphériques et planétologiques, notamment via une participation très active aux banques de données moléculaires internationales (HITRAN). Une équipe se consacre plus particulièrement à des développements par

spectrométrie laser, notamment par photoacoustique qui ont donné lieu à la création de la spin-off Aerovia et bénéficie d'un fort soutien de la DGA.

Trois équipes constituent la partie "Aéronomie" du laboratoire. Ces équipes conduisent des études dans le domaine de la réactivité chimique, du développement instrumental de senseurs laser novateurs pour la mesure de gaz atmosphériques ou de la modélisation atmosphérique et planétologique (modélisation meso-échelle de l'UT-LS tropicale, climat de Titan). La partie Aéronomie s'appuie également sur une forte composante instrumentale, avec notamment des senseurs laser pour des mesures de flux d'émission, pour le sondage de la stratosphère sous ballons stratosphériques (en collaboration avec la Division Technique de l'INSU: instruments SDLA, micro-SDLA, Pico-SDLA) ou embarqués sur des missions spatiales (eg, mission martienne PHOBOS-GRUNT lancée fin 2011). Cette partie des activités est très soutenue par le CNES. En janvier 2012, l'équipe « Effervescence Champagne et Applications » a été créée qui contribue fortement à l'étude de la physico-chimie de l'effervescence en lien fort avec les milieux professionnels régionaux (maisons de Champagne).

En conformité avec les recommandations du comité AERES de 2011, l'unité a renforcé les collaborations entre les différentes équipes. En particulier, l'équipe de chimie (RPA) s'est rapproché de l'équipe d'Aéronomie via le déploiement de sources laser pour des études de réactivité, travail qui a donné lieu à plusieurs publications. Les équipes SLA et ECA se sont associées pour des travaux instrumentaux sur la détermination des panaches gazeux liés à l'effervescence du Champagne qui a donné lieu à une thèse co-encadrée, actuellement en cours. L'équipe ECA a également co-encadré une thèse (bourse CIFRE cofinancée par Bull) avec l'équipe de spectroscopie théorique PMT sur la modélisation d'une molécule de CO₂ évoluant dans une matrice liquide. Les travaux inter-équipes ont donné lieu à 38 publications. Actuellement, nous réfléchissons également à la mise en place d'axes scientifiques transverses dans le cadre du projet du futur laboratoire pour favoriser les collaborations entre équipes. De plus, deux ANRs auxquelles participent des membres des équipes Aéronomie, MSA et PMT viennent d'être sélectionnées en 2016 : e-PYTHEAS (hydrocarbures, gaz chauds, exoplanètes) et WAVIL (Lidar isotopes de H₂O). Ces deux ANR vont permettre de renforcer encore les collaborations inter-équipes sur les années à venir.

Sur la période 2011- juin 2016, l'unité a publié environ 230 publications de rang A (facteur d'impact IF>1, Web of Sciences) dont l'analyse est faite ci-dessous. Les publications communes à deux équipes sont mentionnées, les équipes étant numérotées (E1, E2, ..) conformément à l'organigramme donné ci-dessous dans le chapitre consacré à l'organisation de l'unité. Sur les 230 publications de l'unité, environ une quinzaine ne comporte que des membres du laboratoire, les autres publications traduisent des collaborations internationales notamment avec les USA-Europe-Russie (~ 135 papiers dont une quarantaine avec des collaborateurs américains) ou avec les pays du Maghreb (une quinzaine de publications) et enfin des collaborations nationales (surtout avec Paris et Grenoble). Les publications internationales traduisent les liens historiques du GSMA avec Tomsk en spectroscopie moléculaire (cf. le LIA SAMIA) et ses collaborations fortes en planétologie avec l'Université d'Arizona et les centres de la NASA, ou encore son implication dans la banque de données moléculaires HITRAN gérée par Harvard. 70% des 230 publications ont un IF supérieur à 2.

Liste totale des publications sur la période 2011 - juin 2016. Pour rappel, le GSMA sur cette période était composé de 21 EC (le 22^{ème} EC, N. Petrochilos est revenu de plusieurs années de disponibilité dans le privé en sept. 2015) et de 3 CR-CNRS (le 4^{ème} CR-CNRS, D. Cordier, a été affecté en sept. 2015), soit 13.5 ETP recherche, auquel il faut ajouter également les personnels BIATSS\ITA.

	2011	2012	2013	2014	2015	2016*	TOTAL
Journaux internationaux avec comité de lecture référencés (ACL de rang A)	25	44	51	42	45	23*	230

*publications jusqu'au 30 juin 2016

Liste des publications inter-équipes (E1 = PMT, E2 = MSA, E3 = SLA, E4 = RPA, E5 = ECA, E6 = Aéronomie»):

Equipes (numérotation donnée sur l'organigramme du chapitre « organisation de l'unité »)	E1-E2	E1-E5-E6	E1-E6	E3-E6	E3-E5	E4-E6	Total
Nombre de publications communes	22	2	2	7	1	4	38

Facteur d'impact des publications (web of science) du laboratoire. Les revues ayant donné lieu à plus de cinq publications sur la période étudiée sont surlignées. Le laboratoire étant interdisciplinaire (spectroscopie et dynamique moléculaires, environnement et planétologie, instrumentation, chimie), il émerge sur de nombreuses revues scientifiques.

Publications	IF 2015	Nb
Science	34.66	1
Proceedings of the National Academy of Sciences of the United States of America (PNAS)	9.42	2
Journal of Physical Chemistry Letters	8.53	1
Physical Review Letters	7.64	2
Astrophysical Journal	5.90	10
Journal of Experimental Botany	5.67	1
Astrophysical Journal Letters	5.48	1
Scientific Reports	5.22	1
Astronomy & Astrophysics	5.18	1
Atmospheric Chemistry and Physics	5.11	2
Monthly Notices of the Royal Astronomical Society	4.95	1
Sensors and Actuators B	4.75	1
Analytica Chimica Acta	4.71	1
Physical Chemistry Chemical Physics	4.44	3
Geophysical Research Letters	4.21	1
Science of the Total Environment	3.97	1
Journal of Proteomics	3.86	1
Journal of Colloid and Interface Science	3.78	1
Biogeosciences	3.70	1
Chemosphere	3.69	1
Computer Physics Communications	3.63	5
Atmospheric Environment	3.45	6
Icarus	3.38	17
Journal of Geophysical Research	3.31	1
RSC Advances	3.28	2
Journal of food engineering	3.19	3
Journal of Physical Chemistry B	3.18	3

Food Research international	3.18	2
Optics express	3.14	2
PLoS One	3.05	1
Atmospheric Measurement Techniques	2.98	5
Journal of Chemical Physics	2.89	13
Journal of Physical Chemistry A	2.88	7
Experimental Astronomy	2.86	2
Journal of Quantitative Spectroscopy & Radiative Transfer	2.85	40
Journal of Agricultural and Food Chemistry	2.85	4
Physical Review A	2.76	3
Environmental Science and Pollution Research	2.76	1
Spectrochimica Acta Part A-Molecular and Biomolecular Spectroscopy	2.65	2
Pure and Applied Chemistry	2.61	2
Journal of Fluid Mechanics	2.51	1
Journal of Raman Spectroscopy	2.39	3
Journal of Physics Condensed Matter	2.20	1
International Journal of Quantum Chemistry	2.18	1
Philosophical Transaction of the Royal Society of London Series A-Mathematical Physical and Engineering Sciences	2.14	2
Sensors	2.03	1
Planetary and Space Science	1.94	4
Chemical Physics Letters	1.86	8
Molecular Physics	1.83	2
Journal of Physics B-Atomic Molecular and Optical Physics	1.83	1
Research on Chemical Intermediates	1.83	2
Applied Spectroscopy	1.79	1
Applied Physics B-Lasers and Optics	1.78	7
Chemical Physics	1.75	1
International Journal of Electrochemical Science	1.69	7
Journal of Molecular Spectroscopy	1.59	12
Infrared Physics & Technology	1.58	2
Experiments in fluids	1.57	2
Journal of Atmospheric Chemistry	1.55	1
International Journal of Numerical Methods for Heat & Fluid Flow	1.47	1
European Physical Journal –Special Topics	1.41	1
Computational and Theoretical Chemistry	1.40	1
Review of Scientific Instruments	1.33	1
Scientific American	1.13	1
Laser Physics	1.10	1

International Journal of Thermophysics	0.94	3
Advances in Mechanical Engineering	0.64	1
Journal of Visualization	0.72	1
International Journal of Analytical Chemistry	0.71	1
Physics World	0.22	1
Journal of Flow Visualization and Image Processing	---	1
Procedia Engineering	---	1
Advances in Food and Nutrition Research	---	1
TOTAL		230

Profil d'activités

Unité/Équipe	Recherche académique	Interactions avec l'environnement	Appui à la recherche	Formation par la recherche	Total
Ensemble	40	20	15	25	100 %

Etant donnée la petite taille de l'unité, nous avons préféré donner une indication des différents secteurs d'implication pour l'ensemble du laboratoire. Le GSMA étant un laboratoire formé essentiellement d' EC (22 EC pour 4 CR , 12 BIATSS), l'enseignement et les charges associées qui ne figurent pas dans ce tableau représente un investissement en temps très important à l'échelle de l'unité.

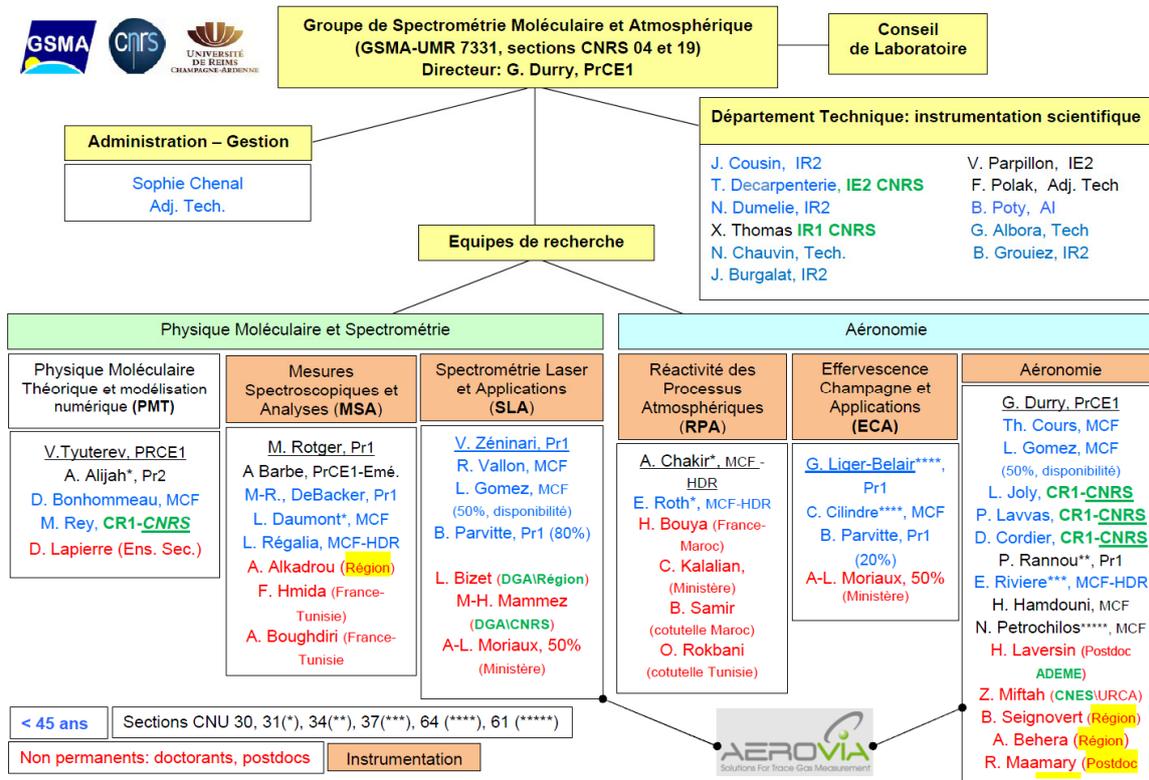
Organisation et vie de l'unité

Le laboratoire est pour le quinquennat en cours constitué des 6 équipes mentionnées précédemment et d'un Département Technique regroupant les 12 ITA et BIATSS du laboratoire. Les développements techniques constituent un point fort de l'unité tant pour la recherche fondamentale que pour les mesures atmosphériques de terrain et il a été décidé dès 2011 de mettre en place un département technique regroupant l'ensemble des forces du laboratoire. Les développements sous ballons stratosphériques ou spatiaux de l'équipe "Aéronomie", sont conduits avec le support de la Division Technique de l'INSU, unité propre de service du CNRS via un appel à projets national.

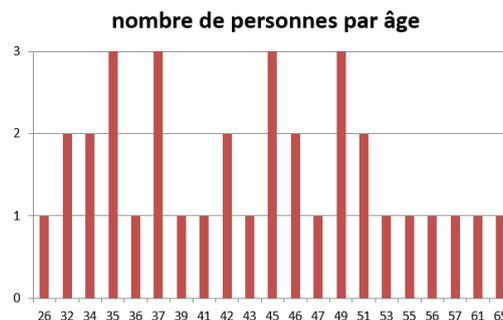
L'unité comporte en décembre 2015 environ 50 personnes:

- 22 enseignant-chercheurs (EC) dont 13 HDR, 9 PR et 1 PR émérite.
- 4 chercheurs CR1-CNRS (2 en section 04, 1 en section 19, 1 en section 17).
- 12 BIATSS et ITA CNRS : 4 IR, 1 IE, 1 AI, 2 Tech, 2 AJT, 1 IR-CNRS, 1 IE-CNRS.
- 12 doctorants et 2 postdocs.

L'un des EC (N. Petrochilos, MCF) est de retour au GSMA depuis septembre 2015 après plusieurs années de disponibilité dans le privé. Le quatrième CR1-CNRS (D. Cordier) a été affecté au GSMA en septembre 2015.



L'examen de la pyramide des âges montre que le laboratoire est jeune, avec une moyenne d'âge proche de 44 ans. La part essentielle des départs en retraite a eu lieu au quadriennal précédent : un seul départ est prévu en PR et un seul en IR (CNRS) au prochain quinquennat. Depuis 2011, les effectifs sont stables. Cependant depuis 2011, il n'y a pas eu de recrutements d'EC : en effet, les effectifs étudiants étant très faibles dans nos disciplines, l'université a pris le parti de ne pas renouveler les postes d'enseignant-chercheurs dans ces filières (départ, promotion) mais d'offrir la possibilité de les convertir en support BIATSS si l'activité de recherche le justifie. Pendant cette période, il s'avérait que le GSMA avait besoin de renforcer son département technique à cause du développement à la fois de ses activités instrumentales mais aussi de ses activités de modélisation (en dynamique moléculaire, modélisation méso-échelle terrestre et en planétologie) : en 2012, le laboratoire a recruté un Tech BAP-C (G. Alhora), puis en 2013 par mutation interne, un IR BAP-C (B. Grouiez) et un Tech BAP-C (N. Chauvin), puis enfin en 2015 un IR BAP-E (J. Burgalat). Si cette politique de recrutement sur la période 2011-2015 a permis de structurer le soutien technique à la recherche, il est clair que cette politique sur le long terme conduira à un affaiblissement du potentiel recherche de l'unité. Il est nécessaire que sur le prochain quinquennat le laboratoire puisse recruter des jeunes enseignants-chercheurs et assurer également des promotions PR à ses personnels méritants.



Le GSMA ne fonctionne quasi exclusivement qu'avec des programmes de recherche nationaux ou internationaux et son potentiel en recherche doit impérativement se maintenir, voir se développer. Conscient de sa difficulté à recruter des EC pendant le quinquennat actuel, Le laboratoire a conduit une politique active de recrutement au CNRS qui s'est traduite par le recrutement de deux chargés de recherche CNRS en 2011 (concours, P. Lavvas) et 2015 (mutation interne, D.Cordier), ce qui est très satisfaisant eu égard à la difficulté du concours et à la petite taille du GSMA. En 2006, le laboratoire ne comptait aucun chercheur CNRS, il en compte quatre aujourd'hui.

En termes budgétaires, les moyens du laboratoire sont stables sur la période étudiée, le laboratoire reçoit un récurrent de l'ordre de 30 k€ du CNRS et de 55k€ de l'Université qui sert au fonctionnement courant de l'unité (azote liquide, impressions, téléphone, fonctionnement-équipement commun essentiellement pour le département technique, quelques missions et moyens informatiques, actions dédiées pour les jeunes chercheurs). L'essentiel des moyens du laboratoire provient de ses nombreux contrats de recherche pluriannuels (listés en annexe et rappelés dans les descriptifs des équipes) ; par comparaison les crédits récurrents représentent environ 20% du budget total annuel de l'unité sur le quinquennat. Le laboratoire a fait preuve de beaucoup de dynamisme au cours de cette période pour obtenir de nombreux contrats et projets de recherche et ce malgré les handicaps de son isolement thématique territorial, de sa petite taille et du nombre très réduit de personnel des organismes de recherche.

Le département technique a été fortement renforcé lors du quinquennat présent avec le recrutement de 5 agents par mutation interne ou recrutement sur concours externe : 2.5 IR, 2 Tech, 0.5 Adj. Tech. Les développements instrumentaux sont une composante très importante de l'activité du laboratoire que ce soit pour les analyses de gaz en laboratoire (laser, spectrométrie par TF, GC-MS) ou pour des mesures de terrain et embarquées sous ballons stratosphériques ou dans le cadre de missions spatiales (spectrométrie laser). L'instrumentation, notamment les mesures de gaz par lasers ou la spectrométrie par TF à haute résolution, contribuent fortement à la visibilité nationale et internationale du laboratoire. Les travaux du GSMA font appel à de nombreuses technique et nécessitent beaucoup de savoir-faire : technique du vide, optique, électronique, mécanique, gestion des gaz... Le laboratoire a beaucoup investi dans les moyens communs nécessaires à ces travaux : remise en conformité des machines-outils de l'atelier de mécanique, maintien de l'atelier d'électronique, logiciels de CAO et optique et mécanique, imprimante 3D ... Parmi les réalisations récentes du Département Technique, on peut noter la mise en œuvre de la nouvelle TF Bruker destinée à remplacer l'ancienne TF de type Connes ou encore la réalisation d'une cuve optique à réflexions multiples cryogénique à triple paroi destinée à l'analyse du méthane dans les conditions des basses températures de Titan.



La nouvelle TF Bruker mise en œuvre pour la mesure de O₃ pour le programme de l'ESA et la cuve optique cryogénique pour l'analyse du méthane dans les conditions de Titan.

Le département a maintenant la capacité de développer entièrement des senseurs laser de terrain, comme par exemple la station de mesure ECOFLUX (spectromètre laser QCL) pour la détermination de flux de N₂O en territoire agricole utilisé notamment en collaboration avec l'INRA ou encore les instruments AMULSES pour le radiosondage laser de CH₄ et CO₂ lancés en collaboration avec Météo-France. Cependant pour les développements plus complexes et proches du spatial qui dépassent les capacités du GSMA, le laboratoire travaille en étroite collaboration avec la Division Technique de l'INSU (SDLA, micro-SDLA, PicoSDLA, TDLAS-Phobos,...). Le Département technique participe aussi aux campagnes ballons internationales (notamment récemment les campagnes « Strato-Science » au Canada en 2014 et 2015).



La station ECOFLUX déployée sur le site de Bures pour la mesure in situ des flux de N₂O et les senseurs laser AMULSE pour le radiosondage de CO₂ et CH₄.

Il y a eu au cours du quinquennat une politique active de valorisation du savoir-faire technique de l'unité de qui s'est traduite par la création et le développement de la start-up Aerovia (www.aerovia.fr) cofondée par 4 chercheurs du GSMA ou l'obtention de contrats industriels (Environnement SA, Coca-Cola, Total, ...) ou de bourses de thèse CIFRE (Bull, Aerovia, négociation avec Total en cours, ...).

Il est à noter également que la modélisation numérique s'est beaucoup développée ces dernières années, tant pour la physique moléculaire théorique que pour les activités de planétologie et de physique de l'atmosphère, modélisation basée soit sur l'utilisation des moyens de calculs du GSMA, sur le supercalculateur régional ROMEO ou sur des supercalculateurs nationaux. Le recrutement d'un ingénieur de recherche en 2015, spécialisé en calcul scientifique (BAP E) a permis de renforcer fortement le soutien apporté aux équipes concernées.

L'unité est dotée d'un Conseil de Laboratoire géré conformément aux règles des UMR CNRS. Sur la période 2011-2014, une AG (ou séminaire d'intégration) a été organisée par an. Le laboratoire a eu de nombreux séminaires internes (doctorants et personnels de l'unité) ainsi que des séminaires de recherche associés aux nombreux professeurs et chercheurs invités dans l'unité.

Sur cette période d'évaluation, le laboratoire s'est également fortement investi dans une politique active d'hygiène et de sécurité à la demande de nos tutelles CNRS et université. Nous avons d'ailleurs bénéficié de crédits spécifiques pour ces actions notamment de la délégation du CNRS. Les points principaux sont les suivants :

- Nomination de 2 nouveaux assistants de prévention en 2013 G. Albora et T Decarpenterie et mise en place d'un Référent Sécurité Laser (RSL) Julien Cousin.
- Refonte du système de stockage de produits chimiques :

- Mise en place d'un suivi des déchets chimiques (évacuation de plus 200 flacons de produits chimiques la première année).
 - Achat de nouvelles armoires de stockages à produits chimiques.
 - Obtention d'un accès à une soute extérieure pour stockage des récipients de grande capacité.
 - Création d'un inventaire des produits chimiques et de classeurs de FDS
 - Demande d'extraction pour les armoires (pas encore réalisée mais relance régulière)
 - Installation en cours d'armoires à bouteilles de gaz dans les salles de chimie (dont fluor, oxygène).
 - Accueil de stagiaires de master (H&S) ayant travaillé principalement sur le domaine des risques chimiques.
- Atelier de mécanique :
- Remise aux normes des machines de l'atelier mécanique.
 - Nouvel agencement des machines pour éviter le chevauchement des postes de travail.
 - Restriction de l'accès aux personnels techniques, chaque machine ayant une fiche utile avec les noms des personnes autorisées à s'en servir.
 - Regroupement des EPI en point unique.
- Stockage :
- Le laboratoire dispose d'une salle où stocker les gaz (sans présence permanente de travailleurs).
 - La salle a été équipée de plusieurs étagères pour charges lourdes permettant un stockage efficace, organisé par équipe.
 - Une cage extérieure a été cédée par le département de chimie pour le stockage des bouteilles de gaz inflammables
 - Une zone a été définie pour entreposer le matériel à évacuer (en panne, vétuste)
 - Un stockage d'emballage est également centralisé.
- Organisation
- Les affichages à l'entrée des salles et des accès ont été remis à jour. Un suivi régulier des équipements a été mis en place (lumière dans les escaliers, éclairages des issues de secours, fonctionnement douche et rince œil,...). Chaque nouvel arrivant suit une visite de sécurité du laboratoire et si nécessaire une sensibilisation aux risques laser (tenue de registres). Visite régulière des salles par les Assistants de Prévention et actions régulières de sensibilisation. Mise en place d'une adresse (prevention.gsma@univ-reims.fr) pour contacter le directeur et les 2 AP. Adresse générique de l'ensemble du laboratoire pour pouvoir « toucher » l'ensemble du personnel en cas d'urgence. Réaménagement de plusieurs postes de travail, en concertation avec les équipes. Préparation de procédures liées à l'activité propre du laboratoire (accès au toit terrasse, utilisation de certaines expérimentations,...). Une mise à jour du DU a été faite. Le règlement intérieur est en train d'être remanié au moment d'écrire ce document à la demande expresse du CNRS (réécriture de règlement interne sur le format du CNRS).

Un très important travail de remise aux normes de notre laboratoire a donc été effectué sur la période 2011-2016 grâce à la forte implication des personnels concernés. Cet effort nous apparaît très nécessaire étant donné la dangerosité de l'expérimentation du laboratoire. Les personnels doivent pouvoir évoluer dans un contexte de sécurité maximale.

En termes de prises de responsabilité aux niveaux national et local, les personnels se sont impliqués dans différentes instances :

- CNU 2012 – 2016 : M. Rotger, L. Régalia, M-R Debacker élues en section 30, Vl. Tyuterev suppléant
- CNU 2016 – 2020 : L. Régalia (section 30), MR. Debacker (section 30), E. Roth (section 31), E. Riviere (section 37)
- CNRS CN - section 19: G. Durry (2008-2012), P. Rannou (2012-2016); G. Durry, Membre élu du Conseil Scientifique de l'Institut de Physique (INP) du CNRS, 2010-2014.
- Conseil Scientifique du programme national Lefe-Chat (CNRS-INSU): M. Rotger, membre depuis 2014
- Depuis septembre 2012, E. Riviere membre du comité d'évaluation CT1 (environnement) du GENCI (grands ensembles nationaux de Calcul intensif, IDRIS, Cines, CEA, ...).
- Membre nommé du Conseil d'Administration du PRES UFECAP (2012-2014), Reims-Amiens : G. Durry
- Vice-Présidence déléguée Valorisation Innovation et Partenariats (2012-2014) : G. Durry
- Conseil d'administration de l'Université de Reims (2012-2016) : G. Durry
- Conseil d'administration de la COMUE « Université de Champagne » (2015-2020) : G. Durry
- Membre nommé du Conseil d'Administration de la SATT "Nord de France Valo" (2012-2014) : G. Durry
- Comité Technique (CT) de l'Université de Reims : V. Zéninari depuis 2014
- Membre élu de la Commission des Moyens de l'URCA : G. Durry depuis 2016

Faits marquants

Un membre du laboratoire, Panayotis LAVVAS, a été distingué par la médaille de bronze du CNRS en 2015, attribuée par la section 19 du comité national du CNRS (INSU) pour la qualité de son travail de recherche sur les aérosols photochimiques de Titan. Par ailleurs, P. Lavvas a été co-auteur de l'article dans Science sur Pluton vu par la mission New Horizons, paru en 2016 ("The atmosphere of Pluto as observed by New Horizons", G.R.Gladstone & al., Science, Vol. 351,2016)

Le laboratoire international SAMIA (LIA –CNRS avec la Russie axé sur la spectroscopie) a été créé en 2015 et le GSMA en est l'un des membres fondateurs. Par ailleurs, en 2016, les collaborations de l'unité avec l'université d'Arizona ont été renforcées par l'obtention d'un PICS « Titan Aerosols & clouds ».

Le laboratoire a réussi à recruter deux CR CNRS (P. Lavvas en 2011 et D. Cordier en 2015) sur la période évaluée.

Un projet CPER cofinancé par la Région et l'Etat a permis l'acquisition en 2013 d'un spectromètre Bruker à très haute résolutions spectrale (~350k€) qui sera l'un des outils clef des futurs travaux de l'unité.

Le laboratoire a eu la responsabilité d'un instrument spatial, le spectromètre TDLAS (Pl. G. Durry), financé par le CNES, dans le cadre de la mission martienne Russe Phobos-Grunt lancée de Baïkonour en novembre 2011. Bien que l'issue de cette mission spatiale ait été malheureuse (désintégration dans la haute atmosphère), des liens collaboratifs très forts ont été établis avec l'Institut de Recherche Spatiale de Moscou et le GSMA, liens particulièrement favorables au développement futur des activités spatiales de l'unité (Exomars-2018, Luna-Resurs, ...).

Sur la période évaluée, l'unité a coordonné de nombreuses ANRs : APOSTIC (ANR blanche), TRO-Pico (ANR-blanche), IDEO (ANR blanche), QUIGARDE (ANR ASTRID) et MIRIADE (ECOTECH). Le laboratoire a aussi, pour la première fois, élargé à un projet de l'ESA en spectroscopie atmosphérique. Le laboratoire a également obtenu un important contrat industriel avec la société Environnement SA via l'ADEME et BPI-France (projet « Ulis »). Au moment d'écrire ce document, un important contrat avec Total (~ 500k€) est en cours de finalisation, au stade de la négociation entre le CNRS et le groupe pétrolier ; les techniques laser de mesure de gaz du GSMA seront utilisées pour des mesures sous drones.

La start-up Aerovia cofondée en 2010 par quatre chercheurs du GSMA (V. Zeninari, B. Parvitte, L. Joly, G. Durry) a connu un événement important en 2013 avec l'arrivée comme actionnaire de la multinationale Schlumberger.

CNRS
dépasser les frontières

Actualité du 14/11/2013

CNRS innovation
Partenariats, création d'entreprises,
brevets, licences, événements...
Retrouvez tous les deux mois les
dernières actualités de la valorisation
et de l'innovation au CNRS.

En savoir +

CNRS innovation toutes les lettres

CNRS innovation

Créations d'entreprise

Schlumberger s'intéresse aux technologies développées par le Groupe de spectroscopie moléculaire et atmosphérique

Le groupe Schlumberger vient d'entrer au capital d'Aerovia. Cette start-up issue du CNRS commercialise et industrialise des technologies développées initialement par le Groupe de spectroscopie moléculaire et atmosphérique (CNRS/Université Reims Champagne-Ardenne) pour des applications environnementales, industrielles, médicales et sécuritaires. Schlumberger, leader mondial des services à destination des industries d'exploration et de production de pétrole et de gaz, établit de la sorte des liens contractuels exclusifs avec Aerovia dans le cadre d'applications produits spécifiques.

Le groupe de spectroscopie moléculaire et atmosphérique est un laboratoire

Après avoir été incubée depuis 2010 au sein du GSMA, Aerovia a quitté les locaux du laboratoire pour s'installer dans son propre bâtiment à proximité du campus. L'entreprise s'est développée et compte aujourd'hui à Reims environ dix salariés ; récemment, Aerovia a embauché en CDI l'un de nos doctorants (Ch. Risser).

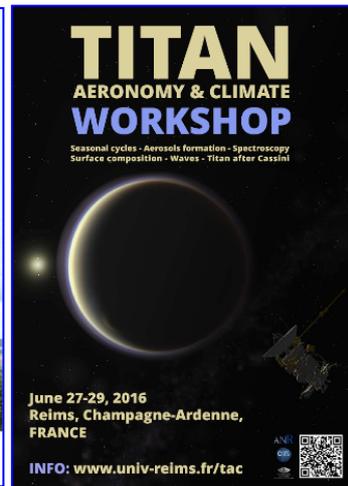
Sur la période, le laboratoire a reçu de nombreux professeurs invités sur des supports Région, CNRS ou des supports de mobilité financés par l'université, pour des durées allant de la semaine à 2-3 mois. Les collaborations avec les USA se sont accrues, notamment avec le JPL (NASA\Caltech) avec le séjour pendant plusieurs mois de R. West et Ch. Sotin. Par exemple, en 2016, Robert A. West, Senior Scientist à la NASA\JPL et chercheur de réputation internationale, a passé quatre mois (mars – juin) au GSMA pour collaborer sur Titan avec l'équipe d'Aéronomie. Par ailleurs, des chercheurs ont séjourné au GSMA en provenance de nombreux pays : Russie (IKI-Moscou, Tomsk), Mexique (CNRS\Conacyt), Vénézuéla, Université d'Arizona (LPL- R. Yelle et C. Griffith), Brésil (programme « *Sciences sans Frontières* »), Université du Missouri (Pr. R. Dawes, financement NSF), Université de Strathclyde (Pr. G. Duxbury, rédaction d'un ouvrage avec A. Alijah), etc. Les détails sont donnés dans le descriptif de l'activité des équipes.

D'un point de vue scientifique, la première caractérisation précise de l'état de transition de l'ozone vers la dissociation, confirmée par les analyses de spectres, a permis de résoudre une controverse débattue dans la littérature depuis 20 ans: c'est le résultat majeur de l'ANR IDEO coordonnée par Vl. Tyuterev qui a fait l'objet d'une publication dans PRL [*“Does the “Reef Structure” at the Ozone Transition State towards the Dissociation Exist? New Insight from Calculations and Ultrasensitive Spectroscopy Experiments”*, Vl. G. Tyuterev & al., *Physical Review Letters*, 113, (2014)]. A noter également que l'équipe ECA a participé à un travail très médiatique autour de l'analyse d'un champagne vieux de 170 ans découvert au fond de la Baltique ; ce travail a donné lieu à une publication dans PNAS [Jeandet P, Heinzmann S, Roullier-Gall C, Cilindre C, Aron A, Deville MA, Moritz F, Karbowiak T, Demarville D, Brun C, Moreau F, Michalke B, Liger-Belair G, & al, « *Chemical messages in 170-year-old champagne bottles from the Baltic Sea: Revealing tastes from the past* », *Proc. Natl. Acad. Sci. USA*, 112, 2015].

Le laboratoire est très impliqué dans la diffusion des connaissances, notamment via l'organisation de conférences grand public à la mairie de Reims, à la médiathèque de la ville ou à la bibliothèque universitaire. Des exemples de conférences sont donnés dans la partie descriptive des activités de l'équipe d'Aéronomie. L'année 2015 a été particulière puisqu'il s'agit de l'année de la lumière combinée à la COP21 sur les thématiques climatiques : la conférence inaugurale de la fête de la science en Champagne-Ardenne a été faite par un membre du laboratoire (G. Durry) ainsi que plusieurs conférences grand public à la demande des collectivités. De façon générale, le laboratoire est très impliqué dans les manifestations grand public : Fête de la science, classe en fac, ... Le détail est donné dans le descriptif des activités des équipes. Les travaux du GSMA ont également été présentés dans la presse locale (journal L'Union) et ont même fait l'objet de reportages sur France 3 Champagne-Ardenne (voir travaux de l'équipe d'Aéronomie). L'équipe ECA, du fait de ses activités dans le Champagne est très active médiatiquement (TF1 en décembre 2013, RFI en mars 2015, France Inter en avril 2015, Europe 1 en mars 2015, ...). A noter également l'ouvrage publié aux éditions du Cherche Midi sur le champagne coécrit par Gérard Liger-Belair (ECA\GSMA), Dominique Demarville, et Michel Onfray en 2015.



Le laboratoire s'est également impliqué dans le montage à Reims de plusieurs congrès et workshops internationaux. « ASA-HITRAN » est un congrès international de spectroscopie organisé tous les deux ans, alternativement à Boston par l'Université d'Harvard et à Reims par le GSMA. Il a eu lieu à Reims en 2012 et en 2016. Le GSMA a également organisé le congrès PAMO-JSM de la Société Française de Physique en 2014 ainsi que le colloque annuel du Groupe Français de Cinétique et Photochimie en 2016. Par ailleurs plusieurs workshops scientifiques internationaux regroupant entre 50 et 70 chercheurs ont été organisés par le GSMA sur cette période: sur la dynamique de l'ozone (2012), sur la tropopause tropicale en 2015 et sur l'atmosphère de Titan en 2016.



2. Réalisations

2.1. Réalisations: équipe PMT

NOM Prénom	Période	Activité
TYUTEREV Vladimir	2011-2016	Responsable d'équipe PRCE1
REY Michaël	2011-2016	CR1-CNRS
BONHOMMEAU David	2011-2016	MC (Chaire CNRS 2011-2014)
ALIJAH Alexander	2011-2016	PR2

Personnels non-permanents de l'équipe

NOM Prénom du doctorant	NOM Prénom du ou des directeurs de thèse	Dates de début et de fin	Type de financement
Lapierre D.	TYUTEREV	2012-	Non financée

L'équipe PMT possède une activité de recherche interdisciplinaire centrée sur l'étude d'états moléculaires hautement excités, les calculs de chimie quantique (ab initio) ainsi que la prédiction de spectres théoriques pour l'analyse, la planétologie, l'astrophysique et la dynamique moléculaire en phase gazeuse et liquide. L'équipe est composée de 3 permanents enseignants-chercheurs) et d'un chargé de recherche CNRS. 4 thèses ont été soutenues et une est actuellement en cours.

Production scientifique de l'équipe PMT

	2011	2012	2013	2014	2015	2016	TOTAL
Journaux internationaux avec comité de lecture référencés (ACL de rang A)	6	16	19	15	21	5	82
Journaux nationaux avec comité de lecture					1		1
Chapitres d'ouvrage					1		1
Communications orales invitées (INV)	1	1	1	4	1		8
Communications internationales avec actes (ACTI)	1				1		2
Communications orales internationales	2	4	2	4	3		11
Communications orales nationales	4	3	5	5	2		14
Communications par affiche	7	12	15	11	22		67

PMT – Axe 1 : Surfaces d'énergie potentielle ab initio (PES), surfaces de moment dipolaire (DMS) et interactions non-adiabatiques (NAD)

La détermination précise de ces surfaces sur un large intervalle de configurations nucléaires est d'une importance fondamentale pour l'interprétation de spectres et la dynamique à différentes conditions. Pour H3+, une PES globale très précise (0.1 cm⁻¹) a été construite. Elle inclut l'énergie « Born-Oppenheimer » ainsi que des corrections adiabatiques, relativistes et d'électrodynamique quantique. Les déplacements non-adiabatiques des niveaux rovibrationnels sont quant à eux décrits

par la méthode des masses finies. Les résultats décrivent les nouvelles données expérimentales à haute résolution (10^{-4} cm $^{-1}$) de J. T. Shy avec une précision de 10^{-3} cm $^{-1}$. Afin de mieux comprendre la réaction non-adiabatique $H + H_2 \rightarrow H + H_2^+$, les termes des interactions NAD entre les quatre premiers états singulets ont été calculés. Le couplage Jahn-Teller non-adiabatique et ses effets sur les états vibroniques du triplet H_3^+ a été également étudié. Ce dernier peut être considéré comme une molécule prototype pour l'étude de l'ozone. L'approche « finite mass » a aussi été utilisée sur les molécules diatomiques H_2 , H_2^+ et LiH , pour lesquelles le calcul des états vibrationnels a été amélioré. Collaborations: P.Szalay, Hongrie ; O.Polyansky, UK; J.Mohallem, Brazil; L.Adamowicz, USA; V. Kokoouline, USA.

Une description fiable de la forme très compliquée de la PES de l'ozone ainsi que des états vibrationnels hautement excités est d'une importance cruciale pour apporter des réponses à des questions de première importance concernant la spectroscopie et la dynamique de l'ozone. Cela reste un défi pour la compréhension de sa dynamique. Une avancée majeure dans les calculs ab initio de la PES de l'ozone a été réalisée en collaboration avec P. Szalay (Budapest) : des calculs de structure électronique poussés ont été entrepris, permettant la détermination des paramètres du modèle « minimum energy path » et menant à une description des états vibrationnels beaucoup plus complète de l'ozone. La comparaison avec les analyses de spectres expérimentaux à haute résolution donne une déviation standard inférieure à 1 cm $^{-1}$ sur les niveaux vibrationnels, ce qui représente une précision ab initio encore jamais atteinte auparavant pour les états jusqu'à 93% de l'énergie de dissociation.

En étroite collaboration avec A. Nikitin (Tomsk, Russie), les PES et DMS, reconnues actuellement comme étant les plus précises, ont été construites pour des molécules hydrocarbonées (méthane (CH_4) et éthylène (C_2H_4)) ainsi que pour la phosphine (PH_3), le silane (SiH_4), le germane (GeH_4) ainsi que la série des CH_3X ($X=F, I, Li, Br, Cl$).

PMT – Axe 2 : Nouveaux outils théoriques pour des prédictions globales, la modélisation / analyse de spectres moléculaires en vibration-rotation et effets isotopiques

L'étape suivante a été le développement d'outils théoriques performants pour la prédiction globale des positions et des intensités de spectres à haute résolution sur une gamme spectrale étendue, et ceci à partir de nos PES et DMS (Axe 1). Un algorithme assez général basé sur la méthode variationnelle a été implémenté afin de résoudre l'équation de Schrödinger stationnaire de molécules semi-rigides, applicable à un groupe de symétrie quelconque. Cette approche est basée sur une technique originale de « compression-réduction » aussi bien pour l'Hamiltonien que pour les fonctions de base. L'avantage majeur de l'approche est la prise en compte de toutes les propriétés de symétrie pour les toupies symétriques et sphériques dans le calcul variationnel au moyen de tenseurs irréductibles. Une procédure systématique permettant de passer de la molécule « mère » vers une de ses variétés isotopiques sans aucun ajustement de paramètres a aussi été développée. Tous ces outils sont implémentés dans notre nouveau code de calcul TENSOR dédié à des prédictions ab initio de spectres synthétiques à haute résolution.

A partir de nos PES et DMS construites pour le méthane et considérées les références dans la littérature, les bandes d'absorption vibrationnelles de $^{12}CH_4$ ont été modélisées à 80 K et 296 K. L'accord avec les données expérimentales jusqu'à 12000 cm $^{-1}$ est alors excellent. Nos prédictions ont permis d'attribuer 108 nouvelles sous-bandes vibrationnelles dans la région 6280-7800 cm $^{-1}$ à partir des spectres enregistrés à Grenoble. Des études similaires ont permis d'effectuer de nouvelles attributions pour $^{13}CH_4$ et $^{12}CH_3D$ (collaborations dans le cadre du LIA SAMIA, ANR CH4@Titan avec JPL NASA). La figure 1 donne une vue d'ensemble de nos prédictions ab initio pour $^{12}C_2H_4$ par rapport aux bandes expérimentales incluses dans HITRAN. Pour la première fois, des prédictions variationnelles de molécules à 6 atomes sont en accord entre 1 et 3% par rapport à l'expérience, en

ce qui concerne les bandes intégrées. D'autre part, nos calculs sont bien plus complets que les bases actuelles et devraient permettre de combler les manques pour différentes applications.

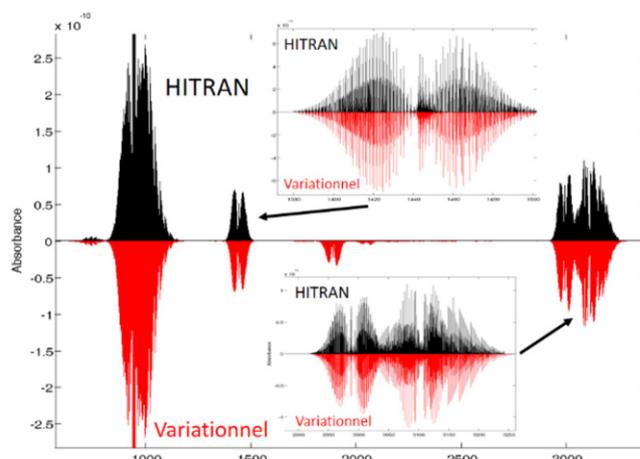


Fig1. *Ab initio* variational predictions (red) and empirical spectra (HITRAN in black) for ethylene [62,76]

Une méthode alternative a aussi été implémentée (code MOL_CT), en collaboration avec S. Tashkun (Tomsk) pour la construction précise de modèles spectroscopiques par polyades à partir de nos PES et DMS. Cela a permis, entre autres, d'attribuer de nouvelles bandes pour les isotopologues de l'ozone enregistrées à Reims (TF) et Grenoble (CRDS) (ANR IDEO en collaboration avec l'équipe MSA, IOA Tomsk, LiPhy Grenoble). Pour le méthane, un modèle «mixte» a été construit, combinant les avantages des calculs *ab initio* (information sur les termes de couplage et intensités) avec une optimisation empirique des positions.

Un autre domaine de recherche concerne les structures électroniques, vibrationnelles et rotationnelles de petites molécules placées dans un champ magnétique externe (collaboration avec A. Turbiner, Mexique).

PMT – Axe 3 : Etats moléculaires de haute énergie proches de la dissociation

Accéder aux états moléculaires hautement excités représente un nouveau challenge pour la théorie et l'expérience dans différents domaines des sciences. Cela tisse un lien très important entre la chimie quantique, la spectroscopie, la dynamique et les propriétés radiatives de milieux à haute température (Axe 2).

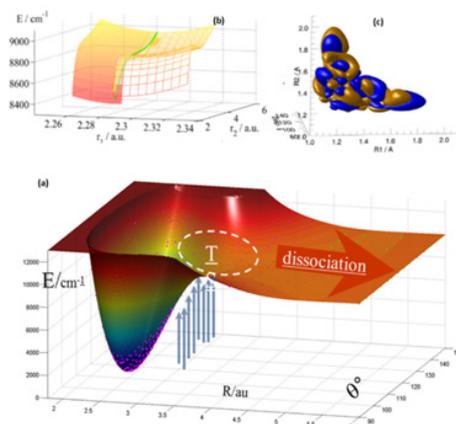


Fig2. Ozone PES, scheme (a) of assigned CRDS experiments (ANR IDEO), two versions of the TS range (b) and the wave-function of the highest detected wavefunction near the dissociation threshold [24,45]

L'ozone dans ses états excités ainsi que les processus liés à la recombinaison de l'ozone restent un puzzle pour la physique moléculaire et la chimie théorique. Depuis la découverte des anomalies dans l'enrichissement de l'ozone isotopique, plusieurs questions fondamentales sur la dynamique, liée à la forme de la PES dans la région de l'état de transition (TS) ont été levées. Le rôle de la structure en « reef » sur le « minimum energy path » est une question intrigante longuement débattue dans le contexte d'expériences chimiques. La conséquence directe de l'hypothétique « reef » est que les constantes de vitesse calculées à partir d'anciennes PES sont 3-5 fois plus faibles que celles mesurées et ont une mauvaise dépendance en température (R Schinke et al. 1996). L'analyse des états moléculaires hautement excités de l'ozone de ses isotopes proches de la dissociation (ANR IDEO) a fourni les clés pour valider la nouvelle PES et en particulier la forme de TS. L'impact de la forme de la PES proche de TS sur les niveaux vibrationnels a été étudié pour la première fois. Les analyses de 20000 transitions rovibrationnelles des 6 variétés isotopiques de l'ozone ont mis en évidence de nombreuses irrégularités, confirmant ainsi le rôle majeur des résonances dans la dynamique de l'ozone excité. La comparaison de nos prédictions théoriques avec des expériences CRDS ultra sensibles (Grenoble) analysées avec l'équipe MSA du GSMA suggère l'absence de barrière dans la voie de dissociation de l'ozone. Cela a permis de résoudre le problème controversé (existence ou non du reef) discuté dans la littérature depuis 20 ans.

D'autres applications concernent les propriétés d'émission/absorption de gaz chauds. A partir de notre PES et des nouvelles méthodes théoriques (Axe 2), nous avons pu inclure des états rovibrationnels approchant la limite de la dissociation pour le calcul de la fonction de partition $Q(T)$ du méthane jusqu'à 3000K. Tous les calculs précédents se sont avérés soit pas assez précis ou bien pas assez complets ; la fonction $Q(T)$ étant nécessaire pour caractériser les propriétés thermodynamiques, la combustion ou pour les applications astrophysiques.

PMT – Axe 4 : Bases de données spectroscopiques. Nouvelles listes théoriques pour des applications planétologiques et astrophysiques à des températures extrêmes (T=80-2000 K)

Nous avons contribué aux bases de données spectroscopiques pour des espèces atmosphériques (HITRAN-2013, Harvard USA). Le système web « Spectroscopy and Molecular Properties of Ozone » (S&MPO), conjointement développé par le GSMA et l'IOA Tomsk et contenant de nouvelles données, de nouvelles prédictions et des outils graphiques perfectionnés pour la simulation/comparaison de spectres.

Dans le cadre du LIA SAMIA, nous avons construit de nouvelles listes de raies qui peuvent servir de passerelle entre les bases spectroscopiques « froides » comme HITRAN et les spectres expérimentaux d'émission/absorption « chauds » encore non attribués à cause de leur extrême complexité. Les molécules ciblées sont les petits hydrocarbures (CH_4 , C_2H_4), PH_3 , SiH_4 , GeH_4 , les CH_3X et toutes leurs variétés isotopiques. La distribution de ces listes vers la communauté scientifique se fera *via* le nouveau système informatique « TheoReTS » de Reims-Tomsk. Parmi tous les hydrocarbures, le méthane est le principal absorbeur dans le proche infrarouge et joue donc un rôle central dans le transfert radiatif et la physico-chimie de divers objets astrophysiques avec des températures effectives pouvant aller de 80 K (planètes géantes, Titan) jusqu'à environ 3000 K (exoplanètes, naines brunes). La connaissance des intensités des transitions rovibrationnelles du méthane sur une large gamme spectrale est alors essentielle pour la modélisation de diverses atmosphères planétaires, étoiles froides et d'autres objets astrophysiques.

Notre travail a fourni pour la première fois une base théorique globale de spectres du méthane jusqu'à $T=2000$ K et contenant pas moins de 11.5 milliards de raies. Les comparaisons avec les données de laboratoire à 1000 K (Bernath et al. 2015) ont montré que nos prédictions étaient les

plus à même de reproduire les données observées. Récemment, nous avons étendu la gamme spectrale jusqu'à $1 \mu\text{m}$ et perfectionné nos calculs pour les hautes températures et/ou énergies. Pour cela, des études théoriques précises sur la convergence et la contribution de chaque bande chaude ont été entrepris. Les spectres chauds de la phosphine ont aussi construits jusqu'à 7000 cm^{-1} et $T=1500 \text{ K}$. La construction de listes théoriques pour l'éthylène chaud est actuellement en cours.

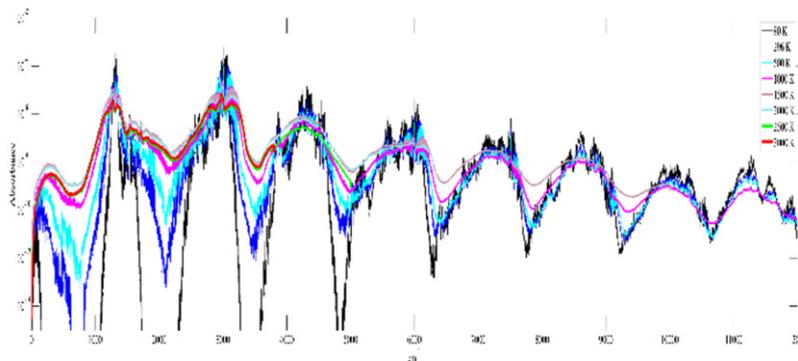


Fig 3. *Ab initio* variational predictions of methane opacity up to $T=2500 \text{ K}$ for astrophysical applications [49, 76]

PMT – Axe 5 : Stabilité d'agrégats multichargés en relation avec les expériences d'ionisation par électronébulisation

L'ionisation par électronébulisation (ESI en anglais) est une technique très répandue pour produire des gouttelettes chargées, que ce soit pour étudier des processus hétérogènes en physique atmosphérique ou pour caractériser des ensembles macromoléculaires en protéomique. Le « cycle de vie » de telles gouttelettes, depuis leur formation au bout de la source electrospray jusqu'à leur fragmentation et la détection des analytes par spectrométrie de masse, pose de nombreuses questions quant à leur structure (les charges se trouvent-elles à l'intérieur ou à la périphérie des gouttelettes ?), leurs conditions de stabilité (comment définir correctement la charge de Rayleigh de tels systèmes ?), et leurs mécanismes de fragmentation (Le modèle du résidu de charge (CRM en anglais), qui prédit des fissions successives des gouttelettes, convient-il ?).

Pour traiter ces questions, nous avons développé un programme de Monte Carlo (MC) classique parallèle, permettant notamment des calculs de « parallel tempering » et un programme de dynamique moléculaire. Dans ces codes, les gouttelettes sont modélisées comme des agrégats de Lennard-Jones composés de particules neutres et chargées, ces particules pouvant être vues comme des « grains » dans une représentation gros grain.

Les simulations MC dans l'ensemble *NVT* ont permis de prouver, dans des agrégats chargés de petite taille ($55 \leq N \leq 1169$), que l'excès de charge porté par les gouttelettes pouvait être localisé à leur surface même si la plupart des porteurs de charges se trouvaient en leur sein. Ce résultat permet de tempérer l'hypothèse commune selon laquelle les porteurs de charges devraient se trouver à la surface des gouttelettes dans les expériences d'ESI. En revanche, les simulations *NVT* ne sont pas très bien adaptées à l'évaluation de la charge de Rayleigh des agrégats composés de plus de ~ 309 particules car l'énergie potentielle de l'agrégat fragmenté décroît quand le volume de la boîte de simulation augmente. Des simulations dans l'ensemble *NPT* ont récemment été entreprises et sont une alternative prometteuse aux simulations dans l'ensemble *NVT* bien que la charge de Rayleigh obtenue pour des agrégats composés de 309 particules chargées dans l'ensemble *NPT* ne soit pas significativement différente de celle prédite dans l'ensemble *NVT*.

En ce qui concerne la dynamique moléculaire, un mécanisme de fission a été observé pour des agrégats avec 309 particules, ces particules étant toutes chargées. Néanmoins, un seul cycle de

fission a été observé (pas de fissions successives comme préconisé par le modèle CRM) et ces travaux doivent être étendus aux agrégats de plus grandes tailles ($N = 1000$ au moins) avant de tirer une quelconque conclusion. En particulier, les spectres de masse et les moments multipolaires de ces agrégats sont en cours d'analyse et devraient permettre de trouver un critère pour séparer le processus de fission des gouttelettes de la simple évaporation de particules (notamment d'origine thermique) afin d'avoir ainsi un aperçu plus fin des mécanismes de fragmentation mis en jeu.

Rayonnement et attractivité académiques de l'équipe PMT

L'équipe participe aux réseaux GDR CNRS "ThéMS : Dynamique quantique dans les systèmes moléculaires : théorie, modélisation, simulation" et « SpecMo : Spectroscopie Moléculaire » (M.Rey a été responsable du site web 2011-2014) et "EMIE : Edifices Moléculaires Isolés et Environnés" (D. Bonhommeau).

Elle a été porteuse des projets nationaux et internationaux (PI : V.Tyuterev) : projet ANR « Isotopic and Dynamic Effects in Excited Ozone », projet « Support spectroscopique pour l'étude de la dissociation / formation et des propriétés non-LTE de l'ozone » dans le cadre du Programme LEFF-CHAT de l'INSU du CNRS, section « Océan-Atmosphère », projet Franco-Hongrois PHC "Electronic structure calculations for BO breakdown in molecules with high nuclear permutational symmetry" du programme Balaton, projet « Exploration du système de bandes inconnues du méthane isotopique dans la fenêtre de 2 microns pour l'interprétation des données des missions spatiales » dans le cadre du PNP, Programme National de la Planétologie du CNRS.

A.Alijah est coordinateur au niveau national de projets Franco-Braziliens "Isotopic and non-adiabatic effects in small molecules" du programme "Sciences sans Frontière" et du projet Franco-Mexicain "Exact calculations for small molecules in external magnetic fields".

L'équipe est responsable au niveau de l'URCA du LIA Franco-Russe « Spectroscopie d'Absorption de Molécules d'Intérêt Atmosphériques et planétologique » (SAMIA), ainsi que du contrat Européen «VAMDC : Virtual Atomic and Molecular Data Centre » et du projet ANR « Étude exhaustive de l'absorption du méthane dans l'atmosphère de Titan par le calcul et l'expérimentation ».

Les chercheurs de l'équipe ont présentés des «invited talks» à plusieurs colloques, y compris les conférences plénières à l'Université de Harvard (M.Rey) et à HRMS, le plus important Colloque Européen de spectroscopie (V.Tyuterev).

Le coordinateur de l'équipe a été Président du Comité du Programme du workshop International "Spectroscopy and Dynamics of Ozone and Related Atmospheric Species" Reims (2011, 2013) et membre des comités de conférences internationales "HighRus" , « HITRAN», "Spectroscopy of methane and planetary applications".

Ces cinq dernières années, nous avons reçu plus de 20 visites de chercheurs invités de l'USA, Russie, Mexique, Brésil, Hongrie, Angleterre ... pour une durée totale de plus de 3 ans.

- les listes des contrats institutionnels sur financements publics et caritatifs (ARC, ANR, contrats européens, etc.)

Nom du projet	Dates début-fin	Type d'AAP	Financement (Total/Unité)	Partenaires
CH4@Titan	2009-2012	ANR blanc	565000 E / 175000	Meudon, Dijon, Grenoble
IDEO (coord. GSMA)	2009-2014	ANR blanc	460000 E / 186 000 E	Grenoble, Paris

ozone	2009-2011	LEFE CHAT CNRS	30000 E / 15000 E	Grenoble
VAMDC	2009-2012	Contrat européen INFRA-2008-1.2.2	2900000 E/ 96000 E	Obs.Paris + 20 partenaires
SAMIA	2009-2012	GDRI France- Russie-Chine	Frais de voyages 40000 E / 12000 E	Grenoble, Dijon, Paris, Tomsk, Moscou, Shangai
Ab initio	2012-2013	Balaton PHC Franco-Hongrois N° 27867WJ	Frais de voyages 5000 E / 2500 E	Budapest
SAMIA	2015-2018	LIA Franco-Russe	60000 E/ 13000 E par an	Grenoble, Dijon, Paris, Besançon, Acad.Sci.Russie
Methane in 2 micron window	2014	PNP CNRS	4500 E / 4000 E	Observatoire Paris
CONACyT	2014	Bilatéral Franco- Mexicain	Frais de voyages 3830 E / 1900 E	Mexico
"Isotopic and non- adiabatic effects »	2014-2017	Bilatéral Franco- Brésilien « Sciences sans frontières »	60000 E/ 30000 E	Brésil

Implication dans la formation par la recherche-PMT

Le coordinateur de l'équipe (V.Tyuterev) a été élu membre titulaire du Conseil de l'Ecole Doctorale de l'Université (2010-2013). D. Bonhommeau intervient dans le cadre de deux Formations (2*3h) de l'Ecole Doctorale STS (Sciences Technologie Santé) proposées par le plateau technique P3M (Plateforme de Modélisation Moléculaire Multi-échelle) depuis 2014-2016 : "Introduction à Linux" et "Introduction à LaTeX".

Quatre thèses de doctorat ont été soutenues, dont deux en cotutelles internationales.

Durant une semaine, nous avons encadré la formation de cinq étudiants américains (niveau M2 et Doctorat) de l'Université de Missouri, équipe de Prof. R.Dawes. Ceci a été fait dans le cadre du soutien spécifique de la « National Science Foundation USA » pour collaborer avec notre équipe à l'Université de Reims : première session en novembre 2014, deuxième session prévue fin 2015 /2016.

Stages de M1 NOA encadrés dans l'équipe PMT sur la période :

NOM Prénom du doctorant	Dates de début et de fin	Sujet
Viglaska Dominica	Avril-Mai 2015	Symétrie en physique
Méaux Cédric	Avril-Mai 2015	Rôle de la spectroscopie en astrophysique

Thèses encadrées et en cours sur la période :

NOM Prénom du doctorant	NOM Prénom du ou des directeurs de thèse	Dates de début et de fin	Type de financement
KOCHANOV Roman	TYUTEREV / TASHKUN	2010-2013	Co-tutelle internationale
DELAHAYE Thibault	TYUTEREV / REY	2011-2014	Ministère
DINIZ Leonardo	ALIJAH	2011-2014	Brésil
LAPIERRE David	TYUTEREV	2012-	Non financée
PERRET Alexandre	ALIJAH / LIGER-BELAIR	2012-2014	Cifre URCA-BULL

Postdocs et CDD IR\IE sur la période

NOM Prénom Ingénieurs	NOM Prénom du responsable de projet	Dates de début et de fin	Type de financement
STARIKOVA Eugeniya (IR)	BARBE / TYUTEREV	2011-2012	ANR IDEO
NIKITIN Andrey (IR)	TYUTEREV	2010-2011	ANR CH4@Titan
BABIKOV Yuri (IR)	TYUTEREV	2011-2012	VAMDC (Europe)
BA Y.Awa (IE)	ROTGER / BONHOMMEAU	2011	VAMDC (Europe)

2.2. Réalisations: équipe MSA

NOM Prénom	Période	Activité
REGALIA Laurence	2011-2016	MC HDR HC
DAUMONT Ludovic	2011-2016	MC
DE BACKER Marie-Renée	2011-2016	PR1
BARBE Alain	2011-2016	PR EMERITE
ROTGER Maud	2011-2016	Responsable Equipe, PR2

L'équipe a perdu un poste de maître de conférences avec le départ en retraite de M.T. Bourgeois.

Personnels non-permanents de l'équipe

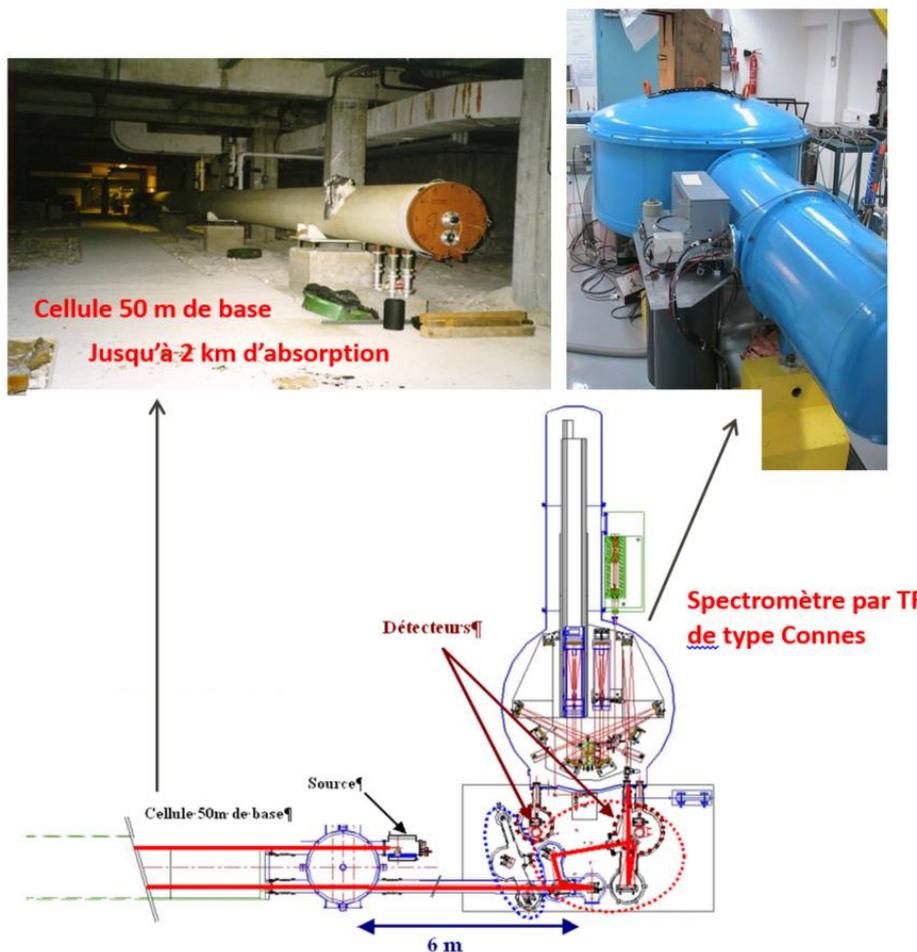
NOM Prénom du doctorant	NOM Prénom du ou des directeurs de thèse	Dates de début et de fin	Type de financement
ALKADROU Abdulsamee	M. Roger\ MR. Debacker	2013-	Région
HMIDA Fadoua	M. Rotger\H. AROUI	2014-	Co-tutelle
BOUGHDIRI Arwa	M. Rotger\H. AROUI	2015-	Co-Tutelle

Production scientifique – MSA

	2011	2012	2013	2014	2015	2016	TOTAL
Journaux internationaux avec comité de lecture référencés (ACL de rang A)	5	5	13	10	3	4	40
Brevets							
Journaux nationaux avec comité de lecture							
Chapitres d'ouvrage							
Communications orales invitées (INV)		1	1				2
Communications internationales avec actes (ACTI)							
Communications orales internationales	4	3	4	4	2		17
Communications orales nationales		1		1	1		3
Communications par affiche	14	19	6	17	13		69

L'équipe SMA (Spectroscopie Moléculaire et Applications) a su montrer depuis de nombreuses années son expertise à la fois expérimentale et d'analyses de spectres de molécules d'intérêt atmosphérique et planétologique. Elle a poursuivi ce travail au cours du dernier contrat en répondant à de nombreux appels d'offre (PNP, LEFE-CHAT, ANR). De plus, début 2014, nous avons fait l'acquisition d'un nouveau spectromètre par Transformée de Fourier commercial de type BRUKER (IFS 125HR) équipé pour fonctionner du domaine UV au domaine IR, ce qui nous ouvre de nouvelles possibilités d'étude et nous a permis de répondre à de nouveaux appels d'offre de nature européenne (ESA) et industrielle (ADEME).

Les principales molécules étudiées au sein de l'équipe sont : l'eau, le méthane, l'ozone et l'éthylène.



LA MOLÉCULE D’EAU :

Les études sur cette molécule ont été depuis de nombreuses années financées par le programme LEFE-CHAT, elles concernent différents domaines spectraux en fonction des applications visées.

De nouvelles mesures d'intensité pour les isotopologues $H_2^{18}O$ et $HD^{18}O$ ont été obtenues dans le domaine spectral $1000-2300\text{ cm}^{-1}$, faisant suite au travail des mesures des intensités de raies entamé sur l'isotopologue principal autour de $10\text{ }\mu\text{m}$, région importante pour les exploitations des données satellitaires IASI.

Nous avons également continué les mesures sur le spectre de la vapeur d'eau avec de très long parcours par une étude sur $HD^{16}O$ à $1\text{ }\mu\text{m}$ et la même région pour $D_2^{16}O$ est toujours en cours d'étude.

Autour de $1.25\text{ }\mu\text{m}$, il était apparu à plusieurs reprises que les intensités de raies dans la région spectrale au-delà de 8000 cm^{-1} n'étaient pas cohérentes dans la version 2008 de la base de données de HITRAN. De nouvelles mesures ont donc été réalisées au GSMA grâce à l'enregistrement de nouveaux spectres en abondance naturelle et à température ambiante à l'aide de notre spectromètre TF pas à pas. A la suite de ce travail, les mesures d'intensité publiées dans l'article (Oudot *et al.*, J. Mol. Spectrosc., 2010), ont été incluses dans la nouvelle version de la base de données HITRAN (2012) pour les raies les plus intenses de l'isotopologue principal. Grâce à la connexion du spectromètre à la cellule de White de 50 mètres de base (voir illustration ci-dessus), de nouvelles mesures des paramètres de raies pour l'isotopologue principal et également pour $H_2^{18}O$, $H_2^{17}O$ et HDO sur tout le domaine allant de $6400\text{ à }9450\text{ cm}^{-1}$ ont été obtenues. Un article résumant ce travail et proposant une nouvelle liste expérimentale de paramètres de raies a été publié récemment (Régalia, JQSRT 2014)

Toutes ces études ont été réalisées en collaboration avec notre collègue Semen Mikhailenko de l'IAO de Tomsk. L'ensemble des mesures et des analyses menées sur la vapeur d'eau nous a permis d'intégrer le

projet IUPAC piloté par J. Tennyson : « A database of water transitions from experiment and theory » et ce travail a donné lieu à plusieurs publications sur les niveaux d'énergies et les nombres d'onde pour $\text{H}_2^{16}\text{O}, \text{D}_2\text{O}$, sur les intensités de raies et sur une recommandation de profils de raies à utiliser pour les prochaines bases de données.

Actuellement, le travail se poursuit dans la région de 6400 à 9450 cm^{-1} , avec de nouveaux spectres enregistrés de H_2O enrichi en ^{18}O avec des parcours d'absorption allant jusque 1,2 km. Une étude complète des paramètres de raies est en cours pour l'ensemble des isotopologues présents dans les enregistrements.

LA MOLÉCULE DE MÉTHANE :

Le méthane reste sans doute la molécule la plus étudiée au niveau international tant ses applications atmosphériques et planétologiques (planètes et exoplanètes) sont nombreuses. Notre travail s'est inscrit dans l'ANR CH4@Titan portant sur l'étude du méthane sur Titan. Pour cela, nous avons enregistré et analysé (relation avec l'équipe théorie et l'IAO de Toms) le spectre du méthane avec de longs parcours d'absorption pour les applications d'inversion des spectres de l'atmosphère de Titan. Ces travaux ont donné lieu à plusieurs publications et ces données ont été intégrées dans la nouvelle version de la base de données HITRAN2012. Nous avons également intégré le réseau VAMDC afin d'améliorer la visibilité des données. Dans le cadre de cette ANR CH4@Titan, une cellule de type white (2 m de de base) a été réalisée et son refroidissement aux environs de 100 K (température de l'atmosphère de Titan) est en cours de finalisation.

LA MOLECULE D'OZONE :

Depuis bientôt 40 ans, le laboratoire a fait de l'étude de la molécule d'ozone et de ses isotopes l'une de ses spécificités.

Durant la période 2011-2015, dans le cadre de l'ANR Isotopic and Dynamic effects in Excited Ozone (IDEO – 01/09/09 – 28/02/14), nous avons concentré nos travaux sur les études des 6 formes isotopiques de l'ozone composées de ^{18}O et ^{16}O ($^{16}\text{O}_3$, $^{16}\text{O}^{16}\text{O}^{18}\text{O}$, $^{16}\text{O}^{18}\text{O}^{16}\text{O}$, $^{18}\text{O}^{18}\text{O}^{16}\text{O}$, $^{18}\text{O}^{16}\text{O}^{18}\text{O}$ et $^{18}\text{O}_3$). Puisque nous cherchions à atteindre des états excités, les spectres infrarouges ont été enregistrés avec le spectromètre TF de Reims (900 – 6000 cm^{-1}) et les spectres proches infrarouges ont été enregistrés à Grenoble, LIPhy, en utilisant la technique laser CRDS extrêmement sensible (6000 – 8000 cm^{-1}). Toutes les analyses des spectres ont été effectuées à Reims par les permanents de la thématique « Mesures Spectroscopiques et Analyses ». Au total, ce sont plus de 20000 transitions rovibrationnelles qui ont été observées, attribuées et modélisées jusqu'à près de 95% de l'énergie de dissociation de la molécule d'ozone. L'ensemble de ces résultats a donné lieu à 12 publications. Les analyses très complexes de l'ensemble des spectres ont été rendues possibles grâce aux prédictions théoriques obtenues par V. G. Tyuterev à partir d'une nouvelle surface de potentiel construite de façon *ab initio* via l'étude approfondie de la structure électronique de l'ozone (voir thématique « Physique Moléculaire Théorique »).

Par ailleurs, les intensités absolues de l'ozone $^{16}\text{O}_3$ ont été mesurées dans les régions de 5 et 10 μm . Ces études ont été financées par 2 contrats LEFE-CHAT (2013-14 et 2015) et par un contrat ESA (en cours 2014 - 2016). Ces régions sont d'un intérêt capital pour les mesures satellitaires qui permettent la surveillance de l'évolution de la couche d'ozone. Les données spectroscopiques obtenues par différents laboratoires présentent parfois des inconsistances qui posent problème. Les mesures ont été effectuées en utilisant le spectromètre TF de Reims. Les 2 cellules croisées utilisées permettent de mesurer simultanément les faisceaux IR et UV, la mesure UV suivant en temps réel la quantité d'ozone dans la cuve. Les résultats de ces études sont en cours de finalisation et de publication.

Il est important de noter ici que l'équipe est le PI français depuis plusieurs 1983 de l'instrument spectromètre DOBSON basé à l'Observatoire de Haute Provence. En collaboration avec R. Evans (NOA, Boulder) et K. Miyagawa (Aerological Observatory, Tokyo), l'instrument a été totalement modernisé d'un point de vue électronique et informatique en mai 2014 grâce à un financement INSU.

L'instrument mesure quotidiennement des colonnes totales d'ozone et des profils de concentration. Ces mesures font partie du réseau NDACC (Network for Detection of Atmospheric and Climate Change). Ces données sont d'une très grande importance pour les physiciens de l'atmosphère via des comparaisons avec d'autres types d'instruments basés au sol, ballons-sondes et satellites.

LA MOLECULE D'ETHYLENE :

La spectroscopie de l'éthylène présente un intérêt majeur à 10 μm pour la planétologie des planètes géantes. C'est une molécule dont la structure vibrationnelle devient rapidement complexe si nous montons en énergie (donc pour le proche IR et l'IR moyen). Notre étude sur cette molécule ces dernières années a abouti à une liste de raies calculées en position et en intensité dans cette région où se trouvent quatre bandes vibrationnelles en interaction. Cet article a été soumis au JQSRT. Ce travail se fait en collaboration étroite avec J. Vander Auwera (ULB, Bruxelles) et V. Boudon (LICB, Dijon). La thèse de A. Alkadrou a porté en grande partie sur cette étude.

D'autre part, nous avons complété l'étude de cette molécule par des analyses de bandes Raman (en collaboration avec D. Bermejo, Madrid) ainsi que par l'étude des bandes d'absorption infrarouge de l'isotopologue $^{13}\text{C}_2\text{H}_4$ dans la région à 10 μm . Cette région a été enregistrée sur la ligne AILES de SOLEIL (en collaboration avec P. Roy et L. Manceron).

Ces analyses récentes nous ont permis de créer une base de données dans le cadre du projet européen VAMDC en collaboration avec Dijon.

Nouvel achat du spectromètre BRUKER :

Nous avons bénéficié en 2013 d'un financement européen et régional pour l'achat d'un nouveau spectromètre par transformée de Fourier (BRUKER IFS 125 HR) couvrant une gamme spectrale de l'IR à l'UV (700 à 44000 cm^{-1}). Il possède une différence de marche maximale de 3,7 m (résolution spectrale de 0.0024 cm^{-1}) et fonctionne en émission sans compartiment échantillon. Nous l'avons équipé pour les travaux dans l'UV d'une lampe Xénon fibrée ainsi que de LEDs qui fournissent des émissions stables. Nous avons grâce à cela pu répondre à l'appel d'offre ESA pour les mesures de section efficaces UV de SO_2 et O_3 . Nous avons également pu répondre à une ANR-Eco-Industrie avec le projet ULIS en commun avec Environnement-SA sur la spectroscopie IR de différents gaz avec une partie modélisation de matrices gazeuses et une partie caractérisation de matériel optique.

Rayonnement et attractivité académiques – MSA

L'équipe fait partie du GDR SpecMo qui regroupe toutes les équipes travaillant dans le domaine de la spectroscopie en France. M. Rotger fait partie du comité scientifique du LEFE-CHAT de l'INSU et y coordonne les activités liées à la spectroscopie. Nous faisons aussi partie du LIA SAMIA dans le cadre d'échanges franco-russes. M.-R. De Backer est membre du CS de PAMO et membre du CA de la SFP. M. Rotger est membre du CS du comité JSM et a été ainsi que M.-R. De Backer à plusieurs reprises experts AERES aussi bien pour les unités que pour les formations.

Projet « *Spectroscopie de l'eau pour les inversions atmosphériques* » financé par le programme national LEFE-ChAT (les Enveloppes Fluides et Environnement – Chimie Atmosphérique) 2011-2013, PI L. Régalia. Il impliquait trois autres laboratoires le LIPhy (Laboratoire Interdisciplinaire de Physique) à Grenoble, le LISA (Laboratoire Interuniversitaire des Systèmes Atmosphériques) à Créteil, l'IPR (Institut de physique de Rennes).

L'équipe a reçu un chercheur vénézuélien (M. Loroño) et un chercheur belge (J. Vander Auwera). Récemment, nous avons développé une collaboration avec le Pr H. Aroui de l'Université de Tunis (2 thèses en cotutelle en cours, F. Hmida et A. Boughdiri).

L'équipe est impliquée dans l'organisation tous les quatre ans du congrès international ASA-HITRAN à Reims (2012 avec 120 participants et du 24 au 26 Août 2016, chair : M. Rotger). Nous avons également organisé le colloque PAMO/JSM en 2014 avec environ 200 participants (Chair : M.-R. De Backer). Nous avons aussi organisé deux workshops sur l'ozone avec V. Tyuterev de l'équipe PMT en 2011 et 2013. Il y a trois membres (L. Régalia, M.-R. De Backer et M. Rotger) de l'équipe qui ont été élues au CNU pendant les quatre dernières années. Pour deux d'entre elles (M-R De Backer et L. Régalia) elles viennent d'être réélues pour un nouveau mandat de 4 ans.

- les listes des contrats institutionnels sur financements publics et caritatifs (ARC, ANR, contrats européens, etc.)
 - contrats institutionnels sur financement public (par équipe ou par thème) ;

International

Nom du projet	Dates de début et de fin	Type d'AAP	Financement (Total/Unité)	Partenaires
SEOM- IAS Scientific Exploitation of Operational Missions- Improved Atmospheric Spectroscopy Databases	2014-2016	ESA	440 000 / 77 000	DLR, LISA, LIPhy, KIT
VAMDC	2009-2012	Contrat européen INFRA-2008-1.2.2	2 900 000 / 9 600	Obs. Paris + 20 partenaires
SMAE (Spectroscopie Moléculaire Appliquée à l'Environnement)	2014-2016	FEDER /PRESAGE	322 950 /161 475	GSMA

National

Nom du projet	Dates de début et de fin	Type d'AAP	Financement (Total/Unité)	Partenaires
ULIS		ANR-ECO Industrie	230 850 / 127 170	Environnement SA Ondalys CNRS (GSMA)
CH4@ Titan	2009-2014	ANR	565 000 / 175 000	LESIA, LICB, LIPhy
SMAE (Spectroscopie Moléculaire Appliquée à l'Environnement)	2014-2016	Etat (DRRT)	322 950 / 82 146	GSMA
SO ₂ F ₂	2011-2013	LEFE-ChAt	6 000 / 4 000	GSMA, LICB
O ₃	2014-2015	LEFE-ChAt	10 000 / 10 000	GSMA, LPMAA
H ₂ O	2011-2013	LEFE-ChAt	40 000	GSMA, LIPhy, IPR, LISA
IDEO	2009-2014	ANR	460 000 / 186 000	GSMA, LIPhy, LESIA
FRIPON	2014-2017	ANR	0	MHN + 20 partenaires

Jouvence DOBSON	2013-2014	INSU	37 000 / 37 000	GSMA
-----------------	-----------	------	-----------------	------

Régional

Nom du projet	Dates de début et de fin	Type d'AAP	Financement (Total/Unité)	Partenaires
SMAE (Spectroscopie Moléculaire Appliquée à l'Environnement)	2014-2016	Conseil Régional	322 950 / 79 329	GSMA

- collaborations académiques internationales ou nationales non contractuelles

Groupe du Pr. H. Aroui, Ecole d'Ingénieurs (Tunisie)
 Groupe du Pr. M. Herman, Université Libre de Bruxelles (Belgique)
 Pr. D. Bermejo, Université de Madrid (Espagne)
 Dr. M. Loroño, Universidad de Oriente, Sucre (Vénézuéla)
 Dr. Semen Mikhailenko et Dr E. Starikova, IAO-LTS, Tomsk (Russie)

Groupe de V. Boudon, Université de Bourgogne, Dijon
 H. Tran, J-M Hartmann, LISA, Créteil
 A. Campargue, D. Mondelain, S. Kassi, LIPHY, Grenoble
 R. Georges, IPR, Rennes
 Dr. C. Janssen, LERMA, UPMC, Paris

Interactions avec l'environnement social, économique et culturel -MSA

L. Daumont participe aux forums de métiers dans un collège (Mourmelon Le Grand).
 Depuis une dizaine d'année, L. Régalia participe à une manifestation appelée « Classes en fac », à travers une journée annuelle en lien avec l'ASTEP (Accompagnement Scientifique et Technologie à l'Ecole Primaire). A cette occasion sur le campus de l'UFR SEN, sont reçus chaque année plus de 1000 élèves de la maternelle à l'élémentaire.

L. Régalia, M.-R. De Backer et M. Rotger participent aux journées Portes Ouvertes de l'IUT et de l'UFR SEN ainsi qu'au Forum Avenir Etudiants (FAE).

Implication dans la formation par la recherche-MSA

L'équipe a engagé une collaboration internationale avec le Pr. Hassen AROUI de l'Université de Tunis. Cela s'est concrétisé jusqu'à maintenant par deux thèses en cotutelle et l'accueil d'un thésard du Pr. Aroui pendant deux mois (Oct. et Nov. 2015) à Reims.

En juin 2013 et en juin 2015 L. Régalia a été invitée à participer à une école d'été « International Thematic School HiResMIR » proposée dans le cadre du GDRI HiResMir pour proposer un cours sur les méthodes spectroscopiques expérimentales en laboratoire à destination des étudiants en M2, thèse ou post-doctorant.

De plus, tous les ans, des membres de l'équipe proposent et encadrent des stages de M1 et/ou de M2 comme indiqué dans les tableaux ci-dessous.

Stages de M1 encadrés dans l'équipe MSA sur la période :

NOM Prénom de l'étudiant	Encadrant	Dates de début et de fin	Sujet
Carlos M.	M. Rotger	Avril 2015	Spectroscopie de CF ₄ en co-encadrement avec V. Boudon
Usanase G.	M. Rotger	Mai – Juin 2014	Analyse en intensité de la tétrade à 10 μm
Lombard R.	L. Régalia	Févr-Juin 2013	Mesures spectroscopiques et analyses
Bindel M. & Degerman J.	M. Rotger L. Régalia	Février – Juin 2012	Comparaison expérience-théorie des coefficients d'auto-élargissement de l'eau

Stages de M2 encadrés dans l'équipe MSA sur la période :

NOM Prénom de l'étudiant	Encadrant	Dates de début et de fin	Sujet
Renneson T.	L. Régalia	Févr-Juin 2014	Initiation à la spectrométrie par transformation de Fourier, exploitation de spectres de vapeur d'eau enrichi en ¹⁸ O
Diallo I.	M. Rotger, R. Georges (Rennes)	Février - Juin 2013	Conception d'une nouvelle cuve pour les spectres chauds de l'éthylène
Rekik G.	M. Rotger	Février – Septembre 2012	Mise à jour et évolutions de la base de données pour l'éthylène
Aouididi H.	M. Rotger	Février – Juin 2011	Spectroscopie de la bande ν ₅ de C ₂ H ₄
Dubois C.	L. Régalia	Févr-Juin 2011	Initiation à la spectroscopie : exploitation de spectres TF
Chauvet R.	M. Rotger	Mars – Juillet 2011	Spectroscopie infrarouge des bandes ν ₉ et ν ₁₁ de C ₂ H ₄

Pour les thèses (soutenues et en cours) :

NOM Prénom du doctorant	NOM Prénom du ou des directeurs de thèse	Dates de début et de fin	Type de financement
Alkadrou A.	ROTGER Maud / DE BACKER Marie-Renée	1/11/2013 -	Région
Ballandras A.	WEBER Guy / ROTGER Maud	1/10/2007 - 1/07/2011	Ministère
Oudot C.	REGALIA Laurence	1/10/2008 - 1/12/2011	Région
Hmida F.	ROTGER Maud / AROUI Hassen	1/10/2014 –	Cotutelle
Boughdiri A.	ROTGER Maud / AROUI Hassen	1/10/2015 -	Cotutelle

Pour les post-doctorats :

NOM Prénom du doctorant	NOM Prénom du ou des directeurs de thèse	Dates de début et de fin	Type de financement
BA Y. A.	BONHOMMEAU David / ROTGER Maud	2011	VAMDC

M. Rotger assure avec J.-L. Bodnar l'année de M2 « Préparation à l'agrégation interne de Physique-Chimie ». Il s'agit de s'occuper des emplois du temps, d'animer les réunions de rentrée ainsi que le jury, de suivre et soutenir les progressions de chacun. Les effectifs sont passés de quelques étudiants en 2008 à une quinzaine d'inscrits cette année. Nous avons eu trois admis à la session de 2015 dont le major de l'agrégation interne.

Depuis la mastérisation des préparations concours (2010) et notamment pour le concours du CAPES de physique-chimie, L. Régalia a été responsable du MASTER (M1 et M2) Enseignement et formation en Physique-Chimie créé à l'UFR SEN (URCA) avant la création des ESPE (septembre 2013). Elle a ensuite participé à l'élaboration des maquettes des Masters MEEF qui sont pour la mention STS (Sciences Technologie Santé, c'est-à-dire pour les disciplines mathématiques, SVT et Physique-chimie) co-portés entre l'ESPE et l'UFR SEN. L. Régalia est responsable depuis septembre 2013 du parcours MEEF PC et membre du CE (conseil d'école) de l'ESPE. La responsabilité du parcours comprend la préparation et mise en place de l'emploi du temps et sa gestion au cours de l'année, la mise en stage dans les établissements du secondaire des étudiants du master (M1 et M2), la coordination avec les responsables d'Unité d'Enseignement et aussi la participation aux évolutions de maquette régulières.

Annexe « Conférences invitées » de l'équipe MSA

2012

Global overview of the IR ozone studies in Reims

M.-R. De Backer, A. Barbe, Vl.G. Tyuterev, A. Campargue, S. Kassi, D. Mondelain, E. Starikova
GDRI HiResMIR, 13 Septembre **2012**, Namur

2013

Ozone Spectroscopic Studies in GSMA, Reims: Results and Outlook

M. Rotger, E. Starikova, A. Barbe, M. R. De Backer, Vl. G. Tyuterev, L. Daumont et G. Durry
ACSO Meeting, 3-5 Juin **2013**, Genève

2.3. Réalisations: équipe SLA

L'équipe « Spectrométrie Laser et Applications » (SLA) est composée de 3 permanents enseignants-chercheurs plus 1 en disponibilité depuis le début du présent contrat d'accréditation (voir tableau suivant). 4 thèses auront été soutenues en 2016 et deux autres thèses viennent de démarrer. Par ailleurs, 4 post-doctorants ont travaillé sur des sujets correspondant aux travaux de l'équipe et des publications et communications communes ont été réalisées (Voir Annexe 2-SLA). Au cours du présent contrat, l'équipe s'est recentrée sur les 2 axes de travail qui correspondent à son intitulé : les tests et améliorations de sources lasers de nouvelle génération ainsi que leurs applications à des domaines variés allant de l'étude plus fondamentale de paramètres spectroscopiques de molécules d'intérêt atmosphérique à des études plus appliquées de détection de gaz par les différentes techniques développées précédemment au sein de l'équipe. L'équipe est particulièrement reconnue pour ses activités de spectrométrie à base de lasers de nouvelle génération dans le moyen infrarouge et, en particulier, les lasers à cascade quantique (QCL).

NOM Prénom	Période	Activité
ZENINARI Virginie	2011-2016	Responsable d'équipe depuis 2008 PR2 2008-2012, PR1 depuis 2012
PARVITTE Bertrand	2011-2016	PR2 2007-2014, PR1 depuis 2014
VALLON Raphael	2011-2016	Recrutement MC en 2010 ¹
GOMEZ Laura	-	Recrutement MC en 2009, 50% avec « Aéronomie » En disponibilité depuis début 2011

Personnels non- permanents de l'équipe

NOM Prénom du doctorant	NOM Prénom du ou des directeurs de thèse	Dates de début et de fin	Type de financement
MAMMEZ Marie-Hélène	ZENINARI/PARVITTE	2012-	DGA/CNRS
BIZET Laurent	ZENINARI/PARVITTE	2015-	DGA/Région
MORIAUX Anne-Laure	ZENINARI/LIGER-BELAIR 50% avec « Effervescence »	2015-	Ministère

Production scientifique SLA

	2011	2012	2013	2014	2015	2016	TOTAL
Journaux internationaux avec comité de lecture référencés (ACL de rang A)	4	4	3	2	2	3	18
Brevets et extensions		8	11	2	4		21
Communications orales invitées (INV)	1				1		2
Communications internationales avec actes (ACTI)		1	1	3			5
Communications orales internationales	1		2	3	2		8
Communications orales nationales		1	1	2	1		5
Communications par affiche	11	8	11	13	6		49

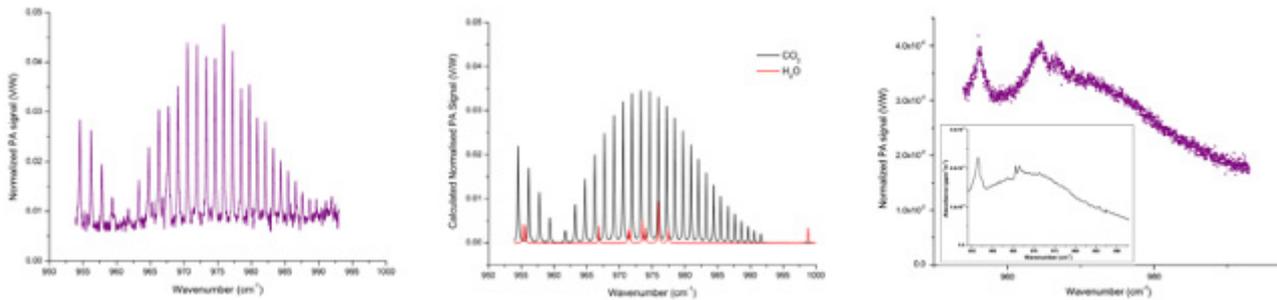
¹ Extensions d'un brevet (FR2010) issu de travaux antérieurs : A.K. Mohamed, R. Vallon, Optical probe for measuring physical and chemical characteristics of a medium during flow, WO12080639 (A1), CN 103339494 (A),(B), US130258344 (A1),(B2), EP 2652484 (A1),(B1)

SLA – Axe 1 : Tests et améliorations de sources lasers de nouvelle génération

Au cours du présent contrat, les travaux de cet axe ont été séparés en plusieurs actions :

- Action 1-1 : Tests d’un laser à cascade quantique commercial largement accordable.
- Action 1-2 : Développement d’un laser à cascade quantique monté en cavité étendue.
- Action 1-3 : Développement de boîtiers adaptés aux lasers à cascade quantique.
- Action 1-4 : Tests d’une source cohérente de réseaux de lasers à cascade quantique.
- Action 1-1 : Tests d’un laser à cascade quantique commercial largement accordable.

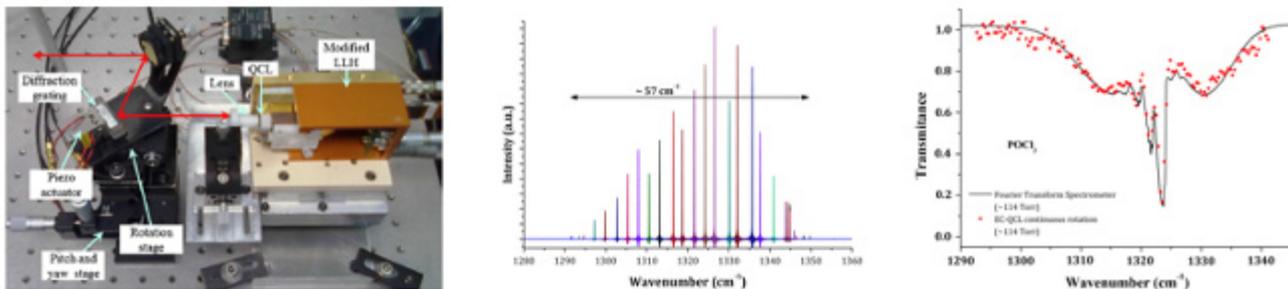
Ces travaux ont consisté à tester des sources commerciales à base de lasers à cascade quantique montés en cavité étendue et donc, largement accordables. Ce travail s’est effectué en collaboration avec L. Joly et dans le cadre du travail post-doctoral de C. Stoeffler et d’une partie du travail doctoral de D. Mammez (2010-2013). La source a été testée en l’associant avec un senseur photoacoustique (PA) de gaz précédemment développé. Les résultats ont permis de démontrer la détection du dioxyde de carbone et du butane ² mais restent limités car ce type de source coûte extrêmement cher (# 70 k€ pour 30 cm⁻¹).



A gauche, spectre expérimental de l’air expiré. Au centre, spectre calculé de CO₂ et de H₂O. A droite, spectres du butane.

- Action 1-2 : Développement d’un laser à cascade quantique monté en cavité étendue.

Cette activité correspond à la finalisation des projets AcousticNose et Selectif (Voir annexe 7-SLA) par la mise en place d’un laser à cascade quantique en cavité étendue. Ces travaux ont également été réalisés dans le cadre de la thèse de D. Mammez (2010-2013). De nombreuses puces fournies par le III-V lab ont été testées en cavité. La meilleure d’entre elles a permis de démontrer une accordabilité de plus de 50 cm⁻¹. Cette valeur est la meilleure qui pouvait être atteinte compte tenu des caractéristiques de la puce laser, ce qui a été démontré par la simulation ³. Par ailleurs, la source réalisée a été utilisée pour démontrer la détection de l’acétone et de POCl₃.



A gauche, montage de QCL en cavité étendue. Au centre, gamme d’accord obtenue. A droite, spectre du POCl₃ obtenu.

² D. Mammez et al, Photoacoustic gas sensing with a commercial external-cavity QCL at 10.5 μm, Inf. Phys. & Tech. 61, 14 (2013)

³ D. Mammez et al, Development of an E-C QCL spectrometer at 7.5 μm and applications to gas detection, Appl. Phys. B 116, 951 (2014)

- Action 1-3 : Développement de boîtiers adaptés aux lasers à cascade quantique.

Dans le cadre des actions de recherche et développement menées par l'équipe pour Aerovia, start-up issue de nos travaux, nous avons développé un système de boîtier innovant adapté pour les lasers à cascade quantique et permettant de les installer, de les alimenter et de les aligner de façon passive, contrairement aux boîtiers d'alimentation standards. Ces travaux ont été brevetés en France et ce brevet a ensuite été étendu en Europe, à l'international et aux Etats-Unis ⁴.

- Action 1-4 : Tests d'une source cohérente de réseaux de lasers à cascade quantique.

Dans le cadre du projet ANR COCASE (2012-2014, Voir annexe 7-SLA) une combinaison innovante d'un réseau de QCL en cavité étendue a été développée. Ce travail a été réalisé en collaboration avec le III-V Lab qui fabriquait les puces et le GSMA qui les testait en cavité étendue. Les résultats obtenus ont été présentés en congrès ⁵ et ont été publiés en revue internationale à comité de lecture ⁶ mais n'ont pas totalement abouti car, malheureusement, les puces ne fonctionnaient pas en mode continu mais uniquement en mode impulsionnel.

Les travaux des actions 2 et 4 de cet axe vont se poursuivre, notamment à travers la thèse de L. BIZET (2015-2018, allocation DGA-Région). Par ailleurs, un projet de recherche est en cours de soumission sur cet axe : le projet MIRSICOMB (ANR GÉNÉRIQUE) porté par l'INL de Lyon.

SLA – Axe 2 : Applications de la spectrométrie laser infrarouge

Au cours du présent contrat, les travaux de cet axe ont été séparés en plusieurs actions :

- Action 2-1 : Mesure de paramètres spectroscopiques de molécules d'intérêt.
- Action 2-2 : Applications à l'œnologie.
- Action 2-3 : Applications aux mesures atmosphériques par technique multi-passages.
- Action 2-4 : Applications à la radiométrie hétérodyne.
- Action 2-5 : Applications à la spectrométrie photoacoustique
- Action 2-1 : Mesure de paramètres spectroscopiques de molécules d'intérêt.

Dans le cadre du travail post-doc de JingSong Li en collaboration avec l'équipe Aéronomie, nous avons développé l'étude des paramètres spectroscopiques de transitions du dioxyde de carbone à 2,05 μm qui sont utilisées dans le cadre des mesures LIDAR du Laboratoire de Météorologie Dynamique (LMD) ⁷. A la suite, nous participons actuellement au projet MERLIN du CNES (et du DLR, son équivalent allemand) qui vise à la réalisation d'un LIDAR méthane monté sur satellite (Voir annexe 7-SLA). Ce projet satellitaire nécessite des données spectroscopiques de très grande précision. Ces travaux sont réalisés en collaboration avec H. Tran du LISA dans le cadre du post-doctorat de T. Delahaye.

- Action 2-2 : Applications à l'œnologie.

Dans le cadre des suites de la thèse de Maxime Mulier (2009) en collaboration avec l'équipe Effervescence - Champagne, nous avons développé un spectromètre permettant la mesure du dioxyde de carbone émis par le Champagne ⁸. Les travaux de collaboration ont été poursuivis par l'amélioration du spectromètre dans le cadre de plusieurs stages de laboratoire de différents niveaux (M2, M1, L3). Actuellement, par exemple, le montage présente l'avantage d'avoir la source déportée par une fibre.

⁴ B. Parvitte et al, Procédé d'émission d'un faisceau laser dans un boîtier, Brevets FR2969315, WO12080652, EP2652845, US130287053

⁵ R. Vallon et al, Conference Papers – CLEO/EUROPE – 6800810 (2013) / R. Vallon et al, Conference Papers – LACSEA – 107131 (2014)

⁶ R. Vallon et al, External cavity coherent quantum cascade laser array, Infrared Physics and Technology, 76, 415 (2016)

⁷ J.S. Li et al, TDL measurement of pressure-induced shift coefficients of CO₂ around 2.05 μm for Lidar application, JQSRT 112, 1411 (2011)

J.S. Li et al, Self-induced pressure shift and temperature dependence measurements of CO₂ at 2.05 micron, Spec. Acta A 85, 74 (2012)

⁸ G. Liger-Belair et al, Unraveling the carbon dioxide in champagne wines: A state-of-the-art review, Analytica Chimica Acta 732, 1 (2012)

G. Liger-Belair et al, Carbon dioxide and ethanol release from champagne glasses, Advances in Food and Nutrition Research 67, 289 (2012)

- Action 2-3 : Applications aux mesures atmosphériques par technique multi-passages.

Suite au précédent contrat et dans le cadre de la création de Aerovia, nous avons finalisé les travaux autour des applications de la technique multi-passages appliquée à la mesure de composés gazeux d'intérêt atmosphérique en collaboration avec l'équipe Aéronomie. Ce travail a principalement consisté à développer le spectromètre à base de QCL pour la mesure de N₂O et l'étude des améliorations possibles pour le traitement des informations⁹. Par ailleurs, certaines technologies de la version de ce spectromètre baptisé QCLAS pour Aerovia ont été brevetées¹⁰.

- Action 2-4 : Applications à la radiométrie hétérodyne.

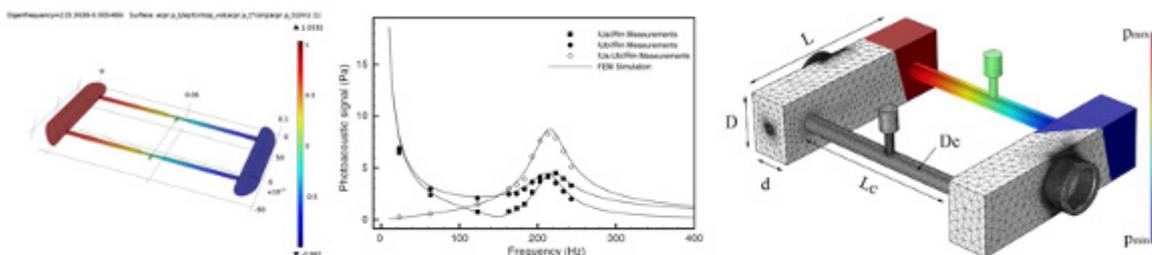
Dans le cadre du projet ANR QUIGARDE (2013-2015, Voir annexe 7-SLA) coordonné par B. Parvitte au GSMA (partenaires : III-V lab et LPL de Villetaneuse), nous avons relancé l'activité « historique » de radiométrie hétérodyne de l'équipe SLA. En effet, nous avons été les premiers à démontrer la possibilité d'utiliser un laser à cascade quantique pour cette activité¹¹. A la suite, les QCL n'étaient plus disponibles vers 10 μm et l'activité avait été mise en sommeil. Depuis quelques années, l'accès aux QCL dans cette région de longueur d'onde est à nouveau disponible et fait également l'objet de la thèse de M.-H. Mammez (2012-2016).

- Action 2-5 : Applications à la spectrométrie photoacoustique (PA)

Cette action a été celle qui a été la plus développée dans le présent contrat d'accréditation. En effet, plusieurs activités ont été menées en parallèle. Hormis la publication liée au contrat précédent¹², nous avons mené des activités de modélisation, de recherche et développement en collaboration avec Aerovia et de miniaturisation de cellules photoacoustiques, en particulier dans le cadre du projet ANR MIRIADE.

- Action 2-5-1 : Modélisation de la spectrométrie photoacoustique (PA)

Le senseur PA précédemment développé dans l'équipe¹³ avait été modélisé en utilisant une analogie électrique. Ces dernières années, nous avons utilisé un logiciel de modélisation multiphysique (Comsol multiphysics®) pour simuler le comportement des cuves PA réalisées. Ainsi, pour la première fois au monde, nous avons réussi à modéliser de façon quantitative¹⁴ le signal PA alors que, jusqu'à présent, seule l'évolution en fréquence des résonances avait été étudiée pour les systèmes complexes.



A gauche, répartition de pression dans le DHR. Au centre, signaux PA calculés sans ajustement. A droite, nouveau modèle de DHR.

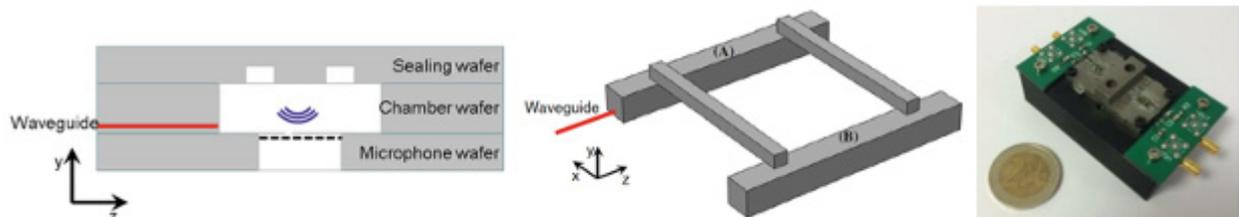
⁹ L. Joly et al, Laser Physics 21, 805 (2011), L. Joly et al, Appl. Phys. B 103, 717 (2011), I. Mapped-Fogaing et al, Appl. Spectrosc. 66, 700 (2012)
¹⁰ V. Zéninari et al, Dispositif de détection de traces de gaz, Brevets FR2978247 (A1), WO2013010984 (A2), (A3)
¹¹ B. Parvitte et al, Preliminary results of heterodyne detection with QC lasers in the 9.1 μm region, Spec. Acta A 60, 3285 (2004)
¹² B. Bonno et al, Study of a thermophysical system with two time constants using an open photoacoustic cell, Int. J. Therm. 32, 630 (2011)
¹³ V. Zéninari et al, Design and characteristics of a DHR PA cell for infrared gas detection, Inf. Phys. Tech. 40, 1 (1999)
¹⁴ B. Parvitte et al, Quantitative simulation of photoacoustic signals using finite element modelling software, Appl. Phys. B 111, 383 (2013)
 C. Risser et al, Optimization and complete characterization of a photoacoustic gas detector, Appl. Phys. B 118, 319 (2015)
 B. Parvitte et al, Proc. Comsol Conference Milan, pp. 1-5 (2012) / B. Parvitte et al, Conference Papers – Applied Industrial Optics (2014)
 V. Zéninari et al, PA detection of CH₄ in large concentrations with a Helmholtz sensor, Int. J. Thermophysics 37, 1 (2016)

- *Action 2-5-2 : R&D pour le senseur photoacoustique d'Aerovia*

Cette activité est liée à la création de la start-up Aerovia (www.aerovia.fr) basée sur nos travaux de recherche. Au cours de ce contrat, nous avons continué le travail de Recherche & Développement pour cette petite société qui, créée en 2010, existe toujours et compte aujourd'hui une dizaine de personnes. F. Mauguière a effectué un travail post-doctoral d'ingénieur de recherche pour avancer ces travaux. Parmi les personnels de Aerovia se trouve aujourd'hui C. Risser qui a fait une thèse CIFRE avec Aérovia au sein de l'équipe (2012-2015). Les travaux menés ont été valorisés principalement sous forme de brevets ¹⁵.

- *Action 2-5-3 : Miniaturisation de cellules photoacoustiques*

Cette action a été initiée grâce au projet ANR MIRIADE (Voir annexe 7-SLA) coordonné par V. Zéninari au GSMA (partenaires : III-V lab, CEA-Leti, LSCE et Aerovia). L'idée de base était d'utiliser l'une des caractéristiques du signal photoacoustique qui augmente quand le volume diminue. Un brevet de base et ses extensions internationales en collaboration avec le LETI avaient été déposés ¹⁶. L'idée de départ était d'intégrer sur un même substrat en silicium l'ensemble laser/senseur. Cela passait également par le développement de guide d'onde et ce travail a également été breveté ¹⁷. La partie source du projet MIRIADE était constituée d'une source QCL largement accordable basée sur un réseau de lasers à cascade quantique. Ces travaux, développés au III-V lab, ont abouti par la création de la start-up MirSense (www.mirsense.com). Cette action a également été réalisée dans le cadre de la thèse de Justin Rouxel (2012-2015, financement CEA). Le sujet de la thèse portait précisément sur la miniaturisation de la cellule PA. Les premiers travaux ont consisté à modéliser les dispositifs avec Comsol multiphysics[®] comme dans l'action 5-1. Cependant, il a fallu s'orienter vers le module « ThermoAcoustics » de ce logiciel pour être plus proche de la réalité des petits objets en prenant en compte de façon approfondis les pertes par frottement dans ces dispositifs. La version initiale était prévue en silicium ¹⁸ mais celle-ci ayant présenté de nombreux défauts de réalisation, nous nous sommes réorientés vers des prototypes en métal ¹⁹.



A gauche, les deux figures, illustration d'un DHR intégré sur silicium avec 3 wafers. A droite, DHR réalisé à base de métal.

En conclusion sur ce deuxième axe, les travaux des actions 1, 2, 4 et 5 vont se poursuivre, notamment à travers les suites du projet MERLIN (action 1), la thèse de A.-L. MORIAUX (2015-2018, action 2), les suites du projet QUIGARDE (action 4) et les suites du projet MIRIADE et par la soumission du projet INTERREG « SAFESIDE » (action 5).

¹⁵ V. Zéninari et al, Procédé et dispositif de détection de traces de gaz multiples, Brevets FR2963102, WO1210806, EP2596331, US13205871
 V. Zéninari et al, Dispositif d'analyse de gaz à très forte sensibilité, Brevet FR3017950
 C. Risser et al, Dispositif d'analyse de gaz basé sur un résonateur de Helmholtz, Brevet FR 14 52333, déposé en 2014
¹⁶ M. Brun et al, Détecteur de gaz photoacoustique à cellule de Helmholtz, Brevets FR2974413, EP2515096, US20120266655
¹⁷ M. Brun et al, Optical waveguide having a varying index gradient, EP2662714, US 20130315547
¹⁸ A. Glière et al, A coupled model for the simulation of miniaturised and integrated PA gas detector, Int. J. Thermophysics 34, 2119 (2013)
 A. Glière et al, Challenges in the Design and Fabrication of a Lab-on-a-Chip PA Gas Sensor, Sensors 14, 957 (2014)
 V. Zéninari et al, Simulations and developments of Si-integrated PA cells for the sensing of the atmosphere, Conference Papers AIO (2014)
¹⁹ J. Rouxel et al, Development of a Miniaturized Differential Photoacoustic Gas Sensor, Procedia Engineering 120, 396 (2015)

Rayonnement et attractivité académiques SLA

Depuis 2001, l'équipe SLA fait partie du Groupement de Recherche SpecMo de Spectroscopie Moléculaire du CNRS n°3152 (<http://www.gdr-specmo.cnrs.fr>). Depuis 2009, V. Zéninari est membre du Comité Scientifique de ce GdR : <http://www.gdr-specmo.cnrs.fr/index.php?p=8>. Par ailleurs, les membres de l'équipe sont régulièrement sollicités en particulier par l'ANR pour l'expertise de projets (Programmes ANR : Générique, Astrid, Retour Post-Doc, Emergence).

Au cours du contrat 2011-2016, l'équipe SLA a été impliquée dans de nombreux projets de recherche dont la plupart étaient financés. La liste exhaustive se trouve résumée dans le tableau ci-dessous et de façon plus détaillée en annexe 7. On peut en particulier souligner la coordination de deux projets ANR : MIRIADE (ECOTECH2011) par V. Zéninari et QUIGARDE (ASTRID2012) par B. Parvitte. Ces travaux ont été réalisés en grande partie en collaboration avec le laboratoire III-V de Thalès-Alcatel qui fournissait les puces lasers de nouvelle génération. Les projets SELECTIF et ACOUSTICNOSE visaient à la réalisation de sources lasers largement accordables par la mise en cavité étendue de puces lasers. Le projet COCASE utilisait des réseaux de lasers à cascade quantique cohérents pour l'étude des gaz. Le projet MIRIADE consiste en la réalisation de senseurs de gaz photoacoustiques microscopiques associés avec des sources formées d'un réseau de lasers à cascade quantique pour avoir une grande accordabilité, les deux dispositifs étant reliés par un multiplexeur afin d'intégrer l'ensemble. Le projet QUIGARDE quant à lui consiste en l'utilisation de sources lasers à cascade quantique autour de 10 µm pour le développement du radiomètre hétérodyne du laboratoire. On peut noter que début 2015, les chercheurs du III-V lab ont créé la start-up MIRSENSE (www.mirsense.com) dont les principaux produits sont issus des travaux réalisés dans le cadre de la partie « source » du projet MIRIADE. Enfin, l'équipe participe au projet MERLIN (MEthane Remote Lidar mission), projet franco-allemand associant le CNES et son équivalent allemand le DLR. Notre contribution à cette mission concerne les mesures spectroscopiques à très haute résolution en collaboration avec le LISA.

- les listes des contrats institutionnels sur financements publics et caritatifs (ARC, ANR, contrats européens, etc.) doivent aussi figurer *en annexe 7*.

Nom du projet	Dates début-fin	Type d'AAP	Financement (Total/Unité)	Partenaires
SELECTIF	2009-2011	REI DGA	450 k€ / ≈ 120 k€	III-V LAB
ACOUSTICNOSE	2010-2012	EURIPIDES/Eureka	800 k€ / ≈ 150 k€	III-V LAB, NEO
		Co-financement Région	100 k€	
COCASE	2012-2014	ANR ASTRID	300 k€ / ≈ 120 k€	III-V LAB
MIRIADE (coord. SLA)	2012-2015	ANR ECOTECH	1 M€ / ≈ 225 k€	III-V LAB, LETI, LSCE, AEROVIA
QUIGARDE (coord. SLA)	2013-2016	ANR ASTRID	300 k€ / ≈ 85 k€	III-V LAB, LPL
MERLIN	2012-2019	R&T CNES TOSCA	500 k€ /an / ≈ 150 k€	Français : LISA, LMD

Interactions avec l’environnement social, économique et culturel – SLA

- Depuis 2002, V. Zéninari participe à la fête de la science. Chaque année, elle présente en laboratoire les applications de la spectrométrie laser à l’étude des gaz de l’atmosphère. Une centaine de personnes, majoritairement des lycéens sur réservation, visitent chaque année notre laboratoire. Par ailleurs, chaque année, R. Vallon participe aux Journées Portes Ouvertes de l’IUT.
- R. Vallon a été recruté en 2010 et 4 brevets et extensions suite à ses précédents travaux réalisés en post-doctorat ont été déposés entre 2011 et 2013 (Famille SONDE). Depuis 2010, B. Parvitte et V. Zéninari ont co-fondé la start-up Aerovia (www.aerovia.fr). Dans le cadre des travaux communs, de nombreux brevets ont été déposés (Familles MULTIGAZ, BOITIER, THERMALISATION, HELMHOLTZ).
- Enfin, depuis le début du projet ANR MIRIADE, une collaboration avec le CEA-LETI de Grenoble a été initiée. Plusieurs brevets ont été déposés (Familles PA MINIATURE et GUIDE D’ONDE).
- *listes des brevets, des contrats industriels, des contrats sur financement privé..., à lister ici et en annexe 7.*

	2011	2012	2013	2014	2015	2016	TOTAL
Brevets		8	11	1	1		21

FAMILLE SONDE (4) : Optical probe for measuring physical and chemical characteristics of a medium during flow, A.K. Mohamed, R. Vallon, WO12080639A1, CN103339494A,B, US130258344A1,B2, EP2652484A1,B1

FAMILLE MULTIGAZ (4) : Procédé et dispositif de détection de traces de gaz multiples / Method and device for detecting trace amounts of many gases, V. Zéninari, B. Parvitte, L. Joly, G. Durry, R. Le Loarer, J. C. Garcia, R. Hamelin, FR2963102 (A1), WO12010806 (A1), EP2596331 (A1), US130205871 (A1)

FAMILLE BOITIER (4) : Procédé et dispositif d’émission d’un faisceau laser dans un boîtier / Method and device for emitting a laser beam in a housing, B. Parvitte, L. Joly, V. Lecocq, G. Durry, V. Zéninari, R. Hamelin, R. Le Loarer, FR 2969315 (A1), (B1), WO12080652 (A1), EP2652 845 (A1), US130287053 (A1)

FAMILLE THERMALISATION (2) : Dispositif de détection de trace de gaz / Device for detecting trace gases, V. Zéninari, L. Joly, B. Parvitte, T. Decarpenterie, G. Durry, R. Le Loarer, FR2978247A1, WO13010984A2,A3

FAMILLE HELMHOLTZ (2) : Dispositif d’analyse de gaz basé sur un résonateur de Helmholtz, C. Risser, V. Zéninari, B. Parvitte, R. Vallon, L. Colin, J. C. Garcia, Brevet Français FR1452333, (2014) ; Dispositif d’analyse de gaz à très forte sensibilité, V. Zéninari, B. Parvitte, R. Vallon, C. Risser, L. Colin, J. C. Garcia, FR3017950A1

FAMILLE PA MINIATURE (3) : Détecteur de gaz PA à cellule de Helmholtz / PA gas sensor with Helmholtz cell, M. Brun, S. Nicoletti, B. Parvitte, V. Zéninari, FR2974413A1,B1, EP2515096A1,B1, US12266655A1

FAMILLE GUIDE D’ONDE (2) : Optical waveguide / Optical waveguide having a varying index gradient, M. Brun, S. Nicoletti, B. Parvitte, V. Zéninari, EP2662714 (A1), US130315547 (A1)

Implication dans la formation par la recherche-SLA

Depuis septembre 2012, V. ZENINARI assure la responsabilité du M2 Nanosciences, Optique, Atmosphère (NOA) de Reims. Les charges principales concernent l'organisation de la rentrée, la préparation de l'emploi du temps pour étudiants et enseignants, les propositions et le suivi des stages, l'organisation des jurys de fin d'année et des jurys d'admission, la rédaction des lettres de recommandation, ainsi que le suivi des étudiants après leurs études. De 2010 à 2013, V. ZENINARI a été membre du conseil de l'Ecole Doctorale.

Stages de M1 NOA (1 mois) encadrés dans l'équipe SLA sur la période :

NOM Prénom du doctorant	Date	Sujet
MAMMEZ Marie-Hélène	Mai 2011	Initiation à la spectrométrie laser
NDAO Moustapha	Mai 2012	Instrumentation laser pour la détection de CO2
SZYMANSKI Nicolas	Mai 2012	Spectroscopie du méthane
JARRY Jihed	Mai 2015	Etude théorique et pratique de cuves multi-passages
DEMBELE Yaya	Mai 2015	Simulation de différentes cuves multi-passages

Stages de M2 NOA (5 mois) encadrés dans l'équipe SLA sur la période :

NOM Prénom du doctorant	Dates	Sujet
MAMMEZ Marie-Hélène	Janv-Juin 2012	Caractérisation de lasers à cascade quantique émettant aux alentours de 10 µm en vue de la réalisation d'un senseur hétérodyne
NDAO Moustapha	Janv-Juin 2013	Caractérisation d'interféromètres de Fabry-Pérot pour le développement d'un spectromètre laser appliqué à l'œnologie
LOMBARD Rémy	Janv-Juin 2014	Caractérisation d'une source largement accordable à base de laser à cascade quantique pour application à la détection de gaz
SAMA Abalo E.P.	Janv-Juin 2015	Développement d'un pointeur solaire pour la mesure de gaz atmosphériques par spectrométrie laser infrarouge

Thèses encadrées et en cours sur la période :

NOM Prénom du doctorant	NOM des directeurs de thèse	Dates	Type de financement
MAMMEZ Dominique	ZENINARI/PARVITTE	2010-2013	DGA/Région
RISSER Christophe	ZENINARI/PARVITTE	2012-2015	CIFRE AEROVIA
ROUXEL Justin	ZENINARI/PARVITTE	2012-2015	CEA
MAMMEZ Marie-Hélène	ZENINARI/PARVITTE	2012-2016	DGA/CNRS
BIZET Laurent	ZENINARI/PARVITTE	2015-	DGA/Région
MORIAUX Anne-Laure	ZENINARI/LIGER-BELAIR 50% avec « Effervescence »	2015-	Ministère

Post-doctorats encadrés et en cours sur la période :

NOM Prénom du post-doctorant	NOM des encadrants	Dates de début et de fin	Type de financement
LI JingSong	ZENINARI/DURRY 50% avec « Aéronomie »	2009-2011	CNES/CNRS
MAUGIERE Frédéric	ZENINARI	2011	EUROPE/AcousticNose
STOEFLER Clara	DURRY/ZENINARI 50% avec « Aéronomie »	2011-2013	CNES
DELAHAYE Thibault	TRAN/ZENINARI 50% avec LISA UMR7583	2014-2016	CNES/CNRS

2.4. Réalisations: équipe RPA

L'équipe RPA « Réactivité des Processus Atmosphériques » se compose de deux enseignant-chercheurs, un ingénieur de recherche, sous contrat en 2014 et un ATER en 2014-2015. 5 thèses de l'Université de Reims ont été soutenues durant la période 2011-2015 et trois autres viennent de démarrer.

NOM Prénom	Période	Activité
CHAKIR Abdelkhaleq	2011-2015	Responsable d'équipe, Maître de conférences
ROTH Estelle	2011-2015	Maître de conférences

Personnels non-permanents de l'équipe

NOM Prénom du doctorant	NOM Prénom du ou des directeurs de thèse	Dates de début et de fin	Type de financement
KALALIAN C.	A .Chakir\E. Roth	2015- ...	Ministere

La thématique de l'équipe RPA « Réactivité des Processus Atmosphériques » est centrée sur l'étude de devenir des contaminants organiques, en termes de persistance et transformation chimique, dans les différentes phases de l'atmosphère, en particulier les phases gazeuses et particulaires. Le principal objectif est de fournir, des données cinétiques, mécanistiques et spectroscopiques concernant les processus atmosphériques. Ces déterminations expérimentales permettent ainsi de participer à l'établissement d'un faisceau de résultats qui converge vers des données fiables nécessaires pour alimenter les modèles atmosphériques. Les travaux de l'équipe sont essentiellement fondés sur une forte composante instrumentale permettant de réaliser des études de réactivité d'un contaminant, à savoir une chambre de simulation atmosphériques rigides, des photo-réacteurs, des cellules à réflexions multiples couplées avec différentes techniques analytiques UV, Visible, FTIR, GC/MS, GC/FID, des diodes lasers et des lasers de photolyse.

Les principaux thèmes développés par l'équipe ces dernières années sont :

- Dégradation atmosphérique, en phase gazeuse des composés organiques multifonctionnels volatils et semi volatils.
- Dégradation atmosphérique des pesticides à l'interface air/particule.

Production scientifique -RPA

	2011	2012	2013	2014	2015	2016	TOTAL
Journaux internationaux avec comité de lecture référencés (ACL de rang A)	2	5	9	6	5	1	28
Communications orales invitées (INV)				1	1		2
Communications orales internationales	5	1		2	2		10
Communications orales nationales		1	1	1	1		4
Communications par affiche	4	1	4	5	1		15

I-Dégradation atmosphérique, en phase gazeuse des composés organiques multifonctionnels volatils et semi volatils.

I-1 Méthode

Les composés organiques multifonctionnels représentent une classe importante des contaminants troposphériques. Les sources de ces composés sont très variées et la part secondaire provenant de l'oxydation de composés organiques volatils (C.O.V) primaires peut être majoritaire dans certains cas. Les

principaux processus d'élimination de ces composés, en phase gazeuse, sont leurs réactions avec les radicaux OH, Cl, NO₃, l'oxydation par O₃ et leur photolyse par les rayonnements solaires. Afin d'évaluer l'impact de ces espèces chimiques sur la qualité de l'air, une compréhension détaillée de la cinétique et les mécanismes de leur dégradation atmosphérique est nécessaire. Dans cette optique nous avons étudié différentes familles des composés polyfonctionnelles. La méthodologie utilisée est :

Sur le plan cinétique, des études cinétiques de la réaction entre les composés ciblés et les oxydants atmosphériques ont été réalisées en mode relatif au moyen d'une chambre de simulation atmosphérique rigide triple parois en pyrex. Les expériences ont été effectuées à des températures variant entre 277 à 363 K et à pression atmosphérique. Le suivi cinétique du milieu réactionnel a été réalisé par différentes techniques analytiques à savoir IRTF, GC/MS/SPME diodes laser IR QCL.

Sur le plan spectroscopique, les expériences ont été réalisées dans le domaine spectral 200-500 nm avec une résolution comprise entre 0.02 et 0.1 nm pour un trajet optique variant de 0.1 à 20 m, une gamme de pressions de 0.02 à quelques Torr et des températures variant de 0 à 90°C. Une lampe de deutérium a été utilisée comme source de fond continu pour les longueurs d'ondes inférieures à 350 nm et une lampe à filament de tungstène pour les longueurs d'onde supérieures. L'enregistrement des spectres a été effectué à l'aide d'un monochromateur Jobin-Yvon type Czerny-Turner.

1-2 Dégradation atmosphérique des composés oxygénés : les hydroxycétones et les diones.

Bien que ce type de composés soit rarement mesuré dans les campagnes de mesure, quelques études récentes de laboratoire montrent qu'ils sont effectivement formés au cours de l'oxydation des COV²⁰. Un autre indice de leur présence dans l'atmosphère vient de la mesure de la réactivité totale du radical OH qui, combinée à un calcul de cette réactivité via la mesure des concentrations en COV dans différents environnements atmosphériques (urbain, forêt boréale, forêt tropicale), révèle un défaut de réactivité allant jusqu'à 90%. Ces données suggèrent ainsi l'existence d'une classe de COV multifonctionnels susceptible de jouer un rôle majeur dans la chimie atmosphérique, classe de COV actuellement non mesurée et non prise en compte dans les modèles et dont les connaissances en termes de réactivité sont peu étudiées²¹.

Dans le cadre d'un projet lefe-chat (2011-2015) collaboratif porté par notre équipe nous avons étudié la cinétique d'oxydation par les radicaux OH et déterminé les constantes de photolyse des composé hydroxycarbonylés et de diones.

Les études, qui portent sur le devenir des hydroxycétones, font ressortir les points suivants:

- Les spectres d'absorption de ces composés sont caractérisés par une forte absorption entre 240-340 nm. Cela a permis de conclure que la contribution des processus de photolyse dans la dégradation atmosphérique de ces composés est importante.
- Le mécanisme de la réaction entre ces composés et les radicaux OH et Cl est dominé par les processus d'arrachement des atomes d'hydrogène. Les sites d'attaque des radicaux OH sont fortement influencés par la structure moléculaire à savoir la longueur de la chaîne carbonée, sa ramification et la position des groupements fonctionnels (hydroxyle et carbonyle). Par contre, dans le cas de la réaction avec l'atome de chlore, la structure moléculaire a peu d'effet.
- La persistance atmosphérique de ces composés est faible (temps de vie de quelques heures à quelques jours). Les principaux processus puits sont la photolyse et leur réaction avec les radicaux OH.
- La constante de vitesse de la réaction entre les hydroxycétones et les radicaux OH est caractérisée par une faible énergie d'activation voisine de zéro. Cela indique que ce processus se produit sans

²⁰ F. Reisen, S.M. Aschmann, R. Atkinson, J. Arey, Environ. Sci. Technol. 37, 4664 – 4671 (2003) ; F. Reisen, S.M. Aschmann, R. Atkinson, J. Arey, Environ. Sci. Technol. 39, 4447 – 4453 (2005).

²¹ A.C. Nölscher et al., Atmos. Chem. Phys. Discuss. 12, 7419 – 7452 (2012) ; C. Dolgorouky et al., Atmos. Chem. Phys. Discuss. 12, 10937 – 10994 (2012) ; T. Ingham et al., Atmos. Meas. Tech. 2, 465 – 477 (2009).

barrière d'énergie et procède selon un équilibre entre les réactifs et un complexe intermédiaire peu stable.

Dans le cas des dicétones, nos études ont conduit aux conclusions suivantes :

- Comme dans le cas des hydroxycétones la réactivité des dicétones est fortement impactée par la structure moléculaire (longueur de la chaîne, position d'un carbonyle l'un par rapport à l'autre). La réactivité augmente avec l'éloignement des groupements carbonyles, les β -dicétones étant 30 fois plus réactifs que les α -dicétones. Par ailleurs, leur persistance atmosphérique est faible.
- En ce qui concerne l'effet de température, la constante de vitesse de la réaction de 2,3-pentanedione avec les radicaux OH, présente un coefficient positif de température alors que dans le cas de 2,4-pentanedione, la constante de vitesse présente un coefficient négatif élevé de température. Cette différence montre que le mécanisme réactionnel dans le cas de 2,4-pentanedione est dominé par l'addition des radicaux OH sur la double liaison C = C de la forme énolique de ce composé, alors que dans le cas de 2,3-pentanedione le mécanisme réactionnel procède principalement par arrachement des atomes d'hydrogène.
- Sur le plan spectroscopique, pour les deux composés, les spectres obtenus consistent en de vastes continuums. Le spectre de 2,3-pentanedione présente deux bandes d'absorption entre 225 et 300 nm et entre 325 et 470 nm. Ces bandes correspondent aux transitions interdites $n-\pi^*$ des carbonyles. Quant au 2,4-pentanedione, une très intense bande d'absorption a été observée dans le domaine spectral 210 à 340 nm, cela montre la dominance de la forme énolique de ce composé. Globalement, l'absorption de ces composés dans le domaine UV-visible est relativement élevée témoignant d'une aptitude à la photolyse atmosphérique non négligeable voir dominante.

Nous avons aussi développé un montage expérimental utilisant la technique analytique, diode laser à cascade quantique à cavité externe (ECQCL) pour l'adapter à la chambre de simulation atmosphérique. Cette technique analytique nous a permis de déterminer des spectres d'absorption Infrarouge à haute résolution de l'ordre de $0,006 \pm 0,002 \text{ cm}^{-1}$ des composés tels que l'acide formique, l'éthanol et l'hydroxyacétone. La comparaison entre les spectres obtenus par FTIR et ceux obtenus par les diodes laser montre que ces derniers sont plus résolus et plus précis pour une durée d'enregistrement largement plus courte (de l'ordre de microseconde). Cependant le domaine spectral exploré est plus réduit que celui obtenu par FTIR. (100 cm^{-1} contre 3500 cm^{-1}).

Sur le plan cinétique, au moyen de cette technique (après avoir optimisé les conditions expérimentales et le domaine spectral à explorer) nous avons réalisé l'étude cinétique de la dégradation de l'hydroxyacétone par le chlore atomique dans un large domaine de conditions expérimentales (280-363 K, 100-760 torr). Nous avons travaillé en mode relative en utilisant comme référence l'éthanol. Les mesures ont été déterminées, in situ et avec une bonne précision. Les résultats obtenus montrent que la contribution du chlore atomique dans la dégradation atmosphérique de l'hydroxyacétone est non négligeable.

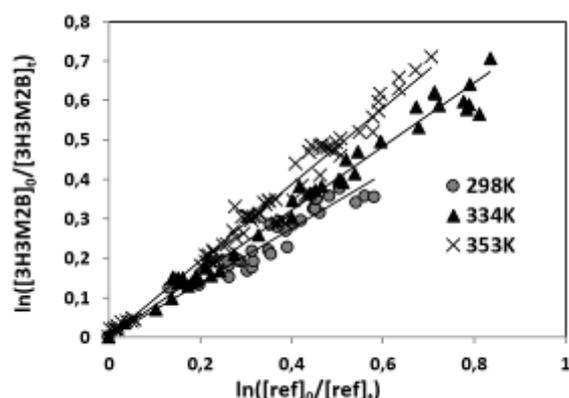


Figure1 représentant la cinétique de la réaction en le 3-hydroxy-3methyl butanone et les radicaux OH relativement à une référence, le benzaldéhyde et à différentes températures.

I-3 Dégradation atmosphérique des composés hétérocycliques : les oxy-azotés et les azotés aromatiques

Les sources d'émission de ces composés sont principalement d'origine anthropique : combustion de la biomasse, transport, industrie chimique, utilisation comme solvants,.....etc. En outre, ces composés peuvent se former dans l'atmosphère suite à la dégradation atmosphérique des pesticides. Leur devenir atmosphérique est peu étudié. C'est dans cette optique que nous avons entrepris l'étude de dégradation atmosphériques de plusieurs composés de la famille composés hétérocycliques oxy-azotés à savoir des composés morpholiniques et des azotés aromatiques (pyridine, pyrimidine, pyridazine et méthyle pyrimidine). Ces études ont été effectuées dans le cadre des programmes de recherche collaboratifs : CPER Aqual 2008-2014 et le programme Volubilis (2009-2013). Les résultats de ces travaux ont fait ressortir les points suivants:

- Les spectres UV obtenus pour les composés étudiés sont des continuums. La capacité d'absorption des composés morpholiniques est importante à $\lambda < 250$ nm. Au-delà de 260 nm leur absorption est très faible. Ces mesures montrent donc, que les processus de photolyse atmosphérique de ces composés sont peu probables. Quant aux composés azotés aromatiques leur absorption dans le domaine spectral 200-360 est importante. De ce fait la photolyse atmosphérique de ces composés par les rayonnements solaires, est une voie de dégradation à en prendre en compte.
- La persistance atmosphérique de ces composés est faible (temps de vie de quelques heures à quelques jours). Leur transformation chimique dans l'atmosphère est dominée par leur réaction avec OH et/ou par photolyse.
- Le mécanisme de la réaction entre les radicaux OH et les oxy-azotés est contrôlé par le groupement amine quand il s'agit des composés morpholiniques ou par la fonction amide quand il s'agit des composés morpholiniques amides. En outre, la présence du groupement éther exerce un effet activant sur ce processus.
- Le mécanisme de la réaction entre les radicaux OH et les composés aromatiques azoté-hydrocarbonés se fait selon un processus d'addition. La réactivité des composés hétérocycliques azotés aromatiques à six atomes vis à vis des radicaux OH est relativement lente, en comparaison avec leurs homologues aromatiques hydrocarbonés. La présence d'un atome d'azote dans le cycle aromatique à 6 atomes exerce un effet désactivant sur cette réaction : $k(\text{OH} + \text{pyridine}) < k(\text{OH} + \text{benzène})$. Cet effet désactivant devient de plus en plus prononcé lorsque le nombre d'atome d'azote dans le cycle aromatique augmente : $k(\text{OH} + \text{pyridine}) > k(\text{OH} + \text{pyrimidine}) > k(\text{OH} + \text{triazole})$. En outre, la substitution d'un atome d'hydrogène du cycle aromatique par un alkyl exerce un effet activant sur la réaction entre les radicaux OH et les composés aromatiques azoté-hydrocarbonés.

II- Dégradation atmosphérique des pesticides à l'interface air/particule.

Dans l'atmosphère, un pesticide se trouve réparti entre les phases gazeuse, liquide et particulaire. Pendant son séjour atmosphérique, il peut subir un ensemble de processus réactionnels impliquant sa dégradation photochimique. Ces processus conduisent à la formation des produits qui peuvent présenter un caractère environnemental plus ou moins nocif comparé aux molécules parentes. Il apparaît donc nécessaire de connaître les cinétiques et les mécanismes de ces réactions pour pouvoir évaluer la persistance et l'impact atmosphérique des composés phytosanitaires et leurs produits de dégradation. C'est dans ce contexte que se situent nos travaux de recherche qui consistent à déterminer les paramètres cinétiques et mécanistiques des pesticides sous l'action des principaux photo-oxydants atmosphériques.

L'approche utilisée consiste à exposer un média solide (plaques en quartz ou du sable) contaminé par le pesticide à une atmosphère oxydante (riche en ozone ou en radicaux OH). Le suivi de la concentration des oxydants, celle des pesticides et leurs produits permet de déterminer les constantes cinétiques des réactions et d'élaborer un mécanisme réactionnel.

Ces dernières années nous avons étudié la dégradation atmosphérique, en phase particulaire du diméthomorphe, du folpel, du bupirimate et du chlorpyrifos éthyl ainsi que de certains de leurs métabolites.

Plusieurs conclusions ont été déduites de nos résultats :

- Les constantes d'oxydation atmosphérique, en phase hétérogène, des pesticides étudiés varient (molécule⁻¹e- cm³ s⁻¹) de 10⁻²¹ à 10⁻¹⁷ dans le cas de l'ozonolyse et de 10⁻¹⁴ à 10⁻¹², dans le cas des réactions avec les radicaux OH. Ces plages de réactivité montrent que ces processus dépendent fortement de la structure chimique des composés étudiés.
- Les études qui ont été réalisées en phase gazeuse concernant la réactivité des pesticides avec les radicaux OH montrent que ces composés sont très réactifs. Toutes les constantes de vitesse déterminées dépassent largement 10⁻¹¹ cm³ molécule⁻¹ s⁻¹. En outre les estimations des constantes de vitesse par les méthodes SAR (EPI, AOPWIN) confirment cette tendance : la réactivité, en phase gazeuse de ces composés vis-à-vis des radicaux OH est largement supérieure à celle obtenue en phase hétérogène. Cette différence montre que le mode d'action du radical OH en phase hétérogène est totalement différent de celui en phase gazeuse d'une part et d'autre part d'autre part que la nature du support a un effet inhibiteur sur la réaction.
- La dégradation des pesticides engendrent d'autres polluants secondaires volatils qui peuvent être transférés en phase gazeuse et non volatils et qui restent dans la phase particulaire. Par ailleurs, leurs réactivités peuvent être plus ou moins élevées que la molécule mère, tout dépend de la structure chimique du produit de dégradation et celle de la molécule parente. En outre, le taux de formation de ces polluants secondaires est indépendant du taux de contamination des particules.
- En termes de persistance, les études effectuées sur des plaques de quartz contaminées par les pesticides ont montré que la durée de vie de ces composés est relativement faible. La plupart des pesticides étudiés ont une durée de quelques jours.
- Les études concernant l'influence de taux contamination des particules de sable par les pesticides sur l'ozonolyse ont montré que la persistance des pesticides dans la phase particulaire atmosphérique est fortement impactée par le taux de contamination. La constante cinétique d'ozonolyse hétérogène décroît exponentiellement avec l'augmentation de la quantité de pesticide par unité de masse de particule. En conséquence la durée de vie du pesticide sur le sable relativement à l'ozone est fortement liée au taux de contamination initial : elle varie entre quelques jours à taux de contamination proche de zéro jusqu'à plusieurs mois à fort taux de contamination.

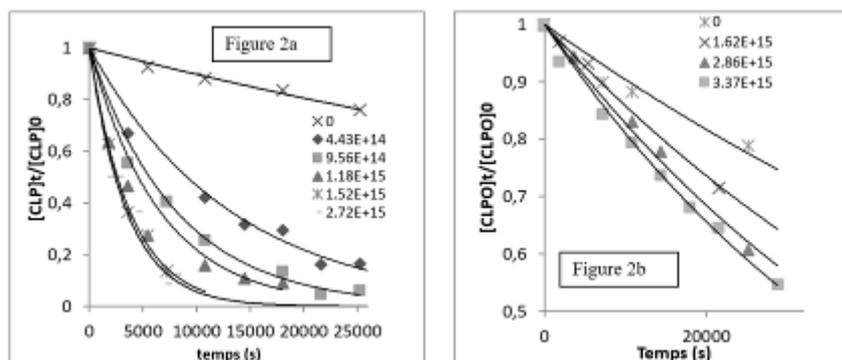


Figure2 représentant la comparaison de l'ozonolyse de pesticide CLP (figure 1a) et son métabolite CLPO (figure 1b) à différentes concentrations de O_3

Rayonnement et attractivité académiques –RPA

L'équipe RPA a développé plusieurs collaborations d'ordre nationales et internationales. L'équipe a ainsi coordonné des projets collaboratifs Hubert Curien : Volubilis, PHC Maghreb et un projet OTAN. Ces programmes ont permis le financement de plusieurs thèses en cotutelle. Sur le plan National l'équipe a coordonné des projets de chimie atmosphérique LEFE/CHAT. Sur le plan local l'équipe a participé au projet CPER-AQUAL.

En ce qui concerne l'organisation des manifestations scientifiques, en collaboration avec l'ENSA d'Agadir l'équipe a organisé le **1^{er} colloque Francophone POGAT** : Polluants Atmosphériques Générés l'Agriculture et le Transport. Lieu : Agadir, Novembre 2011. Par ailleurs la **XXXVI^{ème} édition du colloque annuel du Groupe Français de Cinétique et Photochimie (GFCP)** sera organisée par l'équipe RPA du 31 mai au 1^{er} juin 2016.

- Expertise et évaluation des projets soumises dans le cadre de l'appel d'offre INSU, Océan Atmosphère programme national inter-organismes sur « Les Enveloppes Fluides et l'Environnement » (LEFE).
- Expertise et évaluation des thèses de doctorats et HDR en tant que rapporteurs et examinateurs au niveau national et international.

- *les listes des contrats institutionnels sur financements publics et caritatifs (ARC, ANR, contrats européens, etc.)*

Nom du projet	Dates début-fin	Type d'AAP	Financement (Total/Unité)	Partenaires
Projet collaboratif LEFE/CHAT	2012-2015	INSU	45 k€ / ≈ 20 k€	Ecole des mines de douai, Institut de Physique de Rennes
Projets (PAI)	2014-2015	URCA	13k€	/
AQUAL	2008-2014	CPER	200 k€	6 laboratoires URCA
Volubilis	2010-2013	PHC	24 k€	ENSA d'Agadir
PHC Maghreb	2015-2017	PHC	25 k€/an pour le GSMA	ENSA d'Agadir /ENSAT Tunis/ Université de Telemann
Projet Ministère de l'Outre Mer - ELEP	2010-2012	Ministère de l'Outre-Mer	30 k€	l'université de N ^{elle} Calédonie
Projet BQR	2011	URCA	12 k€	/

Implication dans la formation par la recherche-RPA

Depuis 2012, 5 doctorants, formés au sein de l'équipe RPA, ont soutenu leurs thèses de l'Université de Reims. En outre, l'équipe RPA a participé activement dans la création d'une mention orientée vers les sciences de l'environnement à savoir la mention **Génie des Environnements naturels et Industriels (GENI)** (sondage du marché, contact avec les professionnels, rédaction des maquettes). E. ROTH est ainsi la responsable du MASTER 2 « Management de l'Environnement Déchets et Énergie, MEDE » (URCA,

ouverture en septembre 2012) et Mr A. CHAKIR est responsable du MASTER 1 Génie des Environnements naturels et Industriels (GENI)» (URCA, ouverture en septembre 2012). Les deux permanents de l'équipe encadrent des projets et des stages de fin d'études pour les masters M1 et M2 GENI, en moyenne 10 à 15 stagiaires par an.

Thèses encadrées sur la période 2011-2015:

NOM Prénom du doctorant	NOM Prénom du ou des directeurs de thèse	Dates de début et de fin	Type de financement
Mariam EL RACHID	CHAKIR/ROTH	2008-2012	Région
Mohamed ERRAMI	CHAKIR/ROTH	2009-2012	PHC Volubilis
Lyamin MESSAADIA	CHAKIR	2009-2013	PROFAS
Ahmad EL-MASRI	CHAKIR/ROTH	2011-2014	CPER-AQUAL
Houceine Bouya	CHAKIR	2012-2015	PHC Volubilis/PHC Maghreb
Carmen KALALIAN	A .Chakir\E. Roth	2015- ...	Ministère

2.5. Réalisations: équipe ECA

Au 1^{er} janvier 2012, une nouvelle équipe a vu le jour au GSMA autour d'un petit groupe de chercheurs, issus d'horizons divers. L'équipe est composée de 3 enseignants-chercheurs : 2 professeurs et un maître de conférence. Au cours des dernières décennies, il s'est développé une science considérable des bulles et des mousses. Physiciens, chimistes et mathématiciens se sont passionnés pour ces objets fragiles aux propriétés extraordinaires²². Cependant, assez peu de scientifiques ont choisi de se pencher sur les bulles et la mousse du champagne et des vins effervescents. Pourtant, dans le petit volume de champagne ou de vin circonscrit par une flûte, on retrouve toutes les étapes de la vie d'une bulle. Elle naît sur une particule immergée, elle se développe dans la flûte en rejoignant la surface, où inexorablement elle vieillit, puis finit par disparaître²³. L'activité première de notre équipe s'articule autour des processus physicochimiques liés aux phénomènes d'effervescence et de mousse (en œnologie, mais plus largement dans les liquides chargés en gaz dissous). Les phénomènes d'ingestion et de désorption de gaz dissous par une phase liquide retiennent donc toute notre attention²⁴. La transdisciplinarité est au cœur de notre démarche.

NOM Prénom	Période	Activité
LIGER-BELAIR Gérard	2012-2016	Responsable d'équipe PR1
PARVITTE Bertrand	2012-2016	PR1 (20% équipe ECA)
CILINDRE Clara	2013-2016	MC

Personnels non- permanents de l'équipe

NOM Prénom du doctorant	NOM Prénom du ou des directeurs de thèse	Dates de début et de fin	Type de financement
MORIAUX Anne-Laure	ZENINARI/LIGER-BELAIR 50% avec « Effervescence»	2015-	Ministère

Production scientifique – ECA

	2011	2012	2013	2014	2015	2016	TOTAL
Journaux internationaux avec comité de lecture référencés (ACL de rang A)	3	8	5	5	8	4	33
Brevets	0	0	0	0	0		0
Journaux nationaux avec comité de lecture	2	0	0	1	1		4
Ouvrages et Chapitres d'ouvrage	1	1	4	2	5		13
Communications orales invitées (INV)	7	9	5	4	5		30
Communications internationales avec actes (ACTI)		3		1			4
Communications orales internationales	1	1	1	4	2		9
Communications orales nationales			6		1		7
Communications par affiche	6	2	5	4	2		19

Vous trouverez ci-après le bilan des travaux menés au sein de l'équipe ECA au cours du quinquennal 2011-2015, ainsi que les principales collaborations nationales et internationales mises en place pour mener à bien ces projets.

²² De Gennes et Badoz. *Les objets fragiles*, Plon, Paris, **1994**.

²³ Liger-Belair et al. *J. Agric. Food Chem.* **53**, 2788, **2005**; Liger-Belair et al. *Chem. Soc. Rev.* **37**, 2490, **2008**; Liger-Belair. *Eur. Phys. J. Special Topics* **201**, 1, **2012**

²⁴ Liger-Belair et al. *J. Agric. Food Chem.* **53**, 2788, **2005**; Liger-Belair et al. *Chem Soc Rev.* **37**, 2490, **2008**; Liger-Belair. *Eur. Phys. J. Special Topics* **201**, 1, **2012**

1. Application de la dynamique moléculaire à l'étude du CO₂ dissous

Les processus responsables de la nucléation et du grossissement des bulles dans les liquides sursaturés en gaz dissous sont aujourd'hui mieux compris²⁵. Cependant, des interrogations demeurent quant à la dynamique des bulles dans certaines boissons effervescentes, et dans le champagne en particulier. Pourquoi certains champagnes présentent de petites bulles alors que d'autres présentent de grosses bulles (à teneur équivalente en CO₂) ? Pourquoi la cinétique de dégazage d'un vin de Champagne apparaît de toute évidence plus lente que celle d'une eau gazeuse ou d'un soda ?

Les avancées récentes dans le domaine de la dynamique moléculaire peuvent nous aider à mieux cerner le comportement de cette molécule à l'état dissous. Les bonnes relations avec la société informatique BULL qui équipe le supercalculateur de l'URCA nous ont permis de mettre en place une thèse de doctorat financée par une bourse CIFRE. Cette thèse réalisée en collaboration étroite avec l'équipe **Physique Moléculaire Théorique et Modélisation Numérique** et soutenue en décembre 2014 a conduit à des résultats très novateurs.

Un protocole robuste de simulation a été mis en place afin de calculer les coefficients de diffusion du dioxyde de carbone et de l'éthanol dans le champagne. En proportions relatives, le système « champagne » est composé en première approximation de 50 molécules de CO₂, de 440 molécules d'éthanol et de 10 000 molécules d'eau (**figure 1**). Le modèle d'eau initialement utilisé est le modèle à 5 atomes TIP5P.

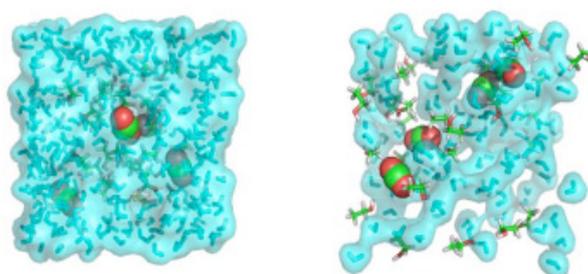


Figure 1 : modélisation de la dynamique de quelques molécules de CO₂ au sein d'une solution eau-éthanol à 12,5 % v/v.

Les valeurs calculées concernant la diffusion du CO₂ dans l'eau étant supérieures à celles de la littérature, il a été décidé de relancer le protocole avec cette fois un modèle d'eau à 3 atomes, le modèle SPC/E. Avec ce modèle, la valeur du coefficient de diffusion du CO₂ dans l'eau issue des simulations est en très bon accord avec les données de la littérature. En revanche, pour le CO₂ dans le champagne, la valeur est très inférieure à celle obtenue avec le modèle TIP5P. Pour comprendre ces différences, nous avons étudié la formation de liaisons hydrogène tout au long des simulations avec les deux modèles d'eau. Ce travail a bénéficié de 650 000 heures de calcul sur le supercalculateur Curie au TGCC. Les simulations ont été menées, avec le logiciel GROMACS, à des températures qui s'étalent de 277 à 293 K et à la pression atmosphérique de 1 bar. Les valeurs numériques du coefficient de diffusion ont été comparées avec une série de données expérimentales déterminées par RMN. Ces travaux ont fait l'objet de deux articles publiés dans des revues de l'**American Chemical Society**²⁶.

2. Applications de la chromatographie en phase gazeuse et de la spectrométrie laser à l'étude de la désorption du CO₂ et des composés organiques volatils hors d'un vin de Champagne

Le phénomène d'effervescence qui caractérise les vins de Champagne ou les boissons gazeuses au sens large est la manifestation visuelle évidente du processus de désorption du gaz carbonique dissous. Néanmoins, outre la formation de bulles pendant cette phase transitoire de dégazage, le CO₂ en solution va également s'échapper directement par diffusion à travers la surface libre. Dans une flûte de champagne, une estimation de l'importance relative du dégazage par formation de bulles par rapport au dégazage par

²⁵ Lugli and Zerbetto. Phys. Chem. Chem. Phys. 9, 2447, **2007**; Liger-Belair. J. Phys. Chem. B 118, 3156, **2014**

²⁶ Perret et al. J. Phys. Chem. B 118, 1839, **2014** ; Bonhommeau et al. J. Phys. Chem. Lett. 5, 4232, **2014**

diffusion à travers la surface libre a été effectuée dans un précédent travail²⁷. Nous retiendrons comme ordre de grandeur, que dans une flûte classique, environ 20 % des molécules de CO₂ s'échappent par formation de bulles, contre 80 % qui s'échappent directement par la surface libre.

Les interactions du CO₂ avec les molécules aromatiques et l'effet éventuel d'un excès ou d'un déficit de CO₂ lors d'une dégustation n'ont fait l'objet d'aucun travail analytique. Une première étape dans la compréhension du rôle du CO₂ passe nécessairement par son dosage fin dans l'espace de tête au dessus de la flûte ou de la coupe. La détection et la mesure du CO₂ se basent sur l'emploi de techniques de type GC (chromatographie en phase gazeuse) et de mesures par spectroscopie à diode laser infrarouge bien maîtrisées au GSMA pour la mesure du CO₂ atmosphérique²⁸. Un travail préliminaire entre le GSMA et l'URVVC a permis de mettre en place un spectromètre laser infrarouge susceptible de détecter la diffusion du CO₂ gazeux au buvant d'une flûte de champagne (**Figure 2**)²⁹.

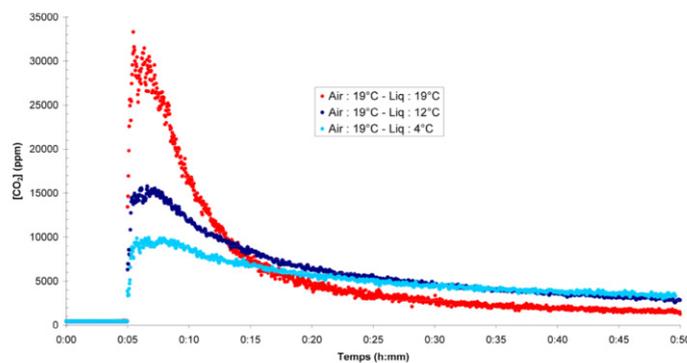


Figure 2 : Concentrations en CO₂ gazeux relevées au buvant d'une flûte de champagne au cours des 45 minutes qui suivent le versement (pour trois températures de service).

Des études comparatives de la désorption simultanée du CO₂ et de l'éthanol hors d'un vin de Champagne (par μ GC et imagerie infrarouge), servi en flûte ou en coupe, ont donné lieu à une première série de résultats qui démontrent clairement l'influence de la géométrie du verre et des conditions d'effervescence sur la cinétique de désorption des composés organiques volatils (COVs) qu'il contient³⁰.

A ce jour, les interactions du CO₂ avec les composés organiques volatils (aromatiques), tel que l'éthanol, et l'effet éventuel d'un excès ou d'un déficit de CO₂ lors d'une dégustation n'ont fait l'objet d'aucun travail analytique rigoureux. Nous souhaitons désormais optimiser cette détection simultanée du CO₂, de l'éthanol et de certains COVs en l'étendant à l'espace tridimensionnel au-dessus du buvant des verres, en conditions de dégustation (toujours par spectrométrie laser, chromatographie gazeuse et imagerie infrarouge). Une thèse de doctorat vient de débiter en septembre 2015 sur ce thème, en collaboration étroite avec l'équipe **Spectrométrie Laser et Applications**, ainsi que le **GRESPI** de l'URCA. Il est à noter que ce travail se poursuit en lien étroit avec l'interprofession champenoise et quelques Maisons de Champagne soucieuses de proposer aux consommateurs des verres à dégustation optimisés pour la dégustation des vins de Champagne.

3. Effervescence et production d'aérosols

Des centaines de bulles éclatent chaque seconde au cours des quelques minutes qui suivent le service d'une flûte de champagne. La surface du liquide est alors piquetée de centaines de jets minuscules qui se brisent en de fines gouttelettes libérant ainsi un « aérosol de champagne »³¹. Les gouttelettes de liquide

²⁷ Liger-Belair. Ann. Phys. (Paris) 27, 1, 2002

²⁸ Joly et al. Applied Phys. B 86, 743, 2007

²⁹ Mulier. PhD Thesis, 2009; Mulier et al. Applied Phys. B 94, 725, 2009

³⁰ Cilindre et al. J. Agric. Food Chem. 59, 7317, 2011 ; Liger-Belair et al. PLoS ONE 7, e30628, 2012 ; Bourget et al. J. Vis. (Japan) 16, 47, 2013 ; Liger-Belair et al. Food Res. Int. 54, 516, 2013

³¹ Liger-Belair et al. Am. J. Enol. Vitic. 52, 88, 2001 ; Liger-Belair et al. Bubble Sci. Eng. Technol. 4,21, 2012

projetées par les éclatements de bulles quelques centimètres au dessus de la surface permettent de stimuler les nocicepteurs (récepteurs de la douleur) situés dans le nez. Outre cette stimulation strictement mécanique, l'éclatement des bulles joue aussi un rôle majeur dans la libération des arômes qu'il recèle. Il y a quelques années, un partenariat entre l'URCA et le Professeur Philippe Schmitt Kopplin du laboratoire de biogéochimie analytique de l'université de Munich, a montré (par l'emploi de la spectrométrie de masse à ultra-haute résolution) qu'un phénomène de surconcentration de certains composés tensioactifs et pour certains aromatiques, apparaissait au niveau des gouttelettes (**Figure 3**)³².

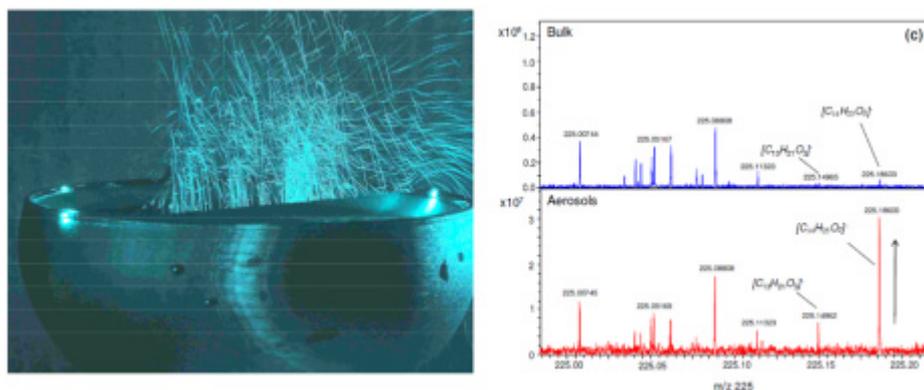


Figure 3 : Mise en évidence, par FT-ICR-MS, de quelques molécules présentes en surconcentrations dans les aérosols projetés par les bulles qui éclatent à la surface d'une flûte de champagne (par rapport à leur concentration initiale dans le champagne du cœur de phase de la flûte).

Notons que les aérosols marins, produits par l'action combinée du vent, des vagues qui déferlent et de l'éclatement de bulles à la surface des océans, recèlent eux aussi des concentrations en molécules tensioactives et autres sels dissous très supérieures par rapport aux eaux de surface dont ils proviennent. Cette similitude de principe entre aérosols marins et aérosols de champagne a donné lieu à une publication commune avec des collègues océanographes³³.

A la suite de ce travail, nous nous sommes donc naturellement posé la question du rôle joué par les paramètres de l'effervescence dans une flûte sur cet effet de surconcentration détecté dans l'aérosol et la perception que le dégustateur en aura. Un stage postdoctoral (du programme CPER Vinéal 2007-2012) a débuté entre notre équipe et l'Institut Jean Le Rond d'Alembert (Paris 6) dirigé par le Professeur Stéphane Zaleski. Cet Institut possède en son sein des modélisateurs et des expérimentateurs avec qui nous avons engagé un partenariat sur cette thématique de la production d'aérosols en fonction des paramètres d'effervescence en conditions de dégustation. A partir de 2012, les docteurs Thomas Séon et Elisabeth Ghabache, de l'Institut Jean Le Rond d'Alembert, ont mis en place des expériences destinées à suivre finement – avec une résolution spatiale et temporelle inégalées jusqu'à présent – la production de gouttelettes engendrées par l'éclatement de bulles de tailles variables (générées par des capillaires de diamètres variables) dans de l'eau pure (**Figure 4**). Le rôle fondamental de la viscosité de la phase liquide sur la vitesse, le nombre et la taille des gouttelettes produites par l'éclatement d'une bulle a été mis en évidence³⁴. Or, on sait bien que la viscosité du champagne varie, selon son caractère plus ou moins sucré, mais aussi et surtout selon sa température de service³⁵.

³² Liger-Belair et al. Proc. Natl. Acad. Sci. USA. 106, 16545, 2009

³³ Schmitt-Kopplin et al. Biogeosciences 9, 1571, 2012.

³⁴ Ghabache et al. Phys. Fluids 26, 121701, 2014

³⁵ Liger-Belair. Ann. Phys. (Paris) 31, 1, 2006 ; Liger-Belair et al. Eur. Phys. J. Special Topics 201, 1, 2012



Figure 4 : Séquence qui illustre les détails de la production de gouttelettes engendrée par l'éclatement d'une bulle millimétrique dans de l'eau pure (Cliché E. Ghabache).

Ce dispositif expérimental a donc été tout naturellement utilisé dans le cadre d'un travail collaboratif destiné à mieux comprendre la production d'aérosols qui caractérisent la dégustation des vins de Champagne. En première approche, le champagne a été remplacé par une solution modèle faite d'un mélange d'eau, d'éthanol et de glycérol (de même viscosité et de même tension de surface que le champagne). Le rôle de la température a même été mimé en augmentant la proportion de glycérol, et ce afin de reproduire l'augmentation de la viscosité dynamique du champagne liée à la décroissance de sa température. En parallèle de cette approche expérimentale, un modèle numérique a été construit (sur la base des résultats de l'étude expérimentale) qui permet de quantifier la masse de fluide évaporé lors du trajet des gouttelettes projetées par l'éclatement des bulles.

L'idée sous-jacente est de faire le lien entre la masse de fluide évaporée par l'aérosol de champagne et les paramètres caractéristiques de l'effervescence (i.e., la fréquence d'éclatement des bulles, leurs tailles ainsi que la viscosité de la phase liquide). Les premiers résultats de ces travaux sont soumis dans la revue généraliste *Nature Communications*³⁶.

4. Instabilités hydrodynamiques dans des solutions carbonatées

Ce projet comporte trois volets. Le premier concerne l'examen fin de la dynamique de dissolution et « d'ingestion » de CO₂ dans l'eau et les solutions aqueuses au sens large. Le deuxième s'adresse au processus inverse qui décrit la désorption du CO₂ par le fluide en condition de sursaturation. Le troisième volet enfin a pour ambition de décrire et de mieux comprendre un phénomène redouté des élaborateurs de champagne et de vins effervescents : le gerbage.

4.1. Dissolution du CO₂ et recirculation induite dans des systèmes modèles

Contrairement à ce qu'on pourrait croire, la dissolution du CO₂ en solution aqueuse ne s'effectue pas simplement par diffusion moléculaire. En effet, la dissolution du CO₂ au voisinage de la surface libre crée une couche dense. Globalement, le système présente un gradient vertical de densité, ce qui conduit à un écoulement. Il s'agit d'une instabilité hydrodynamique, dite « instabilité de mise en pression », ou IMP. Notons d'ailleurs que dans la perspective actuelle qui consiste à envisager la séquestration du CO₂ à grande profondeur, l'IMP que nous étudions ici à petite échelle rejoint certains des travaux menés ailleurs sur la dissolution du CO₂ en milieu poreux aquifère à méso échelle³⁷.

Ce volet a fait l'objet d'un travail de thèse (engagée sur le CPER Vinéal 2007-2012) en partenariat avec le **Centre de Recherche Paul Pascal** de Bordeaux et le **CEA** et soutenue en avril 2015. De façon générale, les expériences sur l'IMP consistent à mettre en pression une solution aqueuse sous atmosphère de CO₂. Lorsque la pression est appliquée, la solution, initialement à l'équilibre, ingère du gaz carbonique au travers de la surface libre. Cette couche diffuse, dans les conditions ordinaires, se déstabilise sous l'action de la gravité. Suivant la géométrie et les dimensions du récipient, on observe des ondulations caractéristiques du front de diffusion, qui croissent et provoquent des écoulements de recirculation au sein du liquide, avec des figures dites de « panaches ». Nous avons d'abord traité le cas de tubes cylindriques étroits, où

³⁶ Ghabache et al. Nat. Com., soumis, 2015

³⁷ Backhaus et al. Phys. Rev. Lett. 106, 104501, 2011

l'écoulement est contraint jusqu'à isoler un seul panache³⁸. Dans ces situations, les caractéristiques de l'écoulement dépendent fortement du diamètre de tube et de la forme du ménisque³⁹. Nous nous sommes ensuite concentrés sur les motifs de déstabilisation en cuve rectangulaire, en variant la pression appliquée et les dimensions des cuves (**figure 5**). L'analyse quantitative de la déstabilisation du front de diffusion est une étape délicate, pour laquelle la classique décomposition en série de Fourier est inopérante. Nous avons du mettre au point un procédé plus élaboré en utilisant une analyse en ondelettes. Ce procédé permet de décomposer les motifs de croissance en modes, dont le calcul donne les longueurs d'onde et taux de croissance⁴⁰.

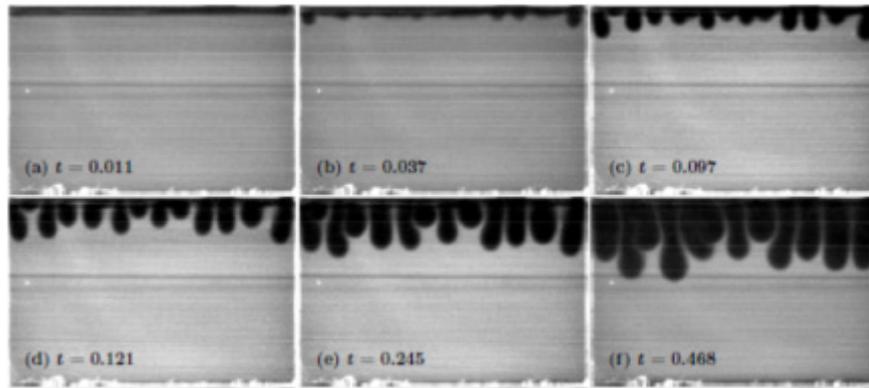


Figure 5 : Séquence qui illustre les détails de la déstabilisation du front de diffusion qui conduit à la recirculation du fluide sous forme d'un processus de digitation (Cliché A. Vreme et F. Nadal).

4.2. Désorption du CO₂ et recirculation induite, in situ, en conditions de dégustation

Le dégagement de bulles par une boisson gazeuse est un exemple de nucléation hétérogène dans une solution sursaturée. Le bullage, amorcé par des micro-cavités ou des hétérogénéités de composition à la surface du verre, engendre en retour une recirculation du fluide, essentiellement par effet visqueux. Ce volet a fait l'objet d'un travail de thèse⁴¹ (menée en partenariat avec le GRESPI de l'URCA) soutenue en décembre 2014. La **figure 6a** montre l'effet obtenu avec un anneau gravé circulaire, concentrique de l'axe de la flûte. L'anneau crée un flux ascendant de bulles, qui à son tour déclenche une convection générale dans le fluide. Au voisinage de l'anneau et dans la majeure partie du volume au-dessus, la convection présente une symétrie cylindrique, de façon non surprenante compte tenu de la configuration de la source et du récipient. De nombreuses observations in situ (en conditions de dégustation, dans diverses formes de verres et de flûtes) ont été menées⁴². Le problème a également été abordé du point de vue de la modélisation numérique et avec succès par le doctorant⁴³.

Cependant, et de façon non triviale, la symétrie cylindrique est brutalement brisée au voisinage de la surface libre, où on observe une série de tourbillons régulièrement répartis (**figure 6b**). Leur nombre est variable en fonction du temps et des conditions de l'expérience⁴⁴. Aucune explication formelle de l'effet n'est connue à l'heure actuelle et les investigations se poursuivent.

³⁸ Nadal et al. *J. Fluid Mech.* 719, 203, 2013.

³⁹ Vreme et al. "Plumes induced by carbon dioxide dissolution in water", Congrès SFP Marseille 2-5 juillet 2013.

⁴⁰ Vreme et al. *J. Fluid Mech.*, sous presse, 2015.

⁴¹ Beaumont. PhD Thesis, 2014.

⁴² Liger-Belair et al. *Bubble Sci. Eng. and Technol.* 4, 35, 2012 ; Beaumont et al. *Journal of Flow Visualization and Image Processing* 19, 279, 2012 ; Beaumont et al. *Exp. Fluids* 56, 170, 2015.

⁴³ Beaumont et al. *Advances in Mechanical Engineering*, ID 156430, 2013 ; Beaumont et al. *International Journal of Numerical Methods for Heat and Fluid Flow*, 24, 563, 2014.

⁴⁴ Liger-Belair et al. In: *Advances in Food and Nutrition Research*, Elsevier, 67, 289, 2012 ; Liger-Belair et Polidori, *Nouveau voyage au cœur d'une bulle de champagne*, Odile Jacob, 2015.



Figure 6 : Lignes de courant, obtenues par tomographie laser, qui illustrent l'allure des tourbillons qui agitent le cœur du fluide (a) et sa surface (b).

4.3. Une désorption du CO₂ explosive : le gerbage des vins de Champagne

Les quelques millièmes de secondes qui accompagnent le débouchage d'une bouteille de champagne s'inscrivent aujourd'hui dans un programme de recherche récent dont le but avéré est de mieux comprendre un phénomène redouté des élaborateurs de vins effervescents: le gerbage. Le gerbage consiste en une production rapide et très excessive de bulles et de mousse à l'ouverture de la bouteille⁴⁵. Lorsqu'il survient, cela se produit généralement au cours du dégorgement, avant l'étape de dosage. Outre la perte de vin qu'il occasionne, le gerbage peut ralentir la cadence de production de manière très significative, et une hétérogénéité aromatique des vins. Lors de son débouchage, une bouteille gerbeuse peut perdre plus de la moitié du volume de champagne qu'elle contient. Les pilotes de F1 provoquent le gerbage en agitant vigoureusement la bouteille. Or, contrairement à une croyance populaire tenace, secouer la bouteille n'augmente pas la pression en son sein, comme nous venons de le démontrer récemment⁴⁶. Cette agitation vigoureuse force le gaz carbonique présent sous le bouchon à se mélanger au reste du liquide, permettant ainsi l'emprisonnement de milliers de microscopiques bulles de gaz sous la surface²⁴. Au moment de l'ouverture, la chute brutale de pression provoque une telle expansion de ces bulles qu'elles envahissent la bouteille, entraînant avec elles le liquide sous la forme d'un puissant jet de mousse.

Cependant, les cas de gerbage dans l'industrie se produisent souvent sans que les bouteilles aient été agitées de façon inconsidérée. Il convient donc de mieux comprendre l'origine physique du phénomène si on veut espérer pouvoir l'éradiquer, ce qui nous a conduit à mettre en place un travail exploratoire en 2014 (sous la forme d'un **projet incitatif amont**). Une série d'observations a été conduite en collaboration avec deux partenaires industriels : le bouchonnier portugais AMORIM (numéro un du bouchage liège dans le monde) et le champagne POMMERY (l'un des partenaires historiques de nos travaux sur l'effervescence). Pour cette série d'expériences nous disposons de trente bouteilles de champagne rosé, tirées à 24 g/L de sucre et embouteillées en verre blanc et bouchées avec un lot de bouchons traditionnels. 48 heures avant de réaliser les prises de vues, les bouteilles furent réparties en trois lots stockés respectivement à 6, 12 et 20 °C, en position couchée.

Nous noterons qu'à basse température, aucune bouteille n'a gerbé au débouchage. Dans le cas de celles du lot à 12°C la situation est moins tranchée. Certaines ont gerbé, d'autres pas. La séquence de la **figure 7**

⁴⁵ Liger-Belair et al. J. Food Eng. 116, 78, 2013 ; Liger-Belair et al. Rev Oenol. Fr. 147, 47, 2013

⁴⁶ Vreme et al. J. Colloid Interface Sci. 439, 42, 2015

présente la chronologie des événements qui surviennent lors de la première seconde qui suit le débouchage d'une bouteille stockée à 20 °C⁴⁷. Contrairement aux bouteilles des lots stockés à 6 et à 12 °C, ces bouteilles à 20 °C ont systématiquement gerbé. De plus, nous avons été surpris de découvrir un panache de condensation bleu azur lors du débouchage des bouteilles de ce lot. Pour les bouteilles stockées à 6 et à 12 °C le panache apparaît plus classiquement blanc-gris. En effet, selon la théorie de la diffusion de la lumière de Lord Rayleigh, si la taille des gouttelettes du panache qui diffusent la lumière ambiante devient très inférieure aux longueurs d'onde du spectre de la lumière ambiante (qui varient de 0,4 µm pour le bleu à 0,8 µm pour le rouge), la diffusion de la lumière se fait bien plus efficacement pour les petites longueurs d'onde du spectre visible (celles de la lumière bleue). Cette observation pour le moins inattendue traduit d'ailleurs l'importance de la sérendipité en science⁴⁸ !

C'est la chronologie des événements qui conduit parfois à ce type de gerbage dit « explosif » qui retient aujourd'hui toute notre attention. Ces travaux sur le gerbage se poursuivent en lien étroit avec l'interprofession champenoise désireuse de comprendre l'origine du phénomène et de s'en prémunir à l'avenir. Nous ambitionnons de poursuivre ces travaux sur le gerbage en mettant en place une thèse CIFRE avec l'interprofession.

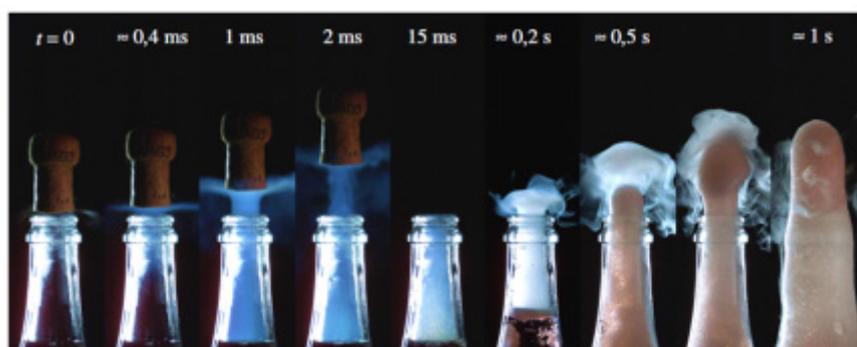


Figure 7 : Chronologie des événements qui accompagnent la première seconde qui suit le débouchage d'une bouteille à 20 °C. Un nuage de condensation bleuté apparaît 0,4 ms après le débouchage, pour s'évaporer 2 ms plus tard. Au bout d'une quinzaine de millisecondes, la surface du champagne se hérissé d'une multitude de jets qui atomisent littéralement l'interface et projettent des gouttelettes hors du col²⁴. Vers 200 ms, des bulles envahissent progressivement le col de la bouteille. Une demi-seconde après son débouchage les bulles ont envahi le col de la bouteille qui gerbe alors en un puissant jet de mousse, qui la videra de près d'un quart de son volume.

5. Métabolomique appliquée aux vins de Champagne

Depuis 2007, nous avons mis en place cette approche métabolomique en initiant une collaboration étroite avec Philippe Schmitt-Kopplin (Institute for Ecological Chemistry - Helmholtz Zentrum German Research Center, München). Une première étude en collaboration avec Régis Gougeon de l'Institut Universitaire de la Vigne et du Vin de l'Université de Bourgogne a été publiée en 2009 sur l'identification des molécules se retrouvant préférentiellement dans les «micro-gouttelettes» formées lors de l'éclatement des bulles de champagne.⁴⁹ Nous avons utilisé une approche non ciblée, la spectrométrie de masse à transformée de Fourier à ultra haute résolution (FT-ICR-MS), dévoilant des empreintes chimiques différentes entre le cœur du champagne et l'aérosol formé. Grâce, d'une part, à une détermination précise de leurs masses et de leurs formules élémentaires et, d'autre part, à l'utilisation d'outils discriminants ou de bases de données (MassTriX, KEGG, SciFinder), des dizaines de composés surconcentrés dans les gouttelettes et pouvant être associés à des composés présentant un intérêt organoleptique ont été identifiés. La plupart de ces composés, tensioactifs pour la plupart, proviennent du raisin, de la levure ou des transformations subies au cours des fermentations alcooliques et autres étapes de la fabrication du champagne. Les bulles sont donc

⁴⁷ Liger-Belair et al. Rev. Oenol. Fr. 155, 53, 2015

⁴⁸ Liger-Belair et al. J. Food Eng. soumis, 2015

⁴⁹ Liger-Belair et al, PNAS 16, 16545, 2009

autant de “mini ascenseurs” pour les molécules amphiphiles potentiellement aromatiques qui viennent s’y adsorber et ainsi rejoindre la surface.

Dans le cadre d’une collaboration entre notre équipe, l’ICMR (URCA) et l’Helmoltz Zentrum, nous avons utilisé une seconde approche non ciblée, la RMN, pour établir le profil métabolomique d’échantillons de raisins, moûts et vins, botrytisés et sains. Une analyse statistique multivariée a clairement montré que des vins préparés à partir de raisins sains et des vins préparés à partir de raisins infectés peuvent être différenciés sur la base d’un certain nombre de métabolites particuliers. Ces différences peuvent permettre d’expliquer comment *Botrytis cinerea* peut affecter les processus fermentaires (retard dans la fermentation alcoolique en particulier). Les résultats ouvrent également des perspectives sur l’identification de nouveaux marqueurs métaboliques au cours du développement de la pourriture grise sur des raisins.⁵⁰

Cette même approche a permis l’analyse fine du champagne mis à jour dans de très vieilles bouteilles de la maison Veuve Clicquot, retrouvées en mer Baltique au cours de l’été 2010. L’analyse fine de ces vins conservés dans des conditions optimales de température, de luminosité et de pression (par FT-ICR-MS, RMN et GC-MS) a permis de révéler l’incroyable diversité chimique et aromatique de ces champagnes élaborés en 1840 par Mme Clicquot ! Cette étude, fruit d’une longue collaboration entre le Professeur Philippe Jeandet (URVVC), le Professeur Philippe Schmitt-Kopplin (Helmoltz Zentrum), l’IVV (Dijon), la société Twist-Aroma, la maison de Champagne Veuve Clicquot et notre équipe du GSMA a été valorisée dans les PNAS⁵¹ et a été reprise dans beaucoup de médias scientifiques ou à destination du grand public⁵².

La liste exhaustive des réalisations et produits de la recherche de l’équipe ECA figure en annexe 6.

Rayonnement et attractivité académiques-ECA

La science du champagne au sens large et les mécanismes liés à l’effervescence en particulier sont des thématiques développées depuis une quinzaine d’années à l’URCA. Elles ont été porteuses d’innovations et sont des vecteurs de communication très positifs pour la région Champagne-Ardenne, à l’échelle nationale et internationale. L’effervescence est un marqueur fort de l’identité champenoise, ce qui en fait une vitrine susceptible d’attirer, au sens le plus noble du terme : étudiants, chercheurs, journalistes, industriels...français et étrangers. L’équipe Effervescence, Champagne et Applications (ECA) a acquis un leadership reconnu autour de la bulle.

Le caractère multidisciplinaire des travaux que nous menons nécessite bien entendu des collaborations avec d’autres structures académiques. Depuis sa création en 2012, l’équipe ECA collabore activement avec d’autres centres de recherche nationaux : l’Institut Jules Guyot (Université de Bourgogne), le Centre de Recherche Paul Pascal (Bordeaux), le CEA de Bordeaux et l’Institut Jean Le Rond D’Alembert (Université Paris 6).

Depuis 2007, nous travaillons avec le German Research Center For Environmental Health (Helmoltz Zentrum, München) sur des approches métabolomiques pour la caractérisation chimique des vins de Champagne par spectrométrie de masse à ultra haute résolution

Les listes des contrats institutionnels sur financements publics et caritatifs (ARC, ANR, contrats européens)

Nom du projet	Dates de début et de fin	Type de contrat	Financement (Total/Unité)	Partenaires
Etude des phénomènes liés à la dissolution et à la désorption des gaz dissous dans une bouteille de	01/09/2013 - 31/08/2015	Collaboration de recherche	12 000 € HT	CIVC

⁵⁰ Hong et al. J. Agric. Food Chem. 59, 7237, 2011

⁵¹ Jeandet et al. PNAS 112, 5893, 2015

⁵² <http://www.nature.com/news/cheesy-metallic-sweet-170-year-old-champagne-is-clue-to-winemaking-s-past-1.17361>

champagne Etude du débouchage d'une bouteille de champagne par caméra rapide : impact de quelques paramètres de la bouteille et du bouchon	27/06/2014– 26/06/2016	Collaboration de recherche	20 000 € HT	AMORIM & IRMAOS
Etude portant sur la dynamique des bulles et les pertes de CO ₂ dissous dans des échantillons commerciaux de boissons pétillantes non alcoolisées sucrées ou édulcorées	10/12/2014- 09/05/2015	Collaboration de recherche	25 000 HT	COCA-COLA
Etude de l'impact de produits de levure sur l'effervescence et la tenue de mousse d'un vin effervescent	22/12/2014- 21/12/2015	Collaboration de recherche	16 500 € HT	BIOLAFFORT

Nom du projet	Dates de début et de fin	Type d'AAP	Financement (Total/Unité)	Partenaires
Une première approche des processus physico-chimiques responsables du gerbage des vins de Champagne	1/01/2014 au 31/12/2014	Projet Incitatif Montant 2014	12 000 €	ECA (70%), SLA (30%) Champagne Pommery, CIVC, IOC (Epernay), GRESPI (URCA)

Interactions avec l'environnement social, économique et culturel - ECA

Partenariats avec des acteurs socio-économiques :

Depuis la création de l'équipe ECA au 1^{er} janvier 2012, nous avons mis en place diverses études en collaboration avec des partenaires non-académiques (CIVC, AMORIM, Coca-Cola, Biolaffort, Maisons Pommery, Veuve Clicquot, Moët & Chandon, etc). En effet, l'équipe ECA dispose d'une compétence acquise et d'un savoir-faire dans la physique des gaz et des phénomènes d'effervescence en œnologie. Ainsi, diverses études ont été menées :

- Etude des phénomènes liés à la dissolution et à la désorption des gaz dissous dans une bouteille de champagne (CIVC, 2 ans, 2013-2015).
- Etude du débouchage d'une bouteille de champagne par caméra rapide : impact de quelques paramètres de la bouteille et du bouchon (AMORIM & IRMAOS, 2 ans, 2014-2016)
- Etude portant sur la dynamique des bulles et les pertes de CO₂ dissous dans des échantillons commerciaux de boissons pétillantes non alcoolisées (COCA-COLA, 1 an, 2015).
- Etude de l'impact de produits de levure sur l'effervescence et la tenue de mousse d'un vin effervescent (BIOLAFFORT, 1 an, 2015)

En dehors de ces études menées dans le cadre de contrats sur financements privés, notre équipe se veut autant que possible au contact direct des professionnels champenois. En effet, nous collaborons avec des maisons de Champagne avec divers organismes de l'interprofession champenoise (CIVC, l'institut Œnologique de Champagne (IOC), la Station Œnoteknique de Champagne, la Verrerie de la Marne, la Société Arc International et l'Union des Œnologues de Champagne, plusieurs Maisons de champagne ou coopératives vitivinicoles - Moët & Chandon, Veuve Clicquot Ponsardin, Pommery, Nicolas Feuillatte, Mumm, Lanson, Cattier, Besserat de Bellefon, Palmer, Coopérative de Nogent l'Abbesse etc...). Notre objectif est de mener une recherche de pointe sur la « Bulle » et de conserver le leadership que nous avons acquis sur le sujet à l'Université de Reims ces dernières années. Entre 2011 et 2015, 16 séminaires ont été donnés à destination du monde professionnel (sous forme de séminaires techniques et de journées de formation) (voir la section colloques techniques de l'annexe 6 ci après).

L'équipe ECA bénéficie également du soutien moral et financier de l'Association Recherche Œnologique Champagne et Université (**AROCU**) qui a su créer une interface très efficace entre la profession et nos recherches universitaires. L'AROCU est une association créée en 1989, dont l'objectif est de favoriser, par ses actions et l'aide financière qu'elle octroie, toutes les activités de recherche et de formations œnologiques et viticoles, et de manière générale toutes activités perpétuant la qualité et le prestige des vins de Champagne. L'association regroupe une centaine de membres comprenant des viticulteurs, coopératives, négociants, vigneron et maisons de champagnes. Les fonds reçus par l'équipe ECA depuis sa création s'élèvent à environ 30 000 euros.

Il est aussi à noter que Gérard Liger-Belair a été nommé membre de l'**Académie Amorim** en 2012. Cette académie, créée en 1990 par a pour vocation de soutenir la recherche en œnologie et d'approfondir les connaissances sur le vin et son environnement en lançant chaque année un concours auprès des universitaires et en organisant des débats sur des thèmes touchant l'actualité du vin.

Participation à la diffusion de la culture scientifique :

Dans l'imaginaire collectif, le vin de Champagne est immédiatement associé aux bulles, qui constituent véritablement son identité, son « ADN ». Sans bulles, le champagne perdrait tout son caractère, toute son âme... Pourtant, quoi de plus simple qu'une bulle? Quoi de plus banal, de moins intéressant, pour qui n'est pas guidé ? Se peut-il vraiment que l'âme de ce vin soit enfermée dans cette minuscule sphère de gaz qui remonte dans le verre ? De notre point de vue pourtant, quoi de plus merveilleux, de plus fascinant qu'une bulle, quand on sait la regarder avec les outils de la science... Ces petites sphères de gaz carbonique qui prennent naissance dans le vin engendrent une kyrielle de phénomènes d'une complexité insoupçonnée qui vont mettre en éveil la panoplie complète des sens du dégustateur. En apportant de la connaissance autour de ce marqueur d'identité fort que sont les bulles et l'effervescence, ce projet participe pleinement à l'enrichissement de ce que nous considérons comme une part fondamentale du patrimoine de la région Champagne-Ardenne. De plus, force est de constater que nos travaux, depuis leur origine, attirent étudiants, chercheurs et journalistes du monde entier. L'équipe ECA participe autant que possible à la diffusion des connaissances par l'intermédiaire de divers média (presse écrite, radio, télévision) nationaux et internationaux.

Le champagne et son effervescence fascine par-delà les frontières de notre région. Ces travaux sur la bulle champenoise inspirent aussi chercheurs et intellectuels issus d'autres disciplines que celles directement en lien avec le vin. Nous en voulons pour preuve les relations et collaborations que nous avons

progressivement établies avec des collègues de disciplines telles que l’océanographie (formation massive d’embruns liée à l’éclatement de bulles) ou même la médecine (formation de bulles dans le sang lors de phénomènes d’embolies gazeuses). Très récemment, nous avons même eu le privilège d’écrire un ouvrage sur l’effervescence du champagne publié aux éditions du Cherche Midi (*Champagne, la vie secrète des bulles*, Cherche Midi, Paris, 2015). Cet ouvrage a été coécrit avec Dominique Demarville, le chef de caves de la Maison Veuve Clicquot et avec le philosophe Michel Onfray qui a proposé un regard décalé sur la symbolique du champagne et le message porté par les bulles.

L’émulation intellectuelle qui découle de ces travaux sur l’effervescence a des retombées très positives sur l’université de Reims et la région Champagne-Ardenne, qui conserve ainsi son rôle de pionnier dans la connaissance et la maîtrise de cette bulle qui a fait le tour du monde. Nous avons ainsi le plaisir d’accueillir de nombreux journalistes et même des touristes éclairés, jusque dans les murs de notre laboratoire de l’université.

Productions et réalisations avec des partenaires non-académiques

Les collaborations avec nos partenaires non académiques ont conduit à la réalisation d’articles et de communications (orales ou sous forme d’affiche) dans divers congrès (à destination du monde académique ou lors de colloques techniques) (voir Annexe 6).

Implication dans la formation par la recherche-ECA

- Thèses et post-doctorats encadrés et en cours sur la période 2011-2015:

Pour les thèses de l’équipe ECA :

NOM Prénom du doctorant	NOM Prénom du ou des directeurs de thèse	Dates de début et de fin	Type de financement
PERRET Alexandre	LIGER-BELAIR Gérard, ALIJAH Alexander	Janvier 2012 - 11 Décembre 2014	CIFRE (BULL)
VREME Alexandru	LIGER-BELAIR Gérard, POULIGNY Bernard	Février 2012 - 10 Avril 2015	CPER VINEAL
BEAUMONT Fabien	LIGER-BELAIR Gérard, POLIDORI Guillaume	Septembre 2011 - 25 Novembre 2014	Autofinancement GRESPI
MORIAUX Anne-Laure	LIGER-BELAIR Gérard, ZENINARI, Virginie	1 Octobre 2015 - 2018	Ministère

Pour les post-doctorats de l’équipe ECA :

NOM Prénom du doctorant	NOM Prénom du ou des directeurs de thèse	Dates de début et de fin	Type de financement
DAS Arup	LIGER-BELAIR G, ZALESKI S, JEANDET P.	2011-2012	CPER VINEAL

- Stagiaires de master (M1 , M2 et DNO) :

Depuis 2012, l’équipe ECA a accueilli des stagiaires du master mention Sciences de la Vigne et du Vin, spécialité : Vins et Champagne (M1 et M2) et a co-encadré des stages d’étudiants du Diplôme National d’Oenologue (DNO).

Stagiaires M1, master SVV, Vins et Champagne (URCA) :

- Daniel Carvajal Pérez, 8 semaines, **2014**, « Etude de la désorption progressive du CO₂ dissous dans une flûte de champagne ».

Stagiaires M2, master SVV, Vins et Champagne (URCA) :

- Cyrielle Petit, 6 mois, **2014**, « Influence du verre sur la dégustation du Brut Carte Jaune ». Co-encadrement avec la maison de Champagne Veuve Clicquot Ponsardin.

- Daniel Carvajal Pérez, 6 mois, **2015**, « Etude des paramètres clés ayant un rôle sur l'effervescence du Champagne Dom Pérignon ». Co-encadrement avec les maisons de Champagne Moët & Chandon et Dom Pérignon.

Stagiaires DNO, 2^{ème} année :

- Guillaume Duval, 8 mois, **2015**, « Le gerbage des vins effervescents : Mise en place d'une étude multi-thématique au sein de la maison de Champagne Lanson ». Co-encadrement avec la maison de Champagne Lanson.

- Solène Gradelet, 8 mois, **2015**, « Etude de la diffusion du CO₂ hors d'une bouteille de champagne lors du vieillissement sur lattes et du dégorgement ainsi que de l'impact de la pression en bouteille sur ces échanges ». Co-encadrement avec le CIVC.

- les ouvrages, les documents de synthèse, les outils et produits numériques à vocation pédagogique

Quatre ouvrages à vocation pédagogique et à destination du grand public ont été publiés dans la période 2011-2015. Une conférence **TEDx** a également été filmée et un petit film a été réalisé autour des travaux de notre équipe par le journal du **CNRS**. Tous deux sont disponibles et libres de droits sur internet.

1. Liger-Belair G, Polidori G (avec une préface d'Hervé This) "Voyage au cœur d'une bulle de champagne", Odile Jacob, Paris, **2011**.
2. Liger-Belair G (avec une préface d'Hervé This), "Uncorked: The Science of Champagne (revised edition)", Princeton University Press, Princeton, **2013**.
3. Liger-Belair G, Demarville D, Onfray, M "Champagne ! la vie secrète des bulles", Cherche Midi, Paris, **2014**.
4. Liger-Belair G, Polidori G (avec une préface de Pierre Cheval) "Nouveau voyage au cœur d'une bulle de champagne ", Odile Jacob, Paris, **2015**.
5. Liger-Belair G « L'odyssée d'une bulle de champagne ». 1er TED^x Reims organisé sur le thème Richesses de Champagne, Reims, 22 novembre **2013** (invité par Grégory Pierson). <http://tedxtalks.ted.com/video/Lodysse-dune-bulle-de-champagne>
6. Film réalisé par le CNRS autour des travaux de l'équipe ECA (2015). <https://lejournald.cnrs.fr/videos/champagne-lodysee-des-bulles>

2.6. Réalisations: équipe Aéronomie

L'équipe d'Aéronomie du GSMA a été créée en 2008. Elle regroupe les activités en sciences de l'atmosphère et en planétologie du GSMA. L'équipe Aéronomie comprend deux axes de modélisation portant d'une part sur l'atmosphère moyenne terrestre (modélisation méso-échelle) et d'autre part sur l'étude des atmosphères planétaires (modélisation globale 2D, 3D pour Titan, essentiellement). Ces deux axes sont soutenus par un développement instrumental par lasers sous ballons stratosphériques (PicoSDLA, AMULSE, EcoFlux ...) ou dans le cadre de missions spatiales (TDLAS, MTDLAS,...). Par rapport au précédent quadriennal, l'équipe a été renforcée par le recrutement en 2011 d'un CR1-CNRS en section 19 (P. Lavvas) et la mutation interne en 2015 de D. Cordier, CR1-CNRS en section 17. L'équipe s'inscrit dans les programmes nationaux de l'INSU (PNP, Chat-Lefe) , dans les programmes spatiaux et ballons du CNES et bénéficie pour le quinquennat en cours de soutiens Région, ANR, ADEME et CNRS. L'équipe développe de nombreuses collaborations internationales, notamment avec les USA, la Russie et le Brésil.

Personnels permanents et non –permanents de l'équipe :

NOM Prénom	Période	Activité
CORDIER Daniel	2015- ... affecté au GSMA en septembre 2015	CR1 CNRS
COURS Thibault	2011-2015	Maitre de conférences
DURRY Georges	2011-2015	Professeur, PRCE1, responsable d'équipe
GOMEZ Laura	En disponibilité à l'INTA depuis 2011	Maitre de conférences, 50%
HAMDOUNI Hamid	2011-2015	Maitre de conférences
JOLY Lilian	2001-2015	CR1-CNRS
LAVVAS Panayotis	2011-2015	CR1-CNRS
RANNOU Pascal	2011-2015	Professeur, PR2
RIVIERE Emmanuel	2001-2015	Maitre de conférences – HDR
PETROCHILOS Nicolas	2015 – ... retour de disponibilité en septembre 2015	Maître de conférences

NOM Prénom du doctorant	NOM Prénom du ou des directeurs de thèse	Dates de début et de fin	Type de financement
BEHERA A.	E. RIVIERE	2014- ...	Ministere
SEIGNOVERT B.	P. RANNOU	2014-...	Ministère
MIFTAH-EL-KHAIR Z.	G.DURRY\L.JOLY	2014-...	CNES\URCA

NOM Prénom du postdoctorant	NOM Prénom du ou des directeurs de thèse	Dates de début et de fin	Type de financement
LAVERSIN H.	L. JOLY	2015- ...	projet NUAGE
MAAMARY Rabih	L. JOLY	2014-...	projet CEGESCA

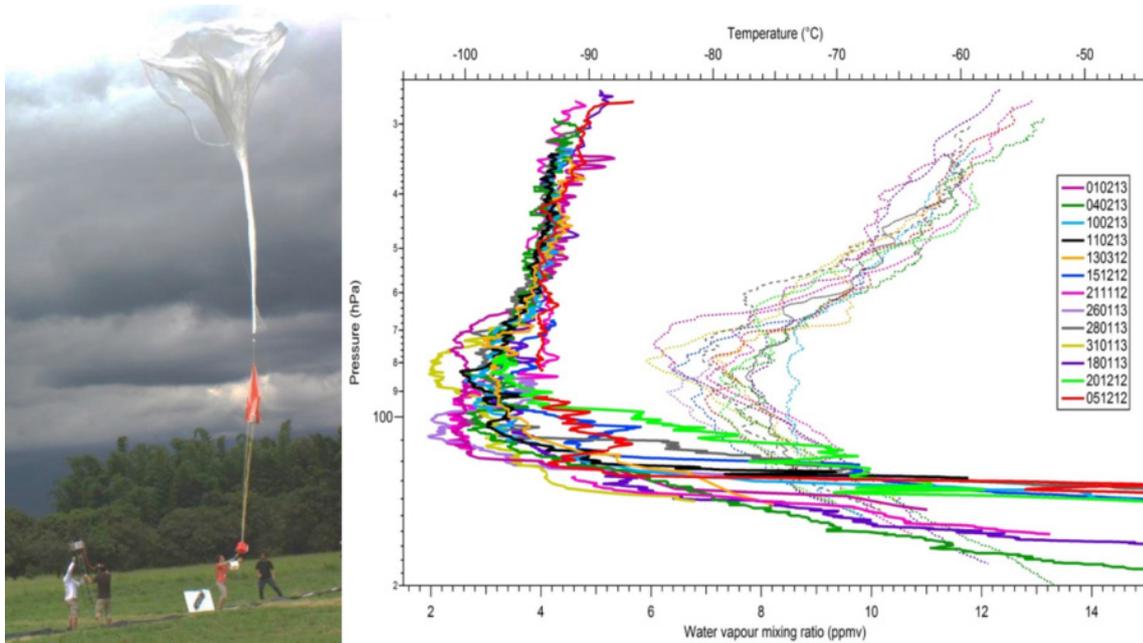
Production scientifique – Aéronomie

	2011	2012	2013	2014	2015	2016	TOTAL
Journaux internationaux avec comité de lecture référencés (ACL de rang A)	11	14	15	12	9	6	67

Atmosphère terrestre

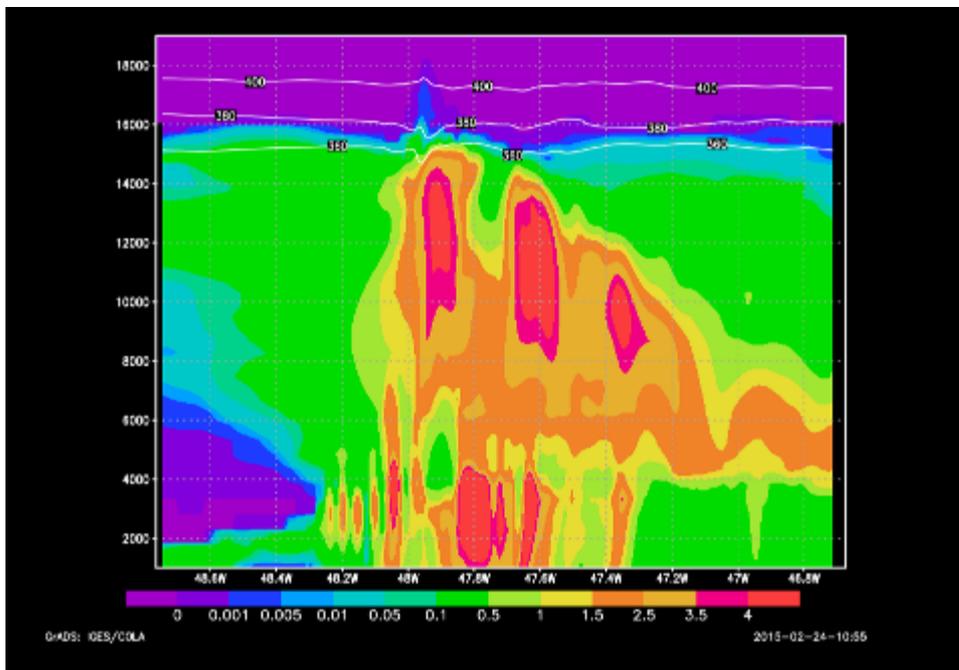
La vapeur d'eau, principal gaz à effet de serre sur terre est une espèce clé du système climatique. Il est d'ailleurs montré que les tendances récentes de vapeur d'eau stratosphérique jouent un rôle non négligeable dans les variations climatiques actuelles. Elle joue aussi un rôle très important dans l'équilibre chimique de la stratosphère, et notamment sur la couche d'ozone. Si l'abondance de l'eau stratosphérique est principalement gérée par le piège froid (ascension lente au-dessus des nuages puis assèchement par formation de cristaux de glace qui sédimentent), le rôle des overshoots stratosphériques – pénétrations convectives qui atteignent la basse stratosphère – est insuffisamment connu. Il est reconnu qu'ils hydratent la basse stratosphère à l'échelle locale. Par contre, leur signature à grande échelle est encore totalement inconnue, cachée dans les incertitudes et les basses résolutions verticales des mesures satellitales de vapeur d'eau. C'est pour améliorer notre connaissance de l'impact de ces overshoots sur la vapeur d'eau stratosphérique que le projet TRO-pico (Bilan multi-échelle de l'eau dans la haute troposphère et la basse stratosphère des régions Tropicales) a été soumis au programme blanc de l'ANR et sélectionné en 2010. Ce projet a porté l'essentiel des travaux de recherche sur l'atmosphère dans l'équipe sur la période 2011-2015. Il impliquait le GSMA ainsi que plusieurs laboratoires de l'INSU et de Météo-France : la Division Technique de l'INSU à Meudon, le CNRM-GAME/ et le LA à Toulouse et le LATMOS à Paris. Le projet comportait une forte composante internationale via une étroite collaboration avec les météorologistes brésiliens de l'IPMET/UNESP. Le projet a été coordonné par E. Rivière MCF au GSMA. Il s'appuyait sur une très forte composante instrumentale avec, en ce qui concerne l'unité, le déploiement sous petits ballons des spectromètres laser Picosdla pour la mesure dans l'UT-LS de H₂O, CH₄ et CO₂.

Le but principal de TRO-pico était donc d'améliorer notre connaissance de la variabilité de l'impact à petite échelle des processus convectifs sur H₂O stratosphérique pour en déduire un impact à plus grande échelle. TRO-pico était basé sur une campagne de terrain à Bauru (22,3°S) au Brésil à l'aide d'instruments légers sous petits ballons stratosphériques, en mars 2012 (fin de la saison convective) puis de novembre 2012 à 2013 (saison humide suivante quasi-complète). Les spectromètres laser infrarouges pico-SDLA du GSMA et de la DT-INSU (version H₂O principalement, mais également CO₂ et CH₄) étaient impliqués dans la campagne, avec également un hygromètre russe opéré par le LATMOS (FLASH-B), le spectromètre UV-Visible mini-SAOZ et des sondeurs de particules/aérosols LOAC (LPC2E Orléans) et COBALD (ETH-Zürich). Au total 37 vols ont été réalisés avec des chaînes de vols souvent multi-instrumentées sous petits ballons, types 500 et 1500 m³. On retiendra très synthétiquement les résultats suivants. Pendant la saison humide 2012-13, une grande variabilité de la vapeur d'eau est observée plus liée à un refroidissement particulièrement marquée de grande échelle qu'aux overshoots. Cinq cas d'overshoots ont pu être sondés par les hygromètres de la campagne, avec des augmentations locales de vapeur n'excédant pas 1 ppmv, ce qui est plus faible que ce qui a été observé pendant d'autres campagnes dans d'autres continents. Cela montre des caractéristiques régionales à prendre en compte dans la tentative d'extrapoler à grande échelle le rôle des overshoots. Ce résultat est confirmé par des simulations méso-échelle de cas d'overshoots de la campagne. Ils sont bien reproduits par le modèle mais le bilan d'eau associé montre une hydratation deux fois plus faible que pour des cas africains de la campagne SCOUT-AMMA. Des analyses de données satellitales de cycle diurne de température, de vapeur d'eau, et de contenu en glace montre un impact des overshoots différents selon les régions : plus fort dans l'hémisphère sud que dans l'hémisphère nord, plus marqué dans les régions continentales que dans les régions océaniques, et un cycle d'hydratation différent à l'échelle même du continent sud-américains entre la région de l'Amazonie et la région de Bauru. Pour l'instant, le projet a donné lieu à 2 publications, 3 sont en cours de soumission, et 5 autres devraient voir le jour dans les 2 ans à venir. TRO-pico a également donné lieu à 39 présentations dans des congrès internationaux. Parmi ces congrès, le workshop « Water Budget in the Tropical Tropopause Layer » organisé à Reims par le GSMA du 1^{er} au 3 juillet 2015, a rassemblé l'ensemble une large communauté française, mais également la communauté américaine, japonaise, suisse, italienne, allemande et australienne.



Lancement d'un spectromètre laser PicoSDLA pour la mesure de H₂O dans l'UT-LS à Bauru (22°S) en 2013. Série de mesure de H₂O dans l'UT-LS tropicale obtenues in situ lors de TROPICO

Le quinquennat a également été marqué par un retour vers l'activité « nuages stratosphériques polaires » dans le cadre du projet LEFE et TOSCA EECLAT (expecting Earth Care, Learning from A Train) qui vise en partie à fédérer l'action scientifique dans les utilisations de données satellitales de radar ou lidar embarqués. Cette activité devrait s'intensifier dans les deux années à venir.



Coupe verticale d'un overshoot modélisé par BRAMS pour le cas du 13 mars 2012, lors de la campagne Tropico à Bauru, Brésil? L'altitude du nuage modélisé est en accord avec les observations. Le bilan d'eau associé au maximum de l'activité convective est de 400 t d'eau, soit deux fois moins que pour les cas de SCOUT-AMMA en Afrique.

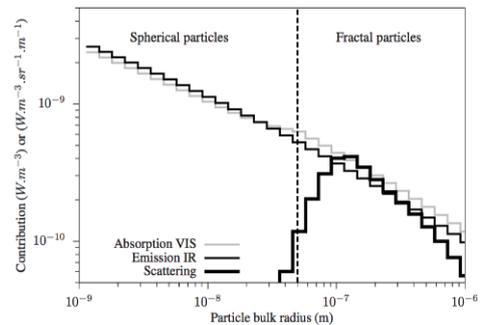
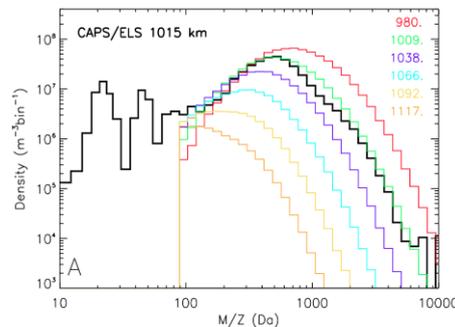
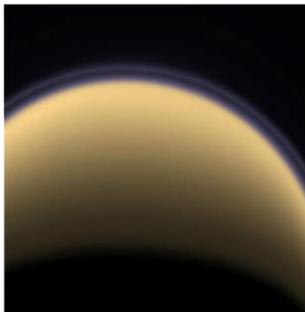
Planétologie

L'essentiel des études de planétologie de l'équipe se concentrent sur l'étude de Titan, l'un des satellites de Saturne. L'un des chercheurs de l'équipe (P. Lavvas) a d'ailleurs reçu la médaille de bronze du CNRS en 2015 pour ses travaux à forte visibilité internationale sur les aérosols photochimiques dans l'atmosphère de Titan. Ce satellite intéresse particulièrement la communauté car il a une atmosphère dense, siège d'une activité atmosphérique extrêmement riche. On y trouve entre autre, une activité nuageuse intense, des étendues liquides sous formes de grands lacs et des traces évidentes de précipitations passées et présentes. La brume omniprésente est la trace la plus visible d'une photochimie très riche produisant aussi d'autres espèces chimiques complexes allant jusqu'à une chimie de type prébiotique, en l'absence toutefois de molécules oxygénées. Les études menées au laboratoire concernant Titan se déclinent en trois grands axes :

- L'analyse photométrique d'observation de Cassini. Le spectro-imageur VIMS produit des images où chaque pixel est en réalité un spectre entre 0.4 et 5.2 μm . Cet instrument nous a permis d'étudier l'évolution de la couche de brume dans la stratosphère basse et moyenne et du nuage polaire nord autour de l'équinoxe. Nous avons aussi étudié la réflectivité de la surface aux longueurs d'onde visibles et infrarouge à travers un travail de modélisation physique de la surface, qui explique pour la première fois la forme du spectre de la surface, associé à une inversion d'observations de VIMS dans la région où s'est posée la sonde Huygens. Dans plusieurs travaux, nous avons aussi analysé les observations de la couche détachée mesurées par ISS. Cela a permis de contraindre les propriétés des aérosols et de suivre l'évolution temporelle de cette couche si particulière au moment de l'équinoxe. Nous analysons également les émissions, observées par UVIS/Cassini, pour retrouver les propriétés des aérosols dans la haute atmosphère de Titan, de leur zone de formation jusqu'à l'altitude proches de la couche détachée (couche de brume à 500 km surplombant la couche principale). Ces observations sont essentielles pour l'étude de la conversion gaz-particules dans cette zone de l'atmosphère et peuvent aider jusqu'à évaluer le rôle de la chimie hétérogène à la surface des particules d'aérosol.
- Le développement du modèle de circulation 3D a aussi été un axe important. Après le développement du modèle 3D de Titan au LMD, évolution indispensable du modèle 2D, les temps d'exécution du modèle couplé avec les nuages sont devenus exorbitant. Deux axes sont prévus pour rendre le modèle utilisable : la parallélisation sur plusieurs processeurs et le développement d'un nouveau modèle de microphysique où les distributions de particules (aérosols et noyaux de condensation) sont décrites en moments. Ce travail très technique et ingrat a été mené à terme et est prêt à être utilisé dans le GCM 3D. Il permettra d'ouvrir des collaborations puisque les GCM pour d'autres planètes vont rencontrer les mêmes problématiques (Vénus, Saturne,...).
- Un dernier axe important de la recherche sur Titan concerne les mécanismes de formation des aérosols à partir de la phase gazeuse. Les études de conversion gaz-particules reposent sur des modèles détaillés de photochimie atmosphérique qui décrivent la formation des grandes molécules ainsi que l'interaction de ces macromolécules avec l'ionosphère. Ces mécanismes, incluant la chimie ionique qui s'avère extrêmement efficace, donnent naissance à des aérosols embryonnaires dans la très haute atmosphère (~ 1000 km). Nos modèles théoriques ont été comparés et validés par rapport aux observations de la haute atmosphère de Titan par les instruments de Cassini (CAPS) et donne des informations cruciales sur la source des aérosols qui couvre l'ensemble du globe. Cette étude a aussi des implications pour la formation des aérosols photochimiques pouvant se former dans les atmosphères telle celles des planètes géantes de notre système solaire, de Pluton ainsi que les atmosphères des exoplanètes.

Un nouvel axe de recherche dans l'équipe est l'étude des atmosphères des exoplanètes, et en particulier, l'étude de leurs compositions chimiques et des propriétés potentielles des nuages et des aérosols présents dans ces environnements. Pour ces études, nous utilisons la connaissance et le potentiel que nous avons développé au fil des années grâce aux études des objets du système solaire et nous l'appliquons aux

différents cas de Jupiters chauds. Cependant, ces environnements chauds exigent également l'inclusion de nouveaux procédés tels la chimie des espèces métalliques plus complexes (par exemple Na, K, Si, etc.). Nous utilisons des modèles détaillés de photochimie et de thermochimie pour déduire la composition chimique de ces atmosphères. Nous avons également appliqué nos modèles d'aérosols et de nuages pour l'étude de différentes planètes pour lesquelles l'observation indique des opacités atmosphériques dues aux gaz et à des particules



Exemple de synergie entre différentes études des aérosols, avec différents types d'observation, et dans différentes zones de l'atmosphère, permettant de comprendre la formation des aérosols dans son ensemble. A gauche, photo de Titan prise par ISS à bord de Cassini. On y voit la couche photochimique principale de Titan, de couleur orangée. Au dessus, la couche de brume détachée apparait en bleu/violet. Au centre, l'étude photométrique de la couche détachée, réalisée en analysant plusieurs clichés pris à différents angles de phase par ISS, et les résultats d'occultation d'UVIS permettent de contraindre la granulométrie des aérosols. Ces résultats indiquent, par exemple, que la diffusion observée est due à des aérosols d'environ 200 nm mais que l'extinction nécessite la présence de petites particules de quelques dizaines de nanomètres (Cours et al., 2011). A droite, très haut dans la mésosphère, l'instrument CAPS/ELS et CAPS/IBS, faisant la mesure des particules ionisées positivement ou négativement, permet d'observer la présence d'aérosols à très haute altitude. Un modèle de photochimie associé à un modèle de croissance des aérosols permet d'expliquer la croissance des aérosols dans cette zones (Lavvas et al., 2013).

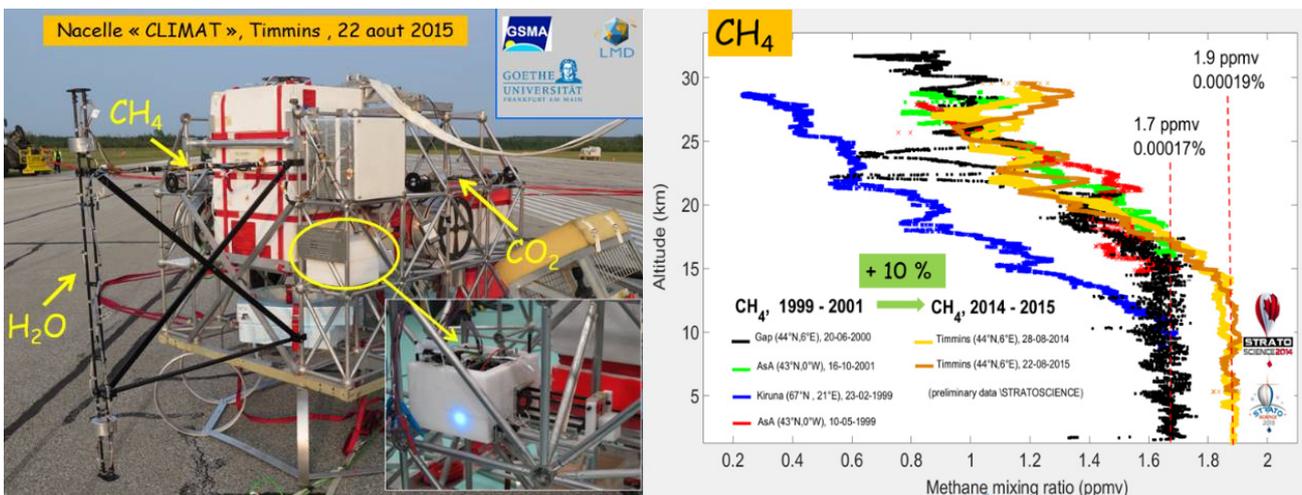
Instrumentation

L'année 2011 s'est terminée malheureusement avec l'échec de la mission russe martienne Phobos-Grunt sur laquelle l'équipe avait la responsabilité scientifique (G. Durré) du spectromètre laser TDLAS pour l'analyse in situ de la subsurface de Phobos, instrument financé par le CNES. Dix années de travail ont fini au fond de l'océan Pacifique. Néanmoins, cela a permis de fortement resserrer nos collaborations avec l'Institut de Recherche Spatiale de Moscou (IKI). L'équipe est impliquée dans deux projets russes à venir, le spectromètre laser M-TDLAS sur Exomars 2018 et une version de TDLAS pour les missions lunaires Russes (Luna-Resurs) à l'horizon 2020. Toujours dans le cadre de l'instrumentation en planétologie, le laboratoire s'est impliqué fortement dans le capteur optique de poussière et de nuages, ODS, qui a été développé par le LATMOS au début des années 1990 et embarqué sur Mars 96 qui a finalement échoué au lancement. Ce capteur a évolué dans son principe, et c'est la version préparée pour la mission (finalement annulée) CNES/Netlander qui a été proposée, acceptée (AO NASA/ESA), puis retirée d'Exomars 2016 (Défaut de financement du CNES). Le capteur collecte le flux diffusé par le ciel vers la surface et la lumière directe du soleil à travers un masque et un filtre coloré. Au cours de la journée, le soleil est soit en dehors, soit dans le champ de vue, créant une alternance du flux collecté qui permet de retrouver l'opacité des poussières. Avec deux têtes optiques, on peut se surcroit obtenir une information sur la couleur du ciel, qui permet de retrouver des informations sur la présence de cirrus subvisibles. Cependant ces inversions ne peuvent se

faire qu'avec une modélisation complète du transfert radiatif et des procédures d'inversions efficaces qui ont été développées au GSMA. Cet instrument ODS est proposé également pour ExoMars-2018 via une collaboration étroite avec l'IKI. La mise en place du programme spatial Exomars-2018 porté par l'ESA et Roskosmos est en cours au moment d'écrire ce document.

Concernant, l'instrumentation atmosphérique, en plus du projet TROPICO mentionné précédemment, le laboratoire est impliqué depuis plus de quinze ans dans le programme national de ballons stratosphériques (ballons stratosphériques ouverts de ~100 000 m³) du CNES avec ses instruments PicoSDLA, micro-SDLA et SDLA (PI. : G. Durry) qui sont des spectromètres à diodes laser destinés à la mesure in situ de H₂O, CH₄ et CO₂ dans l'atmosphère moyenne de la terre et mis en œuvre en étroite collaboration avec la Division Technique de l'INSU. Sur la période évaluée, l'équipe s'est particulièrement impliquée dans les campagnes canadiennes « StratoScience » à Timmins en 2014 et 2015 dans le cadre d'une collaboration entre le CNES et l'agence spatiale canadienne. Les instruments Picosdla ont été intégrés à des nacelles polyinstrumentées pour la mesure de gaz à effet de serre. Actuellement, l'équipe est impliquée dans la préparation de la campagne à Kiruna, Suède en 2016 toujours sous BSO. L'équipe est aussi impliquée dans le projet international « Srateole 2 » soutenu par le CNES. Ce projet a été définitivement sélectionné par l'agence spatiale en 2016. Il s'agira cette fois d'utiliser des ballons pressurisés dérivant plusieurs mois dans la tropopause équatoriale ; la campagne de test est prévue en 2018 et les campagnes scientifiques (Seychelles) sur la période 2020-2023. Des versions dédiées de PicoSDLA-H₂O ont ainsi été testées en vol au Canada en 2015 sous BSO et seront finalisées lors de la campagne de 2016 à Kiruna.

L'équipe est également impliquée, avec le soutien de la Région et du CNES, dans le développement de senseurs laser de faibles poids, AMULSE (L. Joly), pour effectuer des sondages sous ballons météo pour la mesure de CO₂ et CH₄. Ces nouveaux senseurs ont fait l'objet d'une campagne de tests avec le soutien de Météo-France en septembre 2014 en Champagne-Ardenne. Ils ont par la suite été testés en vol lors de la campagne à Timmins en 2015. La possibilité de mesurer CH₄ et CO₂, non pas avec des BSO nécessitant une logistique importante, mais avec des ballons météo représente une avancée importante en termes d'applications scientifiques en ouvrant des perspectives pour l'étude des tendances des gaz à effet de serre et pour la validation satellitaire.



La nacelle poly-instrumentée « CLIMAT » (PI. G. Durry) lors de la campagne STRATOSCIENCE-2015, incluant les senseurs lasers PicoSDLA (désignés par des flèches) et le senseur AMULSE du GSMA ainsi que des senseurs H₂O et Aircore de l'Université de Francfort et du LMD. A gauche, comparaisons de profils de méthane obtenus avec SDLA il y a quinze ans et les mesures canadiennes e 2014 et 2015 restituées par PicoSDLA.

En dehors de l'instrumentation laser embarquée sous ballons, nous avons également développé des instruments utilisant des lasers à cascades quantiques pour la mesure de flux d'émissions de surface. Dans

un premier temps, nous nous sommes focalisés sur la mesure du protoxyde d'azote (N_2O), ce gaz présente un potentiel de réchauffement d'environ 310 fois plus élevé que celui du gaz carbonique (CO_2) avec une durée de vie de 120 à 150 ans. L'augmentation actuelle de 0.3% par an de sa concentration est imputable à l'activité anthropique incluant des processus industriels via l'utilisation de solvants mais surtout à l'activité agricole pour environ 70% via des processus biologiques de nitrification et dénitrification se produisant dans les sols. Le N_2O fait partie des gaz à effet de serre dont la quantification des flux est reconnue comme nécessaire pour améliorer les bilans de GES à l'échelle continentale et globale. En particulier, il a été retenu (tout comme le méthane CH_4) comme l'un des composés à suivre dans le projet européen d'observation des gaz à effet de serre (ICOS - <http://www.icos-infrastructure.eu/>). Nous avons participé à de nombreux projets scientifiques axés sur l'étude des écosystèmes avec pour objectifs de mieux comprendre les processus d'émission du N_2O/CH_4 avec une meilleure modélisation des mécanismes d'émission de N_2O/CH_4 à l'aide de modèles d'écosystème (ex. PaSim, prairie, CERES-STICS, culture, DNDC) et une évaluation du cycle saisonnier des émissions de N_2O simulées par le modèle ORCHIDEE par confrontation aux mesures collectées. Dans le cadre de ces projets, plusieurs campagnes de mesures ont été effectuées à l'aide d'un instrument novateur entièrement développé au GSMA, la station mobile de mesures de flux de gaz à effet de serre, dite ECoFlux (PI. L. Joly). Il s'agit d'un spectromètre à diode laser utilisant un laser à cascades quantiques. Parmi les sept campagnes de mesure réalisées, les plus significatives (car ce type de mesure de flux a été une première en France et en Belgique) ont été faites sur :

- Le site de suivi des gaz à effet de serre ICOS, Nitro-Europe et GHG Europe géré par le CESBIO - Lamasquère – France (mai 2012 – septembre 2012)
- Le site pilote du réseau ICOS Europe - Lonzée - Belgique – (mai 2013-septembre 2013).
- L'observatoire Pérenne de l'Environnement (OPE) labélisé SOERE (Système d'Observation et d'Expérimentation au long terme pour la Recherche en Environnement) – France. Ce projet de 2 ans (2013- 2015) regroupe une trentaine de personne de 5 différents laboratoires européen. Durant toute l'année 2014/2015, l'instrument a été en fonctionnement sur le site de Bures (Meuse\haute Marne) dans le cadre de cet Observatoire Pérenne de l'Environnement mis en place par l'ANDRA.



Au milieu une photo d'EcoFlux sur le site de Lonzé, site pilote européen ICOS - à droite, les premières mesures du site de Lonzé de flux de N_2O par Eddy Correlation (résultats en préparation pour publication)

La figure ci-dessus présente quelques photos de la station Ecoflux sur deux sites ICOS (France et Belgique) et à droite, un des premiers résultats sur un site ICOS d'un cycle journaliers de flux de N_2O . Les développements instrumentaux et les résultats scientifiques recueillis lors de ces différentes campagnes grâce aux instruments du GSMA ont déjà fait l'objet de plusieurs publications. Ces travaux ont suscité un vif intérêt de la communauté scientifique, notamment auprès du réseau européen ICOS (<http://www.icos-infrastructure.eu/>) qui vise à documenter les concentrations et les flux de carbone, de méthane et de protoxyde d'azote. C'est pour cette raison qu'en mars 2013, le GSMA a intégré officiellement le réseau Européen ICOS grâce à nos nombreuses collaborations avec la communauté atmosphère et écosystème ICOS. L'objectif pour cette intégration est de mettre à disposition les instruments développés au GSMA et d'entreprendre de nouveaux développements basés sur la spectroscopie pour répondre à un réel besoin du réseau ICOS.

Rayonnement et attractivité académiques- Aéronomie

Un membre de l'équipe, Panayotis LAVVAS, a été distingué par la médaille de bronze du CNRS en 2015, attribuée par la section 19 du comité national du CNRS (INSU) pour la qualité de son travail de recherche sur les aérosols photochimiques de Titan.

L'équipe a eu la responsabilité d'un instrument spatial, le spectromètre TDLAS (PI. G. Durry), financé par le CNES, dans le cadre de la mission martienne Russe Phobos-Grunt lancée de Baïkonour en novembre 2011. Bien que l'issue de cette mission spatiale ait été malheureuse (désintégration dans la haute atmosphère) , des liens collaboratifs très forts ont été établis avec l'Institut de Recherche Spatiale de Moscou et notre équipe est très impliquée dans certaines missions Russes ou Européennes en collaboration avec la Russie (Exomars-2018, Luna-Resurs).

L'équipe a réussi à recruter deux CR CNRS (P. Lavvas en 2011 et D. Cordier en 2015) sur la période évaluée.

L'équipe d'Aéronomie a coordonné deux ANRS blanches sur la période (Apostic et Tropico) associant une dizaine de laboratoires de l'INSU et de Météo-France. L'ANR Tropico a donné lieu à l'organisation du workshop international « Water Budget in the Tropical Tropopause Layer », à Reims du 1^{er} au 3 Juillet 201 : 44 participants, de huit pays et de quatre continents différents. Par ailleurs, l'équipe d'Aéronomie organise un workshop international axé sur Titan, « Titan Aeronomy and Climate » (27-29 juin 2016).

Deux des membres de l'équipe, G. Durry et P. Rannou, ont été successivement élus au comité national du CNRS en section 19 sur la période 2012-2015 (mandat 2008-2012 puis 2012-2016).

L'un des membres de l'équipe, G. Durry, est très impliqué dans la vie de l'université : élu au CA (2012-2016) de l'université de Reims et élu au CA de la COMUE « Université de Champagne » (2015-2018).

Sur la période, l'équipe a reçu de nombreux professeur invité sur des supports de Région ou CNRS :

- Séjour d'un mois (septembre-octobre 2013) de Robert West, Jet Propulsion Laboratory, Caltech\NASA, support CNRS.
- Séjour de deux mois (novembre-décembre 2014) de Imant Vinogradov, Institut de Recherche Spatiale de Moscou (IKI), support CNRS.
- Séjour d'un mois (septembre-octobre 2015) de Christophe Sotin, Jet Propulsion Laboratory, Caltech,\NASA, support CNRS.
- Séjour de 4 mois (janvier-avril 2016) de de Robert West, Jet Propulsion Laboratory, Caltech\NASA , support Région, mobilité internationale.

L'équipe Aéronomie a de nombreuses collaborations internationales : JPL (NASA-Caltech), LPL (U. d'Arizona), IKI (Institut de recherche spatiale de Moscou), Université de Francfort, IPMET (Institut de Météorologie brésilien), ... et nationales (IPSL-Paris, Nantes, Grenobles, Rennes, Toulouse, ...).

- *les listes des contrats institutionnels sur financements publics et caritatifs (ARC, ANR, ...)*

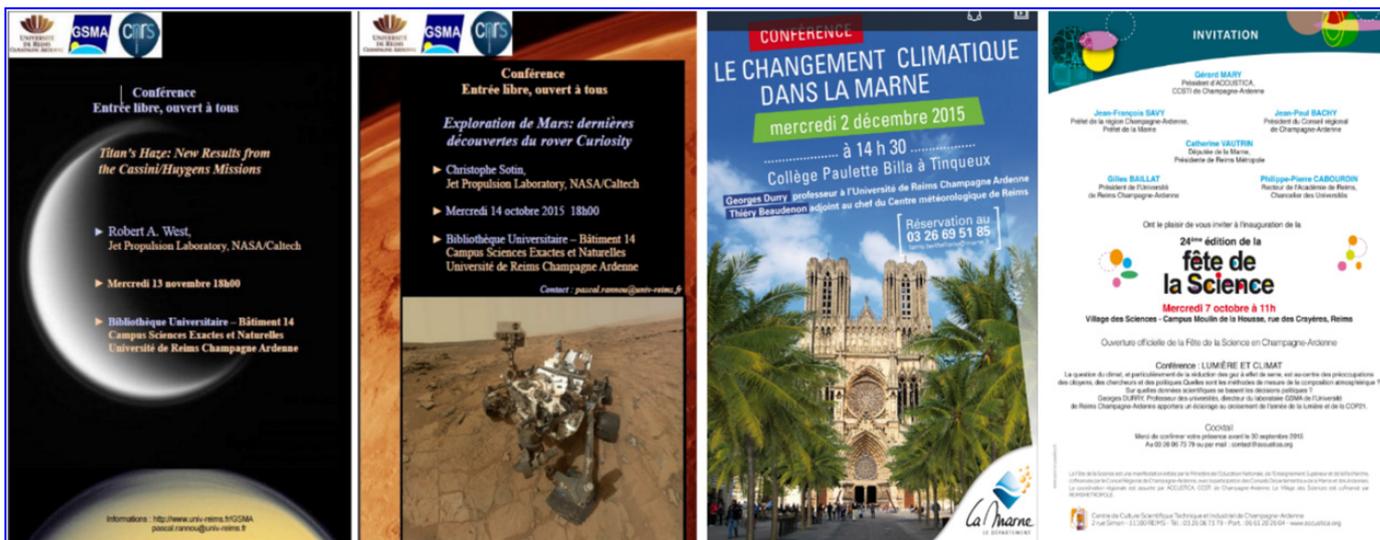
Nom du projet	Dates début-fin	Type d'AAP	Financement (Total/Unité)	Partenaires
NUAGES	2015-2018	CORTEA-ADEME	?? / 156k€	AgroParisTech INRA Grignon AirParif
APOGE	2014-2015	Défi-CNRS	20 k€	CNRM LSCE
EGESCA	2013-2015	Essaimage\Région	?? / 90k€	??
Gmini	2012-2015	Emergence\Région	380k€\ ??	UTT
Programme ballons CNES	2011-2015	Appel d'offre CNES - ballons	~ 100 k€	DT-INSU
TROPICO	2010-2015	ANR blanche	600k€/ 210k€	LATMOS, LMD,

				LPC2E, CNRM, LA, IPMET-Brésil
APOSTIC	2012-2016	ANR blanche	??/160k€	LPGN, LAIM/CEA, LMD, JPL (CA, USA)
EECLAT	2012-...	TOSCA - CNES	? / 8 k€	LMD
Mesure de profils in situ de gaz à effet de serre pour la validation de MicroCarb et Meril	2013-2015	TOSCA - CNES	85k€	Meteo-France LA
Lasers à cascades Quantiques	2013-2015	R&T CNES	75k€	Thalès DT-INSU
Atmospheric Molecular Growth	2011-2015	PNP/INSU/CNRS	5k€\an	IPAG LPL U.of Arizona
Aerosol properties in Titan's upper atmosphere	2011-2015	CNES/ESA	10k€\an	IPAG LPL, U.of Arizona JPL, NASA
Mesure de flux de N ₂ O avec ECoFlux sur l'Observatoire Pérenne de l'Environnement	2013-2015	SOERE-OPE\ANDRA	22k€	LSCE INRA Clermont-Ferrand CESBIO Gembloux Agro-Bio Tech
FERTECCOL	2013-2015	PHC Hubert Curien	??	Université de Liège, Unité de Physique des Biosystèmes

Interactions avec l'environnement social, économique et culturel – Aéronomie

Deux des chercheurs de l'équipe (L. Joly et G. Durry) sont co-fondateurs de la start-up Aerovia (voir le chapitre dédié) axée sur l'industrialisation des méthodes de mesure de concentration de gaz par spectrométrie laser et créée en 2010. Cette entreprise incubée au sein du laboratoire jusque fin 2014 est maintenant installée dans ses propres locaux à Reims, locaux proches de l'UFR Sciences. L'entreprise compte maintenant une dizaine de salariés essentiellement des ingénieurs et des docteurs.

Le groupe d'Aéronomie est très impliqué dans la diffusion et la vulgarisation des connaissances dans les domaines de la planétologie et des sciences du climat. Nous essayons d'organiser régulièrement des conférences grand public soit à la mairie de Reims soit à la médiathèque de la Ville, voir à la bibliothèque de l'université, qui rencontrent un succès certain. L'année 2015 a été particulière puisque c'était à la fois l'année de la lumière et celle du Climat via la COP21. G. Durry a donc assuré la conférence (« Lumière et Climat ») inaugurale de la fête de la Science en Région Champagne Ardenne ainsi que diverses conférences grand public à l'instigation des collectivités. Les affiches sont présentées ci-dessous.



Par ailleurs, l'équipe d'Aéronomie est souvent citée dans la presse locale (journal l'UNION) ou sur France 3 Champagne Ardenne pour ses activités de recherche sur le climat ou la planétologie. Nous profitons de ces opportunités pour présenter nos activités de recherche au grand public.



Implication dans la formation par la recherche-Aéronomie

Depuis 2012, 4 doctorants, formés au sein de l'équipe Aéronomie, ont soutenu leurs thèses et trois thèses sont par ailleurs en cours actuellement. Trois postdocs ont également été formés au sein de l'équipe. Les doctorants qui ont présentés leurs thèses à partir de 2012 sont actuellement en postdoc (M. GHYSELS au NIST\Washington, D. TOLEDO à l'INTA\Madrid, I. MAPPE au LSCE\Saclay) et J. Buralgat a été recruté sur un poste d'IR-Enseignement Supérieur à l'Université de Reims en BAPE (informatique scientifique). Les EC de l'équipe sont très impliqués dans le master NOA et assurent en particulier les cours ayant trait aux sciences de l'atmosphère en M1 et M2. Des enseignements spécifiques optionnels ont également été mis en place en licence dans les domaines de la physique et des sciences de l'univers pour tenter d'attirer des étudiants en master NOA. Certains membres de l'équipe (G. Dury P. Rannou) assurent un enseignement de quelques heures dans le master de planétologie d'Île de France pour faire connaître notre recherche et obtenir des candidats supplémentaires sur nos sujets de thèse (par exemple. J. BURGALAT). L'un des membres de l'équipe est par ailleurs responsable de la mention de master « Physique-Chimie » (G.Dury).

Par ailleurs, nous avons utilisés nos collaborations en recherche pour permettre à des étudiants de partir aux USA à l'aide de support de mobilité étudiante offerts par l'université : ce fut le cas en 2013 d'un étudiant du M2 NOA (M. Perreux) qui a fait son stage de master à l'Université d'Arizona au sein de l'équipe de C. Griffith et aussi de la cas du doctorant D. Toledo qui a passé un mois Au JPL , NASA dans l'équipe de R. West.

Thèses encadrées sur la période 2011-2015:

NOM Prénom du doctorant	NOM Prénom du ou des directeurs de thèse	Dates de début et de fin	Type de financement
BEHERA A.	E. RIVIERE	2014- ...	Ministere
SEIGNOVERT B.	P. RANNOU\P. LAVVAS (50%)	2014-...	Ministère
MIFTAH-EL-KHAIR Z.	G.DURRY\L.JOLY (50%)	2014-...	CNES\URCA
TOLEDO D.	P.RANNOU	2012-2015	CNES\Région
MAPPE-FOGAING I.	G.DURRY\L.JOLY (50%)	2010-2013	Ville de Reims
GHYSELS M.	G.DURRY\E.RIVIERE (50%)	2009-2012	Région
BURGALAT J.	P.RANNOU	2009-2012	Région

NOM Prénom du postdoctorant	NOM Prénom du ou des directeurs de thèse	Dates de début et de fin	Type de financement
LAVERSIN H.	L. JOLY	2015- ...	projet NUAGE
MAAMARY Rabih	L. JOLY	2014-...	projet CEGESCA
STOEFFLER C.	G.DURRY	2012-2013	Postdoc CNES

3. Implication de l'unité ou de l'équipe dans la formation par la recherche

L'implication dans la formation par la recherche du GSMA a été présentée pour chaque équipe. On résume ici le positionnement du laboratoire. Le laboratoire est très sensible à la formation des étudiants par la recherche. Comme mentionné précédemment, l'équipe de chimie de l'unité est très impliquée dans la formation au sein de la mention Génie des Environnements Naturels et Industriels (GENI) avec la responsabilité du MASTER 2 « *Management de l'Environnement Déchets et Énergie* » (E. Roth) et celle du MASTER 1 « *Génie des Environnements naturels et Industriels* » (A. Chakir). Les deux permanents de l'équipe de chimie RPA encadrent des projets et des stages de fin d'études pour les masters M1 et M2 GENI, en moyenne 10 à 15 stagiaires par an. Par ailleurs, le laboratoire a la responsabilité de la mention de master « Physique – Chimie » qui comprend une spécialité recherche "Nanosciences, Optique, Atmosphère (NOA)" et une spécialité "Sciences Physiques" axée sur la préparation aux métiers de l'enseignement (CAPES et agrégation de physique). La seconde spécialité s'articule avec le master MEEF porté par l'ESPE. La spécialité recherche s'appuie sur les compétences de deux laboratoires, le Laboratoire de Recherche en Nanosciences et le GSMA. En M2, une différenciation d'une centaine d'heures permet aux étudiants de s'orienter soit vers les nanosciences, soit vers les thématiques du GSMA ("Optique, Molécule, Environnement"). La contribution du GSMA est axée sur nos compétences en spectroscopie, en aéronomie et surtout sur la spectrométrie laser pour la mesure de gaz qui permet de donner un aspect professionnalisant à la formation avec de nombreuses applications (environnement, médecine, procédés industriels, sécurité, ...). Le laboratoire s'est fortement impliqué dans la préparation de cette maquette à la fin du précédent quadriennal avec la responsabilité de la mention (G. Durry), du M2 de la spécialité NOA (V. Zéninari) et de la spécialité enseignement (L. Régalia) ainsi que la coresponsabilité de la préparation à l'agrégation de physique (M. Rotger). Par ailleurs, L. Régalia assure également la responsabilité de la mention de domaine STS pour les masters MEEF 2nd degré qui comprend trois parcours : mathématiques, SVT et physique-chimie. La préparation à l'agrégation compte un nombre correct d'étudiants (10) notamment via la préparation interne, mais il n'en est pas de même de la spécialité recherche qui compte un flux très réduit d'étudiants (4-5). Malgré ce faible flux étudiant, le M2 a ouvert constamment au cours de ce quinquennat moyennant quelques aménagements grâce au soutien de l'UFR et de l'université. Nous sommes conscients de l'aspect problématique de la formation en physique et de son manque d'attractivité (ce problème se retrouve au niveau national) et nous réfléchissons à des évolutions dans le cadre de l'accréditation des formations qui a lieu en ce moment. Également le laboratoire a assuré la Présidence du Département de physique ces deux dernières années (M. Rotger).

La formation en master est un problème pour l'unité car le vivier local d'étudiants qui s'engagent dans des doctorats pour la recherche en physique est relativement faible lié au flux d'étudiants en master de physique. Le laboratoire doit donc être suffisamment attractif pour attirer des étudiants d'autres universités ou étrangers (doctorants issus de Dijon, Montpellier, Lyon, Lille, Russie, Pays du Maghreb, Sénégal, Cameroun, Liban, Brésil, Syrie, Espagne,...). Cette attractivité a été favorisée par le fait que nous avons obtenu sur ce quinquennat un nombre important de co-financements de thèses issus d'organismes de recherche : 2 CNRS, 3 DGA, 2 CNES, 1 CEA, ... Le dispositif des bourses CIFRE (2) ainsi que celui des bourses en co-tutelles (Algérie, Maroc, Tunisie) a permis également de recruter bon nombre d'étudiants de thèse. Le laboratoire compte actuellement 12 étudiants en thèse, ce qui semble raisonnable étant donnée la taille de l'unité. Il ne faut pas oublier également que les thèses instrumentales requièrent des moyens et un encadrement technique, il est donc difficile de mener de front un grand nombre de doctorats à connotations instrumentales.

Devenir des docteurs (soutenance de thèse < 01\09\2015)

Christophe RISSER

Titre : "*Caractérisation et réalisation d'instruments de détection de gaz par spectrométrie laser photoacoustique*"

Financement : Cifre GSMA/AEROVIA

Direction : B. PARVITTE

Co-direction : V. ZENINARI

Soutenance de thèse : 5 février 2015

Situation actuelle : Ingénieur de recherche à Aérovia (CDI)

Alexandre PERRET

Titre : "*Etude des propriétés de transport du CO₂ et de l'éthanol en solution hydroalcoolique par dynamique moléculaire classique : application aux vins de Champagne*"

Financement : bourse CIFRE GSMA/Bull

Directeur de thèse : A. ALIJAH

Co-directeur de thèse : G. LIGER-BELAIR

Soutenance de thèse : décembre 2014

Situation actuelle : Field application scientist, CDI chez Discngine (Paris)

Thibault DELAHAYE

Titre : "*Contribution aux méthodes de calcul de spectres moléculaires à partir de surfaces ab initio : application et au méthane*"

Financement : Ministère

Directeur de thèse : V. TYUTEREV

Co-encadrant : M. REY

Date d'inscription : 2011

Soutenance de thèse : 7 novembre 2014

situation actuelle : Post-doc au LISA (Laboratoire Inter-universitaire des Systèmes

Atmosphériques), Créteil

Ahmad EL-MASRI

Titre : *Etude cinétique et mécanistique de la réactivité des composés organophosphorés avec les photo-oxydants atmosphériques.*

Financement : CPER AQUAL

Directeurs de thèse : A. CHAKIR et E. ROTH

Date d'inscription : 2011

Soutenance de thèse : 17 juin 2014

Situation actuelle : Post-doc au PC2A (PhysicoChimie des Processus de Combustion et de l'Atmosphère), Lille

Dominique MAMMEZ

Titre : *Détection de molécules gazeuses d'intérêt atmosphérique par spectrométrie infrarouge avec laser à cascade quantique largement accordable.*

Financement : Région Champagne-Ardenne

Directeurs de thèse : V. ZENINARI et B. PARVITTE

Date d'inscription : 2010

Soutenance de thèse : 12 novembre 2013

Situation actuelle : Post-doc à l'ONERA au DMPH/SLM (Département Mesures

Physiques, équipe Sources Laser et Métrologie), Paris

Roman KOCHANOV

Titre : *Contribution à la modélisation de spectres moléculaires à partir de surfaces d'énergie potentielle et d'Hamiltoniens effectifs : applications aux banques de données spectroscopiques*

Financement : Cotutelle France Russie

Directeur de thèse : V.TUYTEREV

Date d'inscription : 2010

Soutenance de thèse : 6 septembre 2013

Situation actuelle : Chercheur à l'Institut d'Optique Atmosphérique de l'Académie des Sciences de Russie, Tomsk

Lyamin MESSAADIA

Titre : "*Etudes théoriques et expérimentales de la dégradation atmosphérique des*

Financement : Cotutelle France Algérie (Proface/BAF)

Directeur de thèse : A. CHAKIR

Co-directeur de thèse : A. FERHATI (en Algérie)

Date d'inscription : 2007

Soutenance de thèse : 23 juin 2013 à Batna (Algérie)

Situation actuelle : Maître de conférences à la Faculté des Sciences - Université de JIJEL (Algérie)

Irène MAPPE-FOGAING

Titre : "*Mesures par spectrométrie laser infrarouge des flux de N₂O présents dans*

les sols agricoles et viticoles"

Financement : Ville de Reims

Directeur de thèse : G. DURRY

Co-encadrant de thèse : L. JOLY

Date d'inscription : mars 2010

Soutenance de thèse : 28 mars 2013

Situation actuelle : Post-doc au LSCE (Laboratoire des Sciences du Climat et de l'Environnement), CEA-Saclay

Mélanie GHYSELS-DUBOIS

Titre : *"Mesures in-situ à haute résolution par spectrométrie laser de CH₄, CO₂ et H₂O dans l'atmosphère moyenne sous ballons météos"*

Financement : Région Champagne-Ardenne

Directeur de thèse : G. DURRY

Co-encadrant de thèse : E. RIVIERE

Date d'inscription : 2009

Soutenance de thèse : 30 novembre 2012

Situation actuelle : Post-doc au NIST (National Institute of Standards and Technology) - Washington

Mohamed ERRAMI

Titre : *Devenir atmosphérique du bupirimate et des diazines, sa dissipation dans les fruits de tomate et sa dégradation électrochimique.*

Financement : Cotutelle France Maroc (Volubilis, organisme : Egide)

Directeur de thèse : A. CHAKIR

Co-directeur de thèse : E. ROTH

Date d'inscription : 2009

Soutenance de thèse : 5 novembre 2012 à Agadir (Maroc)

Situation actuelle : Ingénieur à l'ENSA à Agadir

Mariam EL RACHIDI

Titre : *Etude cinétique et mécanistique des réactions hétérogènes du folpel et du diméthomorphe avec l'ozone et les radicaux OH. Photooxydation homogène des composés morpholiniques avec les radicaux OH.*

Financement : Région Champagne-Ardenne

Directeur de thèse : A. CHAKIR

Co-directeur de thèse : E. ROTH

Date d'inscription : 2009

Soutenance de thèse : 9 mai 2012

Situation actuelle : Post-doc à KAUST (Arabie Saoudite)

Jérémie BURGALAT

Titre : *Développement d'un modèle microphysique en moments pour les modèles climatiques de Titan.*

Financement : Région Champagne-Ardenne

Directeur de thèse : P. RANNOU

Date d'inscription : 2009

Soutenance de thèse : 29 mars 2012

Situation actuelle : Ingénieur de recherche au GSMA, IR2-BAPE, concours 2015

4. Stratégie et perspectives scientifiques pour le futur contrat

4.1. Politique Scientifique et organisation du laboratoire

Le laboratoire est proposé pour un renouvellement sous la forme actuelle avec deux champs thématiques structurants, « Aéronomie » et « Spectroscopie ». Les évolutions à venir du climat terrestre vont renforcer très fortement le besoin d'améliorer notre connaissance sur le fonctionnement de la machine climatique. Les besoins en spectroscopie, en réactivité et en modélisation atmosphériques, en planétologie comparée ainsi qu'en instrumentation innovante pour la mesure de gaz s'en trouveront renforcés. Il est à noter que certains projets de recherche du laboratoire nous entraînent déjà par-delà le présent quinquennat, voir jusqu'à la fin du quinquennat à venir (Strateole 2 jusqu'en 2023, Total jusqu'en 2020, les deux ANR sélectionnées en 2016, e-PYTHEAS et WAVIL, ...).

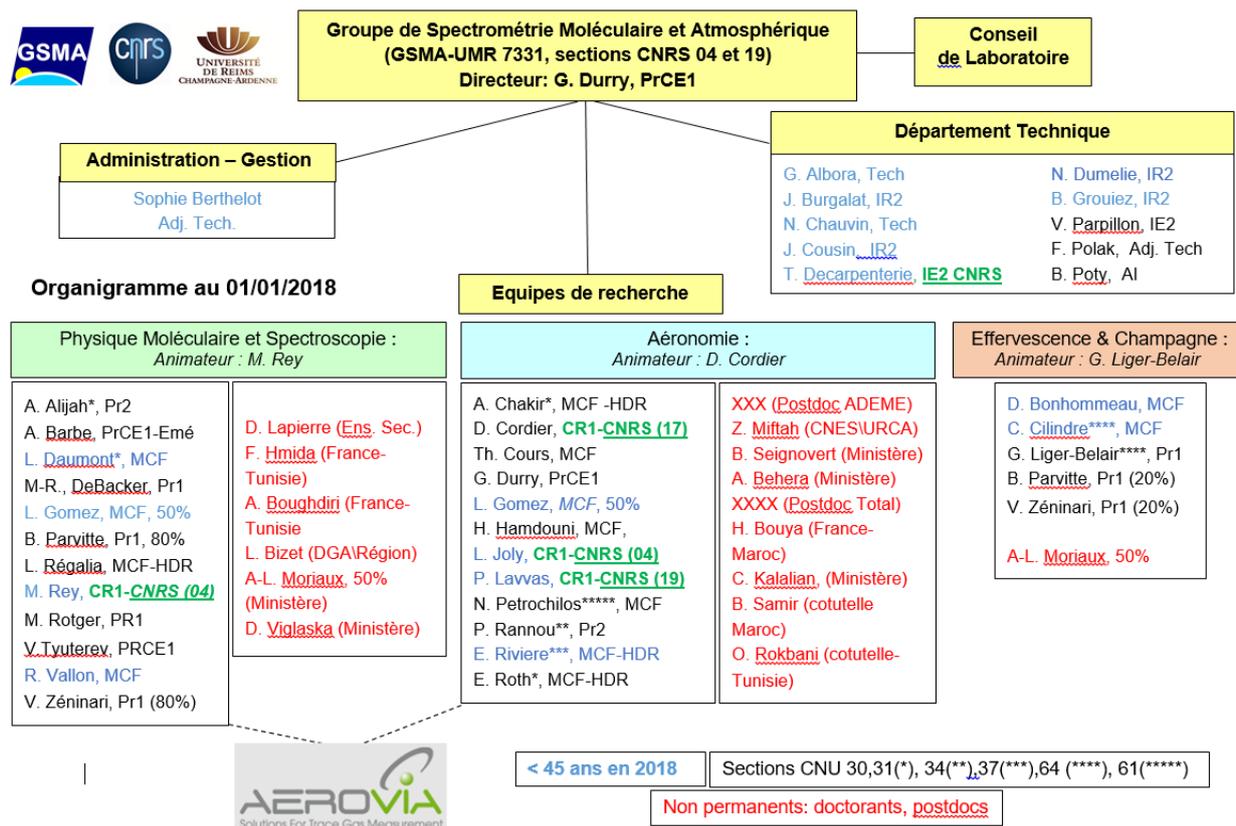
Comme discuté en détails dans le chapitre 1 («*Présentation de l'unité*»), Le laboratoire est isolé thématiquement au sein de l'ex-région Champagne Ardenne très axée sur les « agroressources » et « l'ingénierie des systèmes ». Ces orientations locales sont maintenues dans le cadre de la mise en place de la région Grand-Est. Pour parer à cet isolement thématique, le laboratoire va continuer lors du prochain quinquennat sa politique de recherche tournée vers Paris (situé à 45mn en TGV) et les laboratoires de la fédération de recherche des sciences de l'environnement d'Ile-de-France, l'IPSL. L'ancrage régional du GSMA continuera d'être assuré essentiellement par les activités de l'équipe Effervescence en lien très étroit avec le monde du Champagne ainsi que par nos activités de valorisation avec la start-up du laboratoire, Aerovia, qui emploie une dizaine de salariés à Reims (www.aerovia.fr). Nous allons également continuer une politique dynamique pour l'obtention de contrats industriels et de recherche au niveau national, européen et international comme nous l'avons fait ces dernières années. Depuis l'acquisition de la TF Brucker en 2013 sur des fonds CPER qui a permis le renouvellement du parc instrumental du laboratoire, le GSMA est de fait très peu dépendant des crédits du plan état-région. Cependant, nous devons aussi compenser l'absence de PIA dans l'ex région Champagne Ardenne.

Si nous avons acquis une certaine indépendance financière, nous sommes par contre très dépendants de la politique d'attribution des allocations doctorales tant du côté de l'université (les anciennes bourses « Ministères ») que de la Région. L'unité a fait un effort très important pour obtenir des financements de thèses d'organismes de recherche (CNES, DGA, CNRS, CEA) ou de bourses CIFRE (Bull, Aerovia) ou encore industrielle (Total) et continuera de maintenir cet effort. Néanmoins, nous avons besoin d'une à deux bourses (ou demi-bourse) sur le volant d'établissement chaque année pour maintenir la visibilité du laboratoire. Cela a toujours été le cas jusqu'à présent, y compris pour les thématiques « hors sol » comme la physique moléculaire théorique ou la planétologie ; en retour le laboratoire apporte des ressources propres à l'établissement et contribue à remplir ses indicateurs. Un second point majeur pour lequel nous dépendons fortement de la politique des établissements tutelles, est la politique de l'emploi. Sur le prochain quinquennat, il ne devrait pas y avoir de départ en retraite postérieur à celui de V. Tyuterev (PR-CNU30, 2018). Il est très clair que le renouvellement de ce poste est très important pour maintenir le potentiel scientifique de l'unité. Sur le quinquennat précédent, comme l'a montré l'analyse de la page 10, les postes d'EC qui ont pu être renouvelés ont été convertis en poste BIATSS sous l'argument de l'insuffisance des flux étudiants dans les formations de physique. Si cette politique se poursuivait sur le quinquennat à venir, cela conduirait à un affaiblissement scientifique dommageable du laboratoire. L'absence de possibilité de promotions pour les MCF méritants est aussi particulièrement démotivante. Il est aussi très important de préparer à l'avance la succession de l'actuel directeur au cours du futur quinquennat. Il est difficile aujourd'hui de faire de prospectives sur les ressources humaines, l'université étant confronté à de sévères difficultés financières ; le plan de retour à l'équilibre implique un gel ou du moins un gel partiel de l'emploi jusqu'à fin 2019. Néanmoins, un soutien de l'établissement sera extrêmement important pour le prochain quinquennat. En ce qui concerne, les RHs, côté CNRS, nous allons continuer une politique active de présentation de candidats en CN 04 et 19 sachant que nous avons réussi à obtenir deux postes de CR sur la période 2011-2015. Il est évident que pour un laboratoire composé très majoritairement d'EC, il est très important d'avoir des CR à plein temps pour renforcer l'impact en

recherche. Côté ITA, nous allons demander le renouvellement du poste de X. Thomas, IR-CNRS, parti en retraite fin 2016. Cependant, le département technique ayant déjà été fortement renforcé ces dernières années, la priorité pour le prochain quinquennat sera le potentiel scientifique de l'unité (EC, CR-DR).

Il est difficile de dire précisément au moment d'écrire ce document quelle sera l'implication de l'unité dans la formation car l'exercice d'accréditation des formations est décalé d'un an par rapport à la construction de l'offre recherche. Le laboratoire a cependant la volonté de porter un M2 à caractère professionnalisant autour de ces compétences en spectrométrie et mesure de gaz associé à un M1 de physique généraliste. Le contenu du futur M2 (Instrumentation-Gaz-Optique-Rayonnement, « IGOR ») porterait sur la spectroscopie appliquée et l'ensemble de l'instrumentation associée (spectrométrie laser et interférentielle) en visant des applications en environnement essentiellement, mais également en santé et sécurité. Par ailleurs, l'équipe de chimie du GSMA continuera à porter des responsabilités importantes (parcours, responsabilités pédagogiques du M1 et du M2) de la future mention de master « Risques et environnement » axée sur la gestion des déchets (traitement et transfert des polluants, valorisation des déchets, normes environnementales, pollution atmosphérique). Le laboratoire sera également impliqué (responsabilité de parcours, de mention de domaine) des futurs masters MEEF d'enseignement dans la continuité des responsabilités actuelles.

L'organisation fonctionnelle du GSMA a été modifiée conformément aux recommandations du rapport AERES 2012 et de celles des deux expertises effectuées dans le cadre de l'exercice d'autoévaluation de l'URCA en 2015. Les six équipes, jugées trop petites, ont été regroupées en trois équipes qui reprennent les deux axes historiques du GSMA, spectroscopie et aéronomie, ainsi que l'équipe Effervescence Champagne et Applications (ECA). Nous avons conservé une équipe ECA indépendante pour lui donner une bonne visibilité au sein du GSMA vis-à-vis du monde professionnel du champagne. Les équipes Aéronomie et RPA (chimie) se regroupent naturellement en « Aéronomie » pour se consacrer à la planétologie ainsi qu'à l'étude de la physico-chimie de la troposphère et de la stratosphère avec un volant instrumental important axé autour de la mesure de gaz par laser. Les équipes PMT (physique théorique), MSA (analyse de spectres) et SLA (spectrométrie laser) se regroupent naturellement en une équipe « spectroscopie » qui couvrira la modélisation moléculaire, l'analyse de spectres, la spectrométrie infrarouge et l'instrumentation laser innovante. Cette réorganisation fonctionnelle n'est pas une modification importante puisqu'elle est très proche du mode de fonctionnement réel du laboratoire. L'organisation en équipe aura pour fonction de fluidifier le passage de l'information dans les deux sens entre les personnels et la direction du laboratoire. Le nouvel organigramme fonctionnel est donné ci-dessous.



Pour favoriser les collaborations entre équipes et pour exploiter au maximum les potentialités du laboratoire qui vont de la modélisation moléculaire et atmosphérique jusqu'à l'instrumentation innovante, nous avons également mis en place pour le futur quinquennat une organisation transversale en isolant quatre thèmes scientifiques. Les responsables de ces thèmes auront pour mission de favoriser l'interdisciplinarité, de conduire la prospective et la réflexion scientifique. L'organisation transversale est donnée ci-dessous.

Nous avons joint au document une prospective scientifique qui reprend globalement cette organisation en quatre axes.

Physique Moléculaire et Spectroscopie	Aéronomie	Effervescence & Champagne	Département Technique
Molécules d'intérêts atmosphérique et planétologique <i>animateur : L. Daumont</i>			
Physique et chimie de l'atmosphère <i>animateurs : A. Chakir & E. Rivière</i>			
Planétologie <i>animateur : P. Rannou</i>			
Instrumentation laser innovante <i>animateur : R. Vallon</i>			

4.2. Points forts, points faibles de l'unité :

Points forts :

- Dynamisme de l'unité dans la recherche de contrats aux plans national, européen et international.
- Pluridisciplinarité : les capacités du laboratoire vont de la modélisation moléculaire jusqu'à la modélisation des atmosphères planétaires et jusqu'à l'instrumentation innovante pour la mesure atmosphérique.
- Bonne visibilité nationale et internationale, nombreuses collaborations avec l'Ile-de-France et à l'international.
- Soutien des organismes de recherche en termes de moyens, d'emplois, d'allocations de recherche (CNRS, CNES, DGA, CEA, ...).
- Forte activité de valorisation : ancrage dans le tissu économique local via la start-up Aerovia basée sur l'expertise en mesure de gaz par lasers et via les activités autour du champagne.

Points faibles :

- Isolement thématique territorial.
- Pas d'intégration dans les Programmes d'Investissement d'Avenir (échec du projet d'ISITE « CUBE »).
- Affaiblissement du potentiel scientifique suite aux campagnes d'emplois de ces dernières années (EC).
- Laboratoire de petite taille et formé essentiellement d'enseignants-chercheurs (20) avec peu de chercheurs d'organismes de recherche (4).

Points de vigilance :

- Veiller à maintenir une bonne dynamique de recherche dans un contexte d'isolement thématique territorial.
- Veiller à maintenir et renouveler le potentiel en recherche de l'unité (emploi).

4.3. Prospective scientifique pour chacun des quatre thèmes scientifiques et pour l'équipe Effervescence

<i>Molécules d'intérêts atmosphérique et planétologique</i>	79
<i>Physique et chimie de l'atmosphère</i>	86
<i>Planétologie</i>	92
<i>Instrumentation laser innovante</i>	96
<i>Effervescence</i>	101

Molécules d'intérêts atmosphérique et planétologique

Personnel permanent : A. Alijah (Pr2), L. Daumont (MCF), M.-R. De Backer (Pr1), L. Gomez (MCF), L. Régalia (MCF-HDR), M. Rey (CR1), M. Rotger (Pr1), V. Tyuterev (PrCE, retraite fin 2018, puis éméritat), A. Barbe (éméritat)

I. Développement de modèles théoriques, calculs *ab initio* et modélisation

L'équipe va poursuivre ses travaux sur l'amélioration des modèles déjà existants (court terme) et sur le développement de nouveaux (moyen et plus long terme). En effet, la connaissance précise des intensités des transitions rovibrationnelles dans l'infrarouge passe inévitablement pour la modélisation très précise d'états moléculaires *via* le développement d'outils théoriques adaptés. Suivant le type d'application, les précisions demandées ne seront pas forcément les mêmes. Par exemple, pour l'étude de *l'atmosphère terrestre*, des précisions spectroscopiques (voire métrologiques) sont parfois requises, à la fois sur les positions ($\leq 10^{-3} \text{ cm}^{-1}$) et les intensités (0.2-5%). Pour d'autres applications, comme en *planétologie* ou en *astrophysique*, les précisions demandées sur les positions des raies individuelles sont bien moins drastiques puisque les spectres observés sont généralement moins bien résolus mais s'étendent par contre sur une large plage spectrale et pour des températures pouvant aller de 80 K à plus de 2000 K. D'autre part, l'information globale sur les intensités intégrées et sur les opacités des gaz dans une large gamme de température est extrêmement importante dans la plupart des applications. Hormis pour quelques systèmes moléculaires relativement simples (2 ou 3 atomes), développer des modèles qui combinent à la fois la haute précision sur l'ensemble de toutes transitions possibles et la complétude pour différentes températures est difficilement envisageable en pratique (extrapolations peu fiables à partir des modèles effectifs « traditionnels »), c'est pourquoi d'autres approches doivent être trouvés. Un des moyens très prometteur d'y parvenir est de poursuivre notre travail sur les calculs de structure électronique (construction de surfaces potentielles et dipolaires *ab initio*), en étroite collaboration avec A. Nikitin, Tomsk, suivi par la résolution de l'équation de Schrödinger pour le mouvement quantifié nucléaire par des méthodes variationnelles (code TENSOR) et/ou méthodes « mixed » perturbative-variationnelles (code MOL_CT, *collaboration* : S. Tashkun, Tomsk) notamment dans le cadre du LIA Franco-Russe « SAMIA ». La force de cette approche est de pouvoir prédire avec pratiquement le même degré de précision les spectres ro-vibrationnels de tous les isotopologues d'une espèce donnée.

- **Court terme** : ces dernières années, l'équipe théorique-dans le cadre de projets ANR, PNP, LEFE-ChAt-a œuvré dans la mise en place de méthodes numériques et algébriques bien spécifiques afin de pouvoir rendre compte des propriétés intra-moléculaires de systèmes moléculaires de taille moyenne (de 3 à 6 atomes). Les résultats obtenus ont permis des avancées très significatives dans (i) l'analyse de spectres de molécules d'intérêt atmosphériques (ozone, méthane en collaboration avec Grenoble, Tomsk, JPL NASA) et (ii) la construction de listes spectroscopiques complètes (projet TheoReTS : <http://theorets.univ-reims.fr>), incluant toutes les bandes froides/chaudes nécessaires à la modélisation, à une température donnée, d'espèces d'intérêt planétologique et/ou astrophysique (M.Rey *et al* APJ 2014, JQSRT 2015, PCCP, 2013, 2016, JMS 2016) . A court terme, un travail de

validation de ces listes doit maintenant être entrepris. Ceci est actuellement le cas pour les listes froides de $^{12}\text{CH}_4$, $^{13}\text{CH}_4$ et $^{12}\text{CH}_3\text{D}$ entre 0.8 et 2 microns qui sont en train d'être confrontées aux spectres (VIMS et DISR) de Titan (transmission et occultation) (collaborations : P. Rannou, D. Cordier, T. Cours (équipe aéronomie du GSMA), B. Bézard, A. Coustenis (LESIA, Meudon)). L'autre travail de validation concerne les listes à chaud (700-1250 K) du méthane et de l'éthylène autour de 3 microns (collaborations : R. Georges (IPR, Rennes), P. Bernath (Norfolk, USA), R. Hargreaves (Oxford, GB), K. Lehmann (Univ. Virginia, USA)). Un gros travail d'attributions est également en cours pour le méthane principal entre 296 et 1000 K, dans la région à 1.6 microns (collaborations : A. Wang, P. Bernath (Norfolk, USA)).

- **Court et moyen terme** : nous allons considérer de nouveaux systèmes moléculaires (voir partie V) mais aussi tenter d'étendre ces travaux aux molécules linéaires (CO_2 , C_2H_2). Toujours concernant le méthane, R. Gamache (Univ. Lowell, USA) nous a contacté pour qu'on lui fournisse les fonctions d'ondes *ab initio* pour des études d'élargissements collisionnels. Jusqu'à présent, il utilisait des fonctions tirées de modèles effectifs qui s'avèrent assez limités dans certaines régions spectrales. Concernant les analyses, les spectres CRDS/DAS de Grenoble de $^{13}\text{CH}_4$ dans l'icosade sont en train d'être attribués à l'aide de nos calculs *ab initio* ; d'autres travaux sont actuellement en cours de réalisation et devraient bientôt être finalisés (octade de PH_3 , tétradécade de $^{13}\text{CH}_4$, régions à 10 et 3 microns de $^{12}\text{C}_2\text{H}_4$ et $^{13}\text{C}_2\text{H}_4$ Collaborations : A. Nikitin, E. Starikova (Tomsk, Russie), A. Campagne (Grenoble), K. Sung, L. Brown (JPL NASA), Rotger (GSMA), J. Vander Auwera (ULB, Belgique), L. Manceron (SOLEIL, ligne AILES)) avec l'extension dans les domaines de plus grands nombres d'onde.
- **Moyen et plus long terme** : Cependant notre approche est pour le moment limitée aux systèmes dits « semi-rigides » pour lesquels les mouvements nucléaires sont confinés autour d'une position d'équilibre. Or la spectroscopie moléculaire moderne s'oriente vers des systèmes de plus en plus complexes, généralement très « flexibles », d'intérêt atmosphérique ou même biologique. Ces systèmes moléculaires, qualifiés de non rigides, possèdent des spectres d'absorption plus difficiles à modéliser que ceux de systèmes rigides. Le formalisme des modes normaux, jusque-là utilisé pour caractériser les mouvements nucléaires de systèmes semi-rigides doit laisser sa place à une théorie mieux adaptée. L'idée sera de réutiliser nos outils théoriques actuels (théorie des groupes et symétrie, schémas de réduction/compression, tenseurs) mais cette fois avec des coordonnées curvilignes plus « physiques ».

II. Les hydrocarbures

Applications et modélisation Comprendre le cycle photo-chimique de divers objets planétaires nécessite une cartographie détaillée de nombreuses espèces moléculaires (voir comme exemple Fig.1 pour la complexité des processus). Une des familles concernées les plus importantes est celle des hydrocarbures, allant du plus simple, CH_4 , au plus complexes comme le benzène (C_6H_6). Les atmosphères présentant un ratio C/O élevé contiennent une partie importante d'hydrocarbures. Parmi les candidats, citons l'éthane (C_2H_6), un gaz à effet de serre jouant un rôle dans la chimie troposphérique. L'éthane est un polluant atmosphérique classé parmi les COV. Il est considéré comme un traceur associé aux émissions de méthane géologique (gaz de schiste). C'est l'hydrocarbure (hors CH_4) le plus

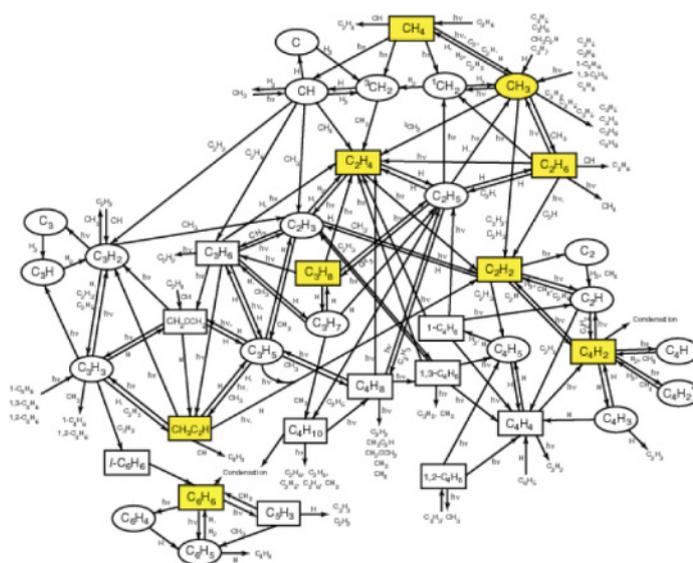


Fig 1 Photo-chimie de planètes géantes (image tirée de J. I. Moses, http://www.exoclimes.org/wp-content/uploads/2014/02/exoclimes14_moses.pdf)

abondant dans l'atmosphère terrestre et une demande croissante de la part des planétologues (du GSMA, entre autres) se fait également ressentir (atmosphères de Titan, Jupiter, etc.). D'un point de vue théorique, l'éthane présente de la rotation interne et s'inscrit donc pleinement dans la thématique «nouveaux développements Théoriques». Des hydrocarbures tels que CH_4 , C_2H_2 et C_2H_6 ou bien des composés organiques comme HCN sont des traceurs importants dans l'atmosphère de Jupiter. C_2H_6 y est formé par photolyse du méthane et par recombinaison de radicaux méthyles CH_3 . De nombreux autres radicaux sont impliqués dans des mécanismes chimiques complexes (C_2H , C_2H_4 , C_4H_2 , C_2H_5 , C_3H_6 , C_3H_8 ,...). En 2011 a été lancée la sonde JUNO qui va orbiter pendant 1 an à partir de 2016 autour de la planète géante Jupiter afin de récolter un maximum d'information et d'observation à partir de l'instrument JIRAM. La mission de JUNO est de mieux comprendre l'origine et l'évolution de Jupiter. Il est bien évident que vu la complexité et le nombre de degrés de liberté de ces systèmes non rigides, nous ne pourrions pas prétendre obtenir des résultats aussi précis que pour CH_4 ou C_2H_4 . Dans un premier temps, nous fournirons les sections efficaces pour différentes espèces (éthane dans un premier temps), même avec des modèles «simplifiés» car actuellement, il existe un manque cruel de données disponibles dans les bases spectroscopiques (HITRAN etc.). En parallèle, Les études spectroscopiques sur l'éthylène sont surtout d'intérêt planétologique. En effet, il s'avère qu'elles ont un rôle majeur pour la détermination des constituants de l'atmosphère de Titan [R. Courtin *et al.*, Icarus 270, 389-398 (2016)]. Peu d'analyses spectroscopiques existent sur des mesures et des modélisations de l'éthylène en intensité absolue. Nous nous proposons donc de continuer l'analyse faite à 10 μm en position et en intensité (partie consécutée de la thèse de A. Alkadrou et article accepté au JQSRT) par une analyse en position et intensité à 3 μm . Les spectres de cette région ont été enregistrés par J. Vander Auwera (ULB, Bruxelles). Nous voulons aussi étendre ces analyses à celle de l'isotopologue $^{13}\text{C}_2\text{H}_4$ dans la région à 10 μm dont les spectres ont été enregistrés à SOLEIL sur la ligne AILES en juin 2015 (L. Manceron).

Mesures pour la modélisation des atmosphères planétaires : CH_4 , hydrocarbures légers

Les nouveaux besoins de données spectroscopiques pour les applications aux milieux des atmosphères planétaires qui diffèrent de l'atmosphère terrestre de par leurs conditions thermodynamiques (température élevées ou basses, pression élevées) et chimiques (partenaires de collision différents) ainsi que par leur épaisseur géométrique nous ont amenés à développer une nouvelle cellule de 2 m pour des études à basse température. Cette cellule sera utilisée pour enregistrer les spectres IR du méthane et de ses isotopologues à basse température (refroidissement à l'azote liquide) pour des échantillons purs ou sous pression d'azote (conditions proches de l'atmosphère de Titan par exemple). La quantité d'azote liquide nécessaire au refroidissement d'un tel volume nécessite une mise aux normes de sécurité qui sera effectuée avant les mesures. D'autres petits hydrocarbures stables pourront ensuite être étudiés grâce à cette cuve.

Les gaz chauds

Nos travaux sont actuellement les plus précis concernant le méthane chaud dans la gamme 80-2000 K et 0-5000 cm^{-1} . (M.Rey et al APJ 2014, JMS 2016). Nous sommes en train d'étendre nos listes au-delà de 5000 cm^{-1} (typiquement jusqu'à 12000 cm^{-1} pour $T < 1000\text{K}$, 9300 cm^{-1} pour $T < 1500\text{K}$ et 6200 cm^{-1} pour $T < 2000\text{K}$). En parallèle, nous venons de soumettre la première liste théorique pour l'éthylène «chaud» ($T < 700\text{K}$) jusqu'à 6400 cm^{-1} . Les spectres à $T = 296\text{K}$ ont déjà été validés sur les données PNNL ($< 6200\text{cm}^{-1}$) à une résolution de 0.06 cm^{-1} (M.Rey A&A, soumis 2016). Les spectres chauds doivent maintenant l'être sur les données expérimentales (*collaboration* : R. Georges (IPR, Rennes)). Plus généralement, les gaz chauds rentrent dans le cadre de la thématique émergente des exoplanètes, sujet d'actualité, et réunissent plusieurs laboratoires français autour du projet ANR déposé, ePYTHEAS. *Collaborations* : LESIA Meudon, IPR Rennes, Grenoble, ICB Dijon. Cet axe porteur fait donc clairement apparaître les collaborations entre les spectroscopistes et planétologues du laboratoire, et plus généralement avec les équipes françaises et internationales.

III. Les molécules historiques au GSMA d'intérêt atmosphérique : ozone, H_2O , CO_2 , SO_2 ,...

Spectrométrie de la vapeur d'eau et applications aux études planétaires

De récents spectres de H₂O enrichi en ¹⁸O ont été enregistrés à l'aide du spectromètre TF de Reims fonctionnant en mode « pas à pas » dans la région de 6400 à 9450 cm⁻¹. Les parcours d'absorption vont jusqu'à 1,2 km. Cette étude qui débute en collaboration avec notre collègue S. Mikhailenko de l'IAO de Tomsk est une étude de longue haleine à l'image de celle menée sur l'isotopologue principal H₂¹⁶O (Régalia, et al. JQSRT, 136 (2014) 119), qui vise à proposer une nouvelle liste expérimentale de paramètres de raies dans la région définie ci-dessus.

Ces dernières années, nous nous sommes concentrés à travers différents projets financés par le programme national LEFE-ChAt, sur les mesures d'intensité de raies sur plusieurs régions spectrales et nous proposons maintenant de nous orienter vers la mesure des coefficients d'élargissement, autre paramètre de raie crucial pour définir parfaitement les profils de raie d'absorption des molécules. En effet, dans les bases de données principalement adaptées aux études atmosphériques terrestres, seuls les paramètres d'élargissement par l'air sont disponibles. Les plus proches planètes voisines de la Terre, Vénus et Mars, ont une atmosphère composée principalement de CO₂ (95-96%). De récentes études de Vénus par l'instrument SOIR (Solar Occultation in the Infrared) à bord de Venus Express, ont montré la présence de composés gazeux minoritaires comme la vapeur d'eau (Vandaele et al, J. Geophys. Res., 113 (2008) E00B23).

Afin d'améliorer la restitution des informations satellitaires et de mesurer avec précision l'abondance de ces espèces mineures, il est indispensable d'avoir accès à des valeurs de coefficient d'élargissement par CO₂ et ce notamment pour H₂O. Nous envisageons donc d'enregistrer de nouveaux spectres au GSMA, de faire une étude des paramètres collisionnels en collaboration avec Ha Tran du LISA, apportant son expertise sur un nouveau profil de raie (Ngo et al. JQSRT, 129, (2013) 89) et également en collaboration avec le BIRA-IASB (Institut royal d'Aéronomie spatiale de Belgique) afin de déterminer l'impact de nouveaux paramètres sur la restitution des données satellitaires.

Les bases de données spectroscopiques internationales sont elles aussi en attente de paramètres collisionnels adaptés à l'étude notamment d'autres planètes. Ce projet s'inscrit donc dans une des problématiques actuelles en spectroscopie. De plus les études de planète comme Vénus notamment permettent également de répondre à des questions importantes que l'on se pose sur la Terre et son histoire, et peuvent servir à comprendre notamment des aspects climatiques de notre planète.

Spectrométrie de l'ozone

Enfin, finissons par la molécule d'ozone qui est étudiée au laboratoire depuis bientôt 40 ans. A cours terme (année à venir), deux publications majeures relatives aux isotopes de symétrie Cs (¹⁶O¹⁶O¹⁸O et ¹⁸O¹⁸O¹⁶O) sont en cours de finalisation. En effet, dans la gamme spectrale 1000-5800 cm⁻¹, à partir des spectres infrarouges enregistrés avec le spectromètre TF de Reims, nous avons réalisés les analyses en positions en utilisant des Hamiltoniens effectifs et les analyses en intensités en utilisant des moments de transitions effectifs. Les récents travaux de Vladimir Tyuterev, permettent enfin de mettre en regard et de pouvoir comparer les résultats obtenus avec les calculs théoriques des positions et des intensités.

Récemment, un échantillon de 17O₂ (pureté égale à 70 %) a pu être acheté. Nous planifions l'enregistrement des spectres IR d'ozone enrichi en 17O dans les régions spectrales de 5 et 10 μm. Les analyses seront extrêmement compliquées de par la présence des 18 isotopes fabriqués lors de la génération d'ozone. Fort de notre expérience des analyses de 16O₃, 18O₃ et des isotopes enrichis en 18O, ces études pourront être menées à bien et nous obtiendrons des informations importantes sur la connaissance de la molécule et des substitutions isotopiques.

Projet européen en cours

Les études initiées dans le cadre du projet européen SEOM (instrument Sentinel 5P/TROPOMI) sur le SO₂ et l'ozone dans l'UV vont être finalisées. Elles utiliseront le spectromètre BRUKER à différentes résolutions ainsi qu'une cellule en verre de 20 cm pour le SO₂ et une cellule croisée pour l'ozone permettant de vérifier la pression d'ozone grâce à une lampe à mercure comme cela a déjà été fait dans les études du spectre IR.

De nouvelles molécules seront également étudiées telles que les COV légers. L'étude du spectre UV du formaldéhyde à haute résolution sera envisagée en collaboration avec une équipe effectuant des calculs *ab-initio* (R. Dawes, Missouri). L'acétylène, l'acétone, les dérivés benzéniques ainsi que d'autres solvants volatils seront également étudiés. Pour ces molécules nous utiliserons des cellules spécifiques afin de ne pas polluer les cellules servant pour les molécules plus "classiques".

Pour mesurer des profils de raies à température ambiante mais également sur une gamme de températures correspondant aux conditions de l'atmosphère terrestre pour les molécules stables et peu réactives, nous envisageons de développer une cellule thermostatée de petite taille et optiquement adaptée à notre spectromètre.

Les mesures sur les molécules d'intérêt atmosphérique H₂O, O₃, CO₂, N₂O, SO₂, H₂CO.... qui sont étudiées au laboratoire depuis déjà plusieurs années vont continuer. Il s'agit à la fois de répondre aux nouvelles exigences de précision nécessaires aux mesures des prochaines missions satellitaires européenne ou internationales (TROPOMI,...). Mais aussi de mieux caractériser leur spectre dans différents environnements (atmosphères planétaires, combustion...) Le nouveau spectromètre BRUKER acquis au laboratoire sera utilisé pour des mesures depuis l'IR jusqu'à l'UV pour ces applications, il sera utilisé pour améliorer la précision des paramètres de raies, déterminer les profils de raies et compléter les données existantes si nécessaires

IV. Etats moléculaires très excités et dynamique

La modélisation de spectres à très haute température passe obligatoirement par l'étude d'états moléculaires très excités intervenant dans le calcul des bandes chaudes. D'autre part la meilleure modélisation des états moléculaires très excités ainsi que ses processus de formation et de décomposition constituent un véritable défi pour les sciences fondamentales et la compréhension de processus atmosphériques. Depuis la découverte de l'enrichissement isotopique « anormal » de l'ozone dans l'atmosphère, des questions fondamentales sur la dynamique, liées à la forme des surfaces potentielles dans les régions de « transition state » (TS) sont posées. Nos résultats précédents (Tyuterev et al JCP 2013, CPL 2014) suivi des analyses de spectres de ¹⁶O₃ et ¹⁸O₃ (Barbe et al JQSRT 2013, Campargue et al JQSRT 2015, Starikova et al JQSRT 2016) offrent une nouvelle information sur les états proches de la dissociation. Un des résultats significatifs est que les changements des couplages entre les états excités par rapport aux substitutions isotopiques s'avèrent très irréguliers ce qui ne permet pas de traiter la dynamique de l'ozone par des approches statistiques (contrairement à ce qui était prévu par la théorie RRKM, Marcus et al). L'autre étape est l'étude des états métastables avec l'implication à la dynamique.

C'est le principal sujet de la collaboration de l'équipe théorique du GSMA (D.Lapierre, A.Alijah) avec l'Université Central Florida qui est déjà engagée avec V. Kokouline : les pistes de la nouvelle approche ont été esquissées dans notre présentation commune durant le dernier Colloque Européen à Dijon. Les durées de vie de résonances (états métastables au-delà de l'énergie de la dissociation) sont calculées en utilisant notre nouvelle fonction potentielle validée par les analyses de données expérimentales spectroscopiques. Ceci ouvre des perspectives pour des collaborations plus larges concernant la modélisation de la dynamique de formation, fragmentation et des échanges isotopiques. Il est envisagé d'étudier la propagation de paquets d'ondes sur nos surfaces d'énergie potentielle, le comportement asymptotique, les états métastables, et le transfert de l'énergie collisionnelle. Une des questions clé serait l'influence de la supposée « reef structure » sur la spectroscopie et la dynamique.

Le nouveau projet (Reims/Grenoble pour l'INSU CNRS, 2016-2018, coordinateur V.Tyuterev) vise à mettre en œuvre une technique spectroscopique ultra-sensible (CRDS) afin de couvrir l'intervalle manquant sous le seuil de dissociation (7900-8500 cm⁻¹) de l'ozone. En étendant nos calculs de chimie

quantique dans cette gamme, nous prévoyons l'analyse théorique de ces nouveaux spectres, suivie du calcul de la durée de vie des états métastables et les calculs dynamiques des taux de dissociation par propagation de paquets d'onde. La surface d'énergie potentielle sera optimisée sur la base des données expérimentales CRDS et sera utilisée pour la génération de la liste complète des énergies ro-vibration et coefficients de couplage des vibrations jusqu'à et au-dessus du seuil de dissociation. Ces nouvelles études expérimentales et les calculs théoriques avancés sur les états de l'ozone dans cette gamme de d'énergie cruciale, sur le couplage des modes de vibration par résonances et sur les états dissociatifs «porte» fourniront des informations manquantes sur la cinétique complexe de la formation et la décomposition de l'ozone.

Les autres aspects complémentaires concernent les effets de différences extrêmement significatives dans les canaux de la dissociation associée à la substitution isotopiques brisant la symétrie moléculaire. A notre demande, les expériences en excitations multi-photoniques par des cascades lasers à Ecole Polytechnique de Lausanne, équipe de Rizzo, sont en cours. Il s'agit dans un premier temps de substitutions HOH => HOD qui sont plus simple à maîtriser expérimentalement par rapport à celle de l'ozone mais qui permettraient de comprendre certains phénomènes communs au voisinage de D_0 . Les interprétations théoriques de ces expériences sont commencées avec nos collègues de l'Académie des Science de Russie. Une combinaison des deux approches : quasi-classique (structure de l'espace de phase, des familles d'orbites périodiques et de leur stabilité en fonction de la variation de l'énergie et de masses Mauguere, Tyuterev *et al*) et quantique (lignes nodales des fonctions d'onde), permettrait d'expliquer les résultats observés.

Cette thématique représenteraient également un intérêt pour une collaboration dans le cadre du GDR TheMS du CNRS « Dynamique quantique dans les systèmes moléculaires : théorie, modélisation, simulation » (Université Montpellier (F.Gatti), Aimé Cotton, Orsay (équipe O.Dulieu), ICB Dijon (P.Honvault).

V. Autres systèmes moléculaires

D'autres systèmes moléculaires d'intérêt divers (astrophysique, polluants atmosphériques, industrie, traceurs, aérosols) sont prévus d'être étudiés dans l'équipe « spectroscopie » afin d'élargir le champ des applications. Pour la plupart de ces systèmes, il sera question tout d'abord d'effectuer des calculs de structures électroniques, en étroite collaboration avec Tomsk (A. Nikitin + étudiants), afin de construire les surfaces potentielles et dipolaires associées. Parmi les candidats, citons les espèces CH_3X ($X=Cl, Br, I, Li, F$), le silane (SiH_4), germane GeH_4 , le tétrafluorure de carbone (CF_4), le formaldéhyde (H_2CO), l'acétonitrile (CH_3CN), SO_2F_2 , etc. Pour certains (silane, germane ou CH_3F), des premiers calculs variationnels ont d'ores et déjà été effectués au laboratoire et devront servir par la suite à démarrer une analyse de manière optimale ; les prédictions théoriques fournissant toutes les attributions nécessaires (nombres quantiques, symétries). Pour d'autres systèmes, des analyses sont en cours (CH_3I, SO_2F_2). CH_3I a pendant quelques années remplacé la molécule CH_3Br comme insecticide, puis s'étant avéré trop nocive, son utilisation a été arrêtée. Sa spectroscopie est méconnue et peu d'informations sont présentes dans les bases de données (HITRAN, GEISA). La spectroscopie en position de CH_3I est faite en collaboration avec L. Manceron du synchrotron Soleil. Elle porte sur la spectroscopie des bandes situées entre 1000 et 2000 cm^{-1} ainsi que sur l'étude des profils de raies (perturbateur principal : N_2). Ce travail est le sujet de thèse d'A. Boughdiri, étudiante en cotutelle entre Reims (GSMA) et Tunis (Pr H. Aroui, LDMMP). Concernant SO_2F_2 , c'est un insecticide très utilisé en Amérique du Nord et au Canada pour le traitement des charpentes en bois. Sa spectroscopie est méconnue et en tant que gaz à effet de serre, il est ainsi indispensable de pouvoir quantifier sa concentration dans notre atmosphère terrestre. Dans le cadre de la thèse en cotutelle entre Reims et Tunis de F. Hmida, nous avons repris l'analyse en position et en intensité des bandes fondamentales de cette molécule. La molécule étant lourde, plusieurs de ses bandes fondamentales sont situées en-dessous de 1000 cm^{-1} . De ce fait, les spectres ont été enregistrés avec un rayonnement synchrotron ainsi que dans une cuve multiple passage et basse température afin de s'affranchir du problème des bandes chaudes. Une première publication sur l'analyse en position de la bande fondamentale ν_2 vers 850 cm^{-1} est acceptée au JMS.

Parmi les autres sujets d'étude, l'équipe possède également une très grande expertise théorique sur le système H_3^+ (A. Alijah), pour les applications astrophysiques. A partir d'une nouvelle surface dipolaire et de notre dernière surface potentielle précise, incluant corrections adiabatiques, relativistes et QED, il est prévu de construire une liste de transitions pour cette molécule. Un nouveau modèle pour la modélisation des effets non adiabatiques est également prévu (*collaborations*: O. Polyansky and J. Tennyson (UCL), J. R. Mohallem (Federal University of Minas Gerais, UFMG, Brasil), PhD thesis P. Amaral). Dans le même esprit, des calculs très précis (avec création de "line lists") vont être effectués pour la molécule LiH (J. R. Mohallem (UFMG) and L. Adamowicz (Univ. Arizona), L. Diniz, postdoc), ainsi que pour HF et LiF, afin de valider notre "mass model" pour les effets non-adiabatiques. Enfin, nous souhaitons poursuivre l'étude de molécules dans un champ magnétique externe. Pour cela, nous développerons des fonctions d'essai "spéciales" pour (i) le problème électronique et (ii) le calcul de la PES et des états rovibrationnels pour H_2^+ et H_2 .

VI. Bases de données

L'objectif principal de ce travail sera d'alimenter les banques de données spectroscopiques : les bases « génériques » internationales (HITRAN, GEISA) et celles qui incluent l'information originelle obtenue par le GSMA avec ses proches partenaires.

Nous souhaitons évidemment poursuivre ces travaux pour les molécules historiques du GSMA, les listes expérimentales pour H_2O et le système informatique S&MPO « Spectroscopy and Molecular Properties of Ozone » (<http://smpo.univ-reims.fr>), mais aussi développer de nouveaux outils pour la modélisation globale afin d'étendre les champs d'application (projet TheoReTS, voir section V) en collaboration étroite avec l'Académie des Sciences de Russie.

Le but final est de fournir des données fiables afin de mieux comprendre la physico-chimie de divers objets planétaires/astrophysiques ainsi que de l'atmosphère terrestre (gaz à effet de serre). Comme il est déjà mentionné ci-dessus, les bases de données spectroscopiques internationales actuelles sont aussi en attente de paramètres collisionnels.

Notons aussi que la majorité des analyses de CH_4 (^{12}C et ^{13}C) de ces 5 dernières années a été fait entre Tomsk (A. Nikitin) et Reims, à partir des spectres expérimentaux CRDS/DAS de Grenoble (A. Campargue *et al.*) et de ceux « long parcours » de l'équipe TF du GSMA (X. Thomas, L. Daumont, L. Régalia *et al.*). La situation est similaire pour l'éthylène puisque l'équipe vient de terminer l'analyse de la tétrade de $^{12}C_2H_4$. En résumé :

- ⇒ H_2O , ozone, méthane et éthylène : mesures et analyses => prochain HITRAN/GEISA
- ⇒ Le groupe a mis en place une base théorique fondée sur les résultats de calculs *ab initio* (projet TheoReTS) qui s'inscrit également dans le cadre du LIA SAMIA avec la Russie (Tomsk). Les molécules déjà ciblées sont pour le moment les systèmes rigides CH_4 , C_2H_4 , PH_3 , SiH_4 , GeH_4 , CH_3X ($X=I, Li, Br, F, Cl$), CF_4 de 80 à plus de 1500 K
- ⇒ Projet Européen VAMDC (EcaSDa), en collaboration avec Dijon (V. Boudon).

La finalité de nos travaux sera d'inclure dans les différentes bases (qui seront alimentées et mises à jour régulièrement) toutes les molécules citées dans les paragraphes précédents.

VII. Modélisation des propriétés radiatives de la haute atmosphère dans des conditions « Non-LTE »

Dans les conditions spécifiques de la haute atmosphère (à très basses températures et pressions sous l'effet du rayonnement solaire), les molécules ne sont pas en état d'équilibre thermodynamique local. Ceci se traduit dans les phénomènes dit « Non-LTE » (Non Local Thermodynamic Equilibrium) pour l'absorption et émission du rayonnement. La prise en compte de la distribution non-Boltzmanienne de la population des niveaux d'énergie a une importance cruciale pour l'interprétation des mesures satellitaires. Cela fait partie des programmes spatiaux internationaux et plusieurs équipes travaillent dans ce domaine aussi bien pour l'atmosphère terrestre que pour les atmosphères planétaires. Le problème est le manque de données précises concernant les niveaux quantiques rovibrationnels très élevés ainsi que les probabilités de transitions correspondantes.

Les travaux de l'équipe en spectroscopie théorique du GSMA (M.Rey, V.Tyuterev, A.Alijah) sur des états des énergies élevés des molécules atmosphériques peuvent contribuer à une meilleure modélisation de ce phénomène. L'équipe de A. Kutepov de l'Université de Washington a récemment démontré que

l'utilisation dans des modèles « Non-LTE » de nos prédictions (TheoReTS liste « Reims-Tomsk » : <http://theorets.univ-reims.fr>) pour les bandes très élevées du méthane changerait la population des états hautement excité de façon très significative par rapport aux données disponibles dans la base internationale HITRAN. La collaboration sur ce sujet est engagée avec des résultats préliminaires présentés dans le Colloque HITRAN, mais l'analyse approfondies concernant les isotopologues et les « bandes chaudes » est encore nécessaire.

A terme, ce travail peut être élargi à d'autres molécules atmosphérique, la collaboration dans ce sens est engagée avec le Laboratoire de la Météorologie Dynamique de l'École Polytechnique (A.Feofilov, R.Armante) dans le cadre du projet LEFE de l'INSU.

VIII. Application industrielles

L'objectif est de participer au développement d'appareils destinés à la surveillance des émissions de polluants gazeux industriels. Il s'inscrit dans les axes des politiques actuelles de développement (Anticiper : prévenir, surveiller et tracer) et participera à répondre aux évolutions réglementaires actuelles et à venir, d'une part Européennes avec la mise en application, depuis début 2013, de la directive IED (Integrated Emission Directive) et d'autre part Américaines avec l'imposition pour les centrales électriques et le secteur de la combustion de la mesure d'HCl à très basse teneur. Le contrat ULIS obtenu au laboratoire nous permet de participer à ces développements en modélisant les spectres des molécules issues de combustion (utilisation des bases de données existantes) et en complétant les données manquantes adaptées aux conditions de mesures dans les milieux industriels. Le HCl est un des cas pour lesquels une quantification précise est nécessaire, aussi nous développerons une cellule pouvant accueillir de petites quantités de HCl (afin de respecter les normes de sécurité) et permettant de mesurer le spectre des bandes IR principales dans des conditions adaptées.

Prospective physique et chimie de l'atmosphère

Personnel permanent : A. Chakir (MCF-HDR), G. Durry (PRCE1), L. Joly (CR1), E. Rivière (MCF-HDR), E. Roth (MCF-HDR), H. Hamdouni (MCF)

La prospective des recherches concernant l'aéronomie terrestre se bâtit autour de cinq activités. Elle s'inscrit en grande partie dans la continuité des activités du précédent quadriennal, mais s'appuie sur des projets à venir ou nouvellement débutés. Une activité proposée est néanmoins nouvelle pour l'équipe et inédite en Europe.

1. Composition de la haute troposphère et de la basse stratosphère tropicale

a) L'activité précédente fut marquée par un projet d'envergure soutenue par l'ANR basée sur une campagne de mesures au Brésil sous petits ballons, visant à mieux comprendre quantitativement le rôle des overshoots – pénétrations convectives atteignant la stratosphère- sur le bilan local et continentale de la vapeur d'eau dans la basse stratosphère (voir bilan d'activité). Ce projet, nommé TRO-pico, porté par E. Rivière au GSMA, et dont le financement est officiellement achevé fin 2015, est encore en cours de valorisation via des publications. Une thèse, non financée par l'ANR mais dont le sujet porte sur l'impact globale des overshoots sur le bilan de l'eau – but ultime de TRO-pico, est en cours et s'achèvera fin 2017. Il s'agit, à partir des résultats issus de quantification à fines échelle de l'hydratation de la stratosphère par les overshoots, d'extrapoler leur impact à plus grande échelle. Dans ce thème, un projet « Overshoots à grande échelle » a été déposé (porteur E. Rivière, GSMA) fin 2015 et financé par le LEFE pour deux ans, en collaboration avec le LMD, le LATMOS, le LA, le CNRM et le LACy. Il s'agit de fédérer tous les acteurs de la recherche française sur la convection profonde tropicale pour mieux comprendre le rôle global des overshoots sur les échanges troposphère-stratosphère. Cette collaboration a déjà commencé dans le cadre de la thèse d'A. Behera où les entrées des observations satellitaires d'overshoots par sondeur micro-ondes (MSU, AMSU), ou les sommets de nuages convectifs à partir de satellites géostationnaires (GOES et MSG), fournis par le LMD, sont utilisées dans un exercice de modélisation à l'échelle continentale. Au GSMA, le

modèle méso-échelle BRAMS est utilisé à l'échelle du Brésil à relativement faible résolution (20 km horizontalement), ne permettant pas la prise en compte des overshoots tropicaux et leur transport vertical associé. Dans un futur proche, nous chercherons à forcer l'occurrence des overshoots vue par les observations satellitales dans le modèle en y associant une masse supplémentaire d'eau stratosphérique. Ainsi une comparaison des bilans d'eau stratosphérique dans chaque cas permettra une première quantification de l'impact à grande échelle des overshoots.

b) Une autre activité majeure concernant les recherches sur la basse stratosphère tropicale concernera la campagne Stratéole 2. Stratéole 2 est un projet financé et organisé par le CNES, et porté scientifiquement par Albert Hertzog au LMD. Il vise en premier à mieux comprendre tous les processus dynamiques de la stratosphère tropicale, en particulier l'oscillation quasi-biennale (QBO selon l'acronyme anglais). Néanmoins le transport troposphère-stratosphère est également un sujet d'étude du projet. Stratéole 2 est basé sur une campagne de mesures sous ballons pressurisés de vols longue durée (plusieurs semaines) lancés dans la ceinture intertropicale. Le GSMA participera à ce projet via plusieurs vols ballons à bord desquels une version longue durée des spectromètres pico-SDLA H₂O et pico SDLA CO₂ seront intégrés. Le plafond des vols en configuration TTL auxquels les pico-SDLA sont intégrés devrait être typiquement de 18 km. Cette altitude est particulièrement intéressante dans le cadre d'étude d'échanges troposphère-stratosphère puisque cette altitude correspond encore à la gamme d'altitude de la TTL (couche de la tropopause tropicale) c'est à dire la couche où la convection profonde a encore un impact. Il n'est en effet pas si rare d'observer des overshoots dépasser cette altitude. Ainsi, avec des vols longue durée restant dans la ceinture tropicale, la mesure permettra d'échantillonner tout type de régions tropicales, qu'elles soient continentales ou océanique, semi-désertique ou au contraire composées de forêts équatoriales, autant de région qui peuvent contribuer de manière différentes aux échanges troposphère stratosphère via différents cycles et différentes intensités de la convection profonde, et d'efficacité du transport lent par chauffage radiatif. Ainsi le jeu de donnée acquis pendant cette campagne sera également une autre manière de discriminer l'impact relatif de chaque région dans ces échanges. Le calendrier précis de la campagne devrait être validé très prochainement et les dates avancées jusqu'à présents sont une campagne en 2019 et 2022, pour échantillonner deux phases différentes de la QBO (phase ouest et phase est des vents stratosphériques équatoriaux). Le rôle du GSMA ne se limitera pas à cette partie mesure. Il interviendra dans l'interprétation de ces mesures via des exercices de modélisation à l'échelle continentale avec le modèle BRAMS ou méso-NH. Enfin, ce n'est pas encore défini à l'heure d'écrire ce document, mais il est envisageable d'organiser une campagne de petits ballons stratosphériques – du type de celle de TRO-pico - mais avec des ballons sondes depuis le sol en synchronisation avec le passage du ballon longue durée au dessus du site de campagne.

2. Tendances stratosphériques des gaz à effet de serre

Les développements instrumentaux récents au sein du laboratoire, dont la tendance inexorable à la miniaturisation, permet d'envisager de nouveaux objectifs scientifiques initialement trop coûteux en matériel et surtout en moyen humain pour mettre en œuvre de tels projets. En effet, les nouveaux spectromètres infrarouges AMULSE (PI Lilian Joly) et version miniaturisée de pico-SDLA visent des masses totales n'excédant pas 2,5 kg. Ceci permet à ces instruments mesurant soit CO₂, soit CH₄ soit H₂O, d'être lancés sous des petits ballons sondes, comme ce fut le cas pendant la première campagne AMUSLE en Champagne-Ardenne. Ainsi, les vols associés sont extrêmement peu coûteux et facile à mettre en œuvre par rapport à des vols de ballons classiques supérieurs à 500 m³.

Dans un contexte de changement climatique, la mesure de tendance de des gaz à effet de serre est cruciale, d'abord pour mieux cerner leurs émissions et leur évolution, d'autre part parce qu'elle permet la quantification du forçage radiatif associé et son évolution dans le temps. Mais n'oublions pas qu'elle offre également une meilleure compréhension des rétroactions sur le climat. Dans la stratosphère à laquelle nous nous intéressons ici, la mesure des gaz à effet de serre nous renseigne sur les changements dans les échanges entre la troposphère et la stratosphère, dans la circulation de Brewer Dobson (Randel et al.,

2006), ou l'âge moyen de l'air c'est à dire le temps de passage des masse d'air entre l'entrée stratosphérique au tropique et sa sortie à plus hautes latitudes. Ceci est possible car la plupart des gaz à effet de serre étudiés, si l'on excepte la vapeur d'eau sujette à des cycles de condensation/sédimentation/évaporation, ont une longue durée de vie dans la troposphère mais plus courte dans la stratosphère. Dans le cas de la vapeur d'eau, premier gaz à effet de serre sur terre (dont les changements d'origine strictement anthropique sont faibles), les tendances de vapeur d'eau peuvent également être vues comme les signatures d'un changement climatique. On sait par exemple qu'aux tropiques, la tendance de vapeur d'eau stratosphérique est assez bien corrélée avec la température de la tropopause (Rosenlof, and Reid, 2008). Dans cette partie, nous voulons nous intéresser aux tendances stratosphériques des gaz à effet de serre principaux, car le nouveau développement de senseur léger permet à moindre coût et infrastructure de mettre en œuvre des vols réguliers (typiquement un par mois) pendant plusieurs années, pour mettre en évidence des tendances de ces gaz dans la basse stratosphère, et donc de nous renseigner sur les processus évoqués plus haut. Des mesures régulières de tendances de vapeur d'eau stratosphérique ont été effectuées à Boulder, CO, USA, depuis les années 80 à partir de ballon par le Frost Point Hygrometer de la NOAA (Rosenlof et al. 2001), constituant un jeu de données inédit pendant cette période, au début de laquelle les mesures satellitales de vapeur d'eau étaient entachées d'une trop grande erreur pour en déduire la moindre tendance. Si les mesures satellitales de vapeur d'eau se sont bien améliorées, elles gardent une résolution verticale et horizontale limitées. Ainsi, les profils verticaux à haute résolution sont les plus adaptés à estimer des tendances de vapeur d'eau, mais aussi celles des autres gaz à effet de serre.

La famille des AMULSE et des futurs pico-SDLA réduits sont des outils idéaux pour la mesure de tendance sous petits ballons sondes. Un projet à été déposé au TOSCA (porteur Lilian Joly) en avril 2016 dont une partie vise à financer le début d'une série de mesures en routine depuis la base d'Aire sur l'Adour avec l'aide du personnel CNES sur place. Nous visons des vols réguliers (une fois pas mois) pour le CO₂, CH₄ et H₂O. Les instruments sont récupérés le jour même par les équipes du CNES. Dans un premier temps nous avons demandé un financement pour des lâchers sur une période de deux ans pour démontrer la faisabilité et la pertinence d'un tel dispositif. Un nouveau projet dédié visera à financer ces mêmes vols sur une période d'au moins une décennie.

Randel, W. J., Wu, F., Vömel, H., Nedoluha, G. E., and Forster, P.: Decreases in stratospheric water vapor after 2001: Links to changes in the tropical tropopause and the Brewer-Dobson circulation, *J. Geophys. Res.*, 111, D12312, doi:10.1029/2005JD006744, 2006.

Rosenlof, K. H., and G. C. Reid (2008), Trends in the temperature and water vapor content of the tropical lower stratosphere: Sea surface connection, *J. Geophys. Res.*, 113, D06107, doi:[10.1029/2007JD009109](https://doi.org/10.1029/2007JD009109).

Rosenlof, K. H., *et al.* (2001), Stratospheric water vapor increases over the past half century, *Geophys. Res. Lett.*, 28, 1195–1199.

3. Nuages stratosphériques polaires (PSC)

Le GSMA est impliqué dans le projet TOSCA/LEFE EECLAT (Expecting Earth-Care, Learning from A-Train), qui vise en particulier à la valorisation des données satellitales Cloudsat et CALIPSO par la communauté française, et de préparer les algorithmes permettant d'exploiter au mieux les mesures à bord du satellite Earth-Care. Le GSMA participe au volet « nuages stratosphériques polaires ». Sa contribution a été reportée à cause de la trop forte implication dans le projet ANR TRO-pico. L'activité a commencé en 2016, et devrait se poursuivre dans les deux prochaines l'année. L'idée maitresse est toujours de mieux cerner les processus microphysiques menant à la formation des NAT (Nitric Acid Trihydrate, ou PSC 1a), toujours sujet à débats et à fortes incertitudes. Le très large jeu de mesures satellitales par CALIOP et la classification des PSC par Pitts et al. (2009) nous permet d'obtenir les occurrences de PSC dans le vortex

arctique pendant près d'une décennie. Notre approche vise à identifier des « matchs », c'est-à-dire des trajectoires de masse d'air qui aurait été sondée deux fois par CALIOP et dont au moins une mesure aurait identifié la présence de NAT. Cette approche requiert un large travail en amont pour calculer toutes les trajectoires avec un modèle lagrangien, puis d'identifier les « matchs » correspondantes. Une fois tout les cas identifiés, nous utiliserons le modèle lagrangien MiPLASMO (voir par exemple Riviere et al., 2003) avec une microphysique des PSC mise à jour pour tester l'évolution des PSC le long des trajectoires matchs, et le cas échéant, proposer de nouvelle piste quant au mode de formation des NAT. Le GSMA vient d'obtenir du CNES dans ce cadre le financement de vacation pour le calcul de trajectoires match.

Pitts, M. C., L. R. Poole, and L. W. Thomason, CALIPSO polar stratospheric cloud observations: second-generation detection algorithm and composition discrimination, Atmos. Chem. Phys., 9, 7577-7589, doi:10.5194/acp-9-7577-2009, 2009

Rivière, E. D., Y. Terao, et H. Nakajima, A Lagrangian method to study stratospheric nitric acid variations in the polar regions as measured by the Improved Limb Atmospheric Spectrometer, J. Geophys. Res., 108(D23), 4718, doi: 10.1029/2003JD003718, 2003.

4. Réactivité atmosphérique des contaminants organiques

La prise en compte de la réactivité atmosphérique de la matière organique dans les différents modèles atmosphériques est nécessaire pour appréhender les différentes problématiques de la pollution atmosphérique. En effet, son oxydation dans le compartiment atmosphérique conduit à une multitude des composés multifonctionnels qui impactent la qualité de l'air et les changements climatiques. Des mesures pointues et complémentaires sont alors nécessaires pour étudier le devenir de ces contaminants organiques, en termes de persistance et transformation chimique.

Dans la continuité des travaux menés dans notre laboratoire, concernant la réactivité atmosphérique des contaminants organiques, les études en laboratoire sur la réactivité atmosphérique des différentes catégories de composés multifonctionnels seront poursuivies. Par ailleurs la mise au point des expérimentations, basées sur la spectroscopie IR et UV, pour la quantification des espèces atmosphériques peu stables et/ou instables (radicaux peroxy, nitrates, acide nitreux, formaldéhydes, ...) seront élaborés.

Devenir atmosphérique des contaminants organiques multifonctionnels

COV d'origine biogénique (COVB) : les aldéhydes et les alcools insaturés

Les émissions de COV d'origine biogénique (COVB) sont largement supérieures à celles des sources anthropiques et il est aujourd'hui reconnu que ces composés exercent une profonde influence sur la chimie atmosphérique^{53,54} et cela à travers leur impact sur le bilan de HO_x, la production d'ozone, et leur capacité à former des aérosols organiques secondaires (AOS). Le changement climatique actuellement en cours entraîne des modifications dans les flux de COVB, augmentant ainsi leurs émissions. Par ailleurs, compte tenu de la diminution attendue des émissions anthropiques dans les prochaines années, le rôle relatif des COVB dans la qualité de l'air va augmenter⁵⁵. Plusieurs études^{56,57} en laboratoire et sur le terrain, ont montré que des alcools et aldéhydes insaturés en C₅ et C₆ sont libérés dans l'atmosphère en quantité non négligeable suite à des processus d'oxydation enzymatique des acides linoléique et linolénique en réponse au stress. Ces composés oxygénés insaturés en C₅ et C₆ ont été détectés dans l'atmosphère à des

⁵³ Chameides, W. L.; Lindsay, R. L.; Richardson, J.; Kiang, C. S. Science 1988, 241, 1473.

⁵⁴ Fehsenfeld F.C., Calvert J.G., Fall R., Goldan P.D., Guenther A.B. et al. Global Biogeochem. Cycles 1992, 6, 389.

⁵⁵ Karl M., Guenther A., Köble R., Leip A., Seufert G, Biogeosciences 2009, 6, 1059.

⁵⁶ De Gouw J.A., Howard C.J., Custer T.G., Fall R., Geophys. Res. Lett. 1999, 26, 811.

⁵⁷ Karl T., Guenther A., Jordan A., Fall R., Lindinger W. Atmos. Environ. 2001, 35, 491.

concentrations de l'ordre de quelques ppbv. La plupart des végétaux sont concernés par ce type d'émission comme les feuilles de vigne et les trèfles coupés.

Bien que la réaction initiale d'oxydation de ces composés oxygénés insaturés avec les radicaux OH ait été décrite dans quelques travaux, des études complémentaires, en particulier en fonction de la température, sont nécessaires. Par ailleurs, les études cinétiques de la dégradation atmosphérique de ces composés (alcools et aldéhydes $> C_4$) par le radical nitrate et par l'ozone et d'autant plus les études mécanistiques sont rares voire inexistantes en particulier celles en fonction de la température. Il est donc important de connaître la réactivité atmosphérique de ces composés, car ces données sont **nécessaires** pour compléter les modèles atmosphériques utilisés aussi bien pour les prévisions de qualité de l'air que pour l'élaboration des textes réglementaires.

En effet, plusieurs études modélisant la transformation de COV montrent que les prédictions des modèles sont très sensibles aux constantes de **réactions COV + oxydant atmosphérique** et que l'origine des divergences modèle/observation concernant les bilans HO_x et/ou les rendements en AOS pourraient ainsi résulter en partie du manque de précision de **ces constantes concernant une catégorie de composés organiques polyfonctionnels d'origine biogénique**^{58,59}. En outre, l'absence de **données mécanistiques** concernant les **voies réactionnelles et les rapports de branchement des réactions initiales** (COVB et oxydants atmosphériques) et **l'effet de température** sur la réactivité sont pressentis comme étant des sources des écarts observés entre les modèles et les observations.

L'objet de nos études dans les années à venir est d'apporter les informations indispensables sur le devenir atmosphérique des COVB type alcools et aldéhydes linéaires insaturés $\geq C_5$. Dans le contexte du changement climatique et de l'augmentation des températures, il est attendu une recrudescence des épisodes de stress sur la végétation et une modification des émissions biogéniques vers davantage de COVB oxygénés. Afin de pouvoir anticiper l'impact de ces changements sur la qualité de l'air et mettre en place des politiques efficaces de protection des populations et de remédiation, il apparaît nécessaire de connaître avec précision la réactivité de ces espèces majeures en termes d'émissions biogéniques. Les données collectées permettront d'enrichir les bases de données cinétiques et spectroscopiques concernant ces espèces et d'améliorer les modèles de chimie de l'atmosphère, en particulier ceux impliquant les COVB.

(Ce travail sera effectué en collaboration avec le laboratoire, Institut de physique de Rennes, Université de Rennes 1, Ecole des mines de Douai dans le cadre du projet Irfe/CHAT 2016-2018. Par ailleurs ces travaux constitueront l'essentiel de la thèse de C. Kalalian, bourse Ministère).

Polluants atmosphériques organiques émergents : les pesticides

A nos jours, l'instauration des normes françaises concernant les seuils de pesticides ainsi que leur surveillance dans l'air ne font pas l'objet d'exigences particulières en France, malgré les effets néfastes qu'engendre leur utilisation. Le comportement atmosphérique de ces composés dépend des processus avec lesquels ils sont éliminés (dépôt ou par transformation chimique) et de leurs propriétés physico-chimiques⁶⁰. En outre, leurs dégradations atmosphériques peuvent conduire à la formation d'autres molécules qui peuvent être plus toxiques que le composé parent. Ces dernières années, plusieurs travaux ont été effectués dans ce domaine, cependant, plusieurs questions demeurent ouvertes : **De quelle manière la transformation photochimique dans l'atmosphère des pesticides conduit-elle à la dégradation de la qualité de la pollution de l'air ? Quels sont les effets des produits de dégradation sur l'environnement?**

⁵⁸ Holzinger R., Lee A., Paw U K.T., Goldstein A.H., Atm. Chem. Phys. 2005, 5, 67

⁵⁹ Arneeth A., Niinemets U., Trends Plant Sci. 2010, 15, 118.

⁶⁰ André Wolters, Pesticide Volatilization from Soil and Plant Surfaces: Measurements at Different Scales versus Model Predictions, Diese Dissertation ist auf den Internetseiten der Hochschulbibliothek online verfügbar.2003.

Pour répondre à ces interrogations, il est donc important de réaliser à la fois des mesures sur le terrain et au laboratoire permettant d'une part de caractériser les flux de ces contaminants (molécule parent et produits) émis suite à l'application de pesticides et d'autre part de déterminer leur devenir atmosphérique et leur impact sur les bilans (NO_x, HO_x, carbone organique). C'est dans ce contexte que se situe nos travaux en cours et à venir. Ils consistent à caractériser les transformations photochimiques des pesticides, en particulier les composés organo-azotés hétérocycliques et leurs métabolites dans des conditions atmosphériques. Les objectifs de ces travaux sont :

- déterminer des constantes de vitesse, à différentes températures et pressions, des réactions entre une série de composés organo-azotés hétérocycliques, de la famille triazoles et anilines et les radicaux OH, l'ozone et les radicaux nitrates en phase hétérogène et gazeuse. Ces mesures permettront de déterminer la persistance de ces composés dans les différentes phases de l'atmosphère.
- Identifier les produits de dégradation et élaborer des schémas réactionnels d'oxydation de ces composés par les oxydants atmosphériques.
- mesurer les spectres d'absorption UV-Visible des COVs ciblés, pour extraire les constantes de photolyse sous l'effet du rayonnement et ainsi évaluer les rendements quantiques de leur photodissociation.

Nous nous intéresserons aux : (i) fongicides de la famille des azoles, utilisés sur les arbres pour lutter contre divers champignons. (ii) herbicides de la famille anilines utilisés dans différentes cultures, depuis plusieurs décennies. La détection de ces pesticides dans toutes les différentes sphères⁶¹ de l'environnement ainsi que leur contribution potentielle au cycle de l'azote réactif atmosphérique, renforce notre intérêt pour caractériser leur devenir atmosphérique.

(Une partie de ces travaux s'effectuent en collaboration avec l'école ENSAT D'Agadir et l'école de Tunis dans le cadre du projet PHC Maghreb 2016-2018. Ils constituent les sujets de thèse : B. Samir et O. Rokbani financées par le programme PHC).

Ces études seront réalisées au moyen des dispositifs suivant :

- Une chambre de simulation atmosphérique rigide en Pyrex à triple paroi couplée à un spectromètre (IRTF), à différentes diodes laser et à un GC-MS. Ce dispositif permet de travailler en température y compris à basses températures (jusqu'à -40°C).
- Un dispositif de photolyse laser (248 nm, 308 nm et 351 nm) couplé à la détection UV-visible. Ce dispositif fonctionnant sous pression réduite est bien adapté pour suivre l'évolution des espèces radicalaires et ainsi réaliser des études cinétiques en mode absolu.
- Réacteur photochimique couplé à la détection UV-Visible, adapté pour réaliser des études cinétiques en phase hétérogène (interface gaz – solide).
- Différentes cellules à réflexions multiples pour les mesures des sections efficaces d'absorption UV-Visible à différentes températures.

⁶¹ Mesures de pesticides à Mordelles, Air Breizh, 2010

Prospective axe "planétologie"

Personnel permanent : D. Cordier (CR1), Th. Cours (MCF), G. Durry (PRCE1), L. Joly (CR1), P. Lavvas. (CR1), P. Rannou (Pr1)

1 - Aspects scientifiques : L'activité de recherche en planétologie va suivre plusieurs axes, soit dans la continuité de ce qui existe déjà, soit avec des inflexions. Nous avons identifié 5 objets d'étude qui vont constituer l'ossature de notre projet, mais avec deux projets majeurs : la continuation des études sur Titan et l'émergence des études sur les exoplanètes. Une partie de ces activités de planétologie, celles ayant trait à des calculs de photométrie (analyse de données, préparation), vont aussi être liées aux progrès réalisés en spectrométrie moléculaire sur certaines molécules d'intérêt pour les atmosphères froides ou chaudes.

Système de Titan : Ce satellite de Saturne est l'objet qui fédère toute l'équipe. L'heure est à la fin de la mission Cassini, qui va utiliser ses derniers volumes d'ergol pour plonger dans Saturne en 2017 et, ainsi, ne pas risquer de contaminer les autres corps d'intérêt exobiologique (Titan et Encelade en premier lieu). Il restera une quantité de données gigantesque à traiter grâce aux observations des instruments de Cassini qui ont fonctionné en continu depuis 2004. Si l'on considère que les survols de Titan par les deux Voyager ont été suivis d'analyses sur près de 20 ans, on imagine facilement que les observations de Cassini vont nourrir les recherches de la communauté sur une durée encore bien plus longue. Les projets de recherche concernant Titan vont se développer sur quatre axes principaux :

- Caractérisation photométrique de l'atmosphère (gaz, aérosols, nuages) et de la surface grâce aux observations d'ISS, d'UVIS et de VIMS. Cela représente un suivi de l'évolution temporelle du climat de Titan sur une demi-année. Ce corpus d'observation permettra d'étudier le cycle saisonnier de Titan, et en particulier la période autour de la période d'équinoxe avec les outils en grande partie déjà développés au laboratoire. Nous continuons à faire évoluer ce modèle en incluant les progrès réalisés dans la caractérisation des propriétés des gaz et de la brume. Nous, allons de façon privilégiée, nous intéresser à la brume et aux nuages en caractérisant les propriétés physiques ; les propriétés optiques, la taille des particules ainsi que les profils verticaux et latitudinaux de la brume... Nous avons décidé de nous concentrer sur la caractérisation de la brume à haute altitude et la couche détachée, couche secondaire au dessus de la couche principale, qui a disparue après l'équinoxe, en 2009 et que réapparaît progressivement marquant la fin de la période d'équinoxe. Ce travail se fera en partie en collaboration avec des équipes de divers horizons (R. West, C. Sotin - JPL/NASA, C. Griffith, R. Yelle, T. Koskinen - LPL, U of Arizona, A. Adriani, M.-L. Moriconi, S. Rodriguez, CEA). Ces études se feront également en lien avec les équipes de spectroscopie, en utilisant les données spectroscopiques qui sont produites au GSMA (méthane) et en discutant des possibles priorités pour leurs études (exemple, cas de l'éthane pour Titan et sans doute Saturne, benzène).

- En complément des aspects observationnels, l'étude de la conversion gaz particules dans la haute atmosphère de Titan va rester un sujet d'étude important. Cela permettra de mieux définir les chemins de production et les fonctions sources des aérosols en temps et en espace. Ces études se feront avec l'utilisation de modèles détaillés, et déjà validés, de photochimie neutre et ionique ainsi que des modèles pour les évolutions microphysiques des particules formées. Ce type d'étude est enfin transposable à d'autres corps du système solaire et, bien sûr, aux exoplanètes. (Collaborations : R. Yelle - LPL, U. of Arizona, V. Vuitton, IPAG, U. Grenoble, A. Coustenis, LESIA, Paris)

- Les lacs et mers de Titan, découverts par la mission Cassini, constituent le seul autre site du système solaire où une phase liquide est massivement présente et stable. Pour étudier l'interaction entre ces étendues liquides et l'atmosphère, nous projetons de continuer le développement d'un modèle thermodynamique de phases liquides et leurs couplages avec l'atmosphère. Plusieurs cas d'étude se présentent. A court terme, des observations RADAR récentes montrent à la surface de ces lacs des phénomènes transitoires et complètement inexplicables jusqu'à maintenant. Une explication basée sur les modèles de thermodynamique, proche de celle utilisée dans les études de l'équipe «effervescence» du

GSMA, pourrait être proposée. Dans les années à venir, nous projetons d'étudier Titan dans ses phases les plus primitives, époque pendant laquelle une phase liquide aqueuse devait recouvrir toute sa surface. Finalement, ces lacs semblent être à l'origine de la formation de dépôts évaporitiques à la surface de Titan. La connaissance de la composition et de la structure de ces dépôts, établie à partir des modèles thermodynamiques développés au laboratoire, sera un support pour une analyse de la surface menée à partir des données VIMS poursuivies grâce aux modèles de transfert radiatif atmosphérique sus-mentionnés. Enfin, à plus long terme, ces modèles pourront être adaptés au cas des exoplanètes dans les cas où celles-ci pourront être des «planètes-océan». Cette approche est susceptible de fournir des informations essentielles sur l'évolution de leurs atmosphères sur des échelles de temps astronomiques. (Collaborations : M. Choukroun et A. Mahjoub (JPL), S. Singh (Bear Fight Institute) et F. Garcia-Sánchez (Instituto Mexicano del Petróleo))

- Modélisation du climat de Titan avec le GCM3D de l'IPSL. Le couplage incluant la dynamique, la brume et les nuages est extrêmement coûteux en temps. Pour réduire le temps de simulation du GCM, nous avons développé une description de la microphysique en moment de distribution dans le cadre d'un modèle 1D. Il faut maintenant inclure cette description dans le modèle 3D et faire un nouveau module de calcul des propriétés optiques de la brume pour enfin obtenir un modèle opérationnel. Le but dans les mois et les années qui viennent sera de régler le modèle pour obtenir des simulations réalistes, puis l'utiliser pour comprendre les différents cycles sur Titan. Ce modèle nécessitera aussi d'autres développements qui seront réalisés soit ailleurs (rénovation du transfert radiatif, sphéricité, convection nuageuse,...) soit au GSMA, en lien avec les parties de projet décrits précédemment : définition des sources spatio-temporelles d'aérosols à partir des travaux sur la conversion gaz-particule et conditions d'échange entre les lacs et l'atmosphère à partir des études de thermodynamique entre phases. Ce projet se fera en lien avec l'IPSL (S. Lebonnois - LMD) et est dans la continuité d'un projet de couplage multiple du GCM de l'IPSL de long terme, démarré en 1996. L'objectif à terme est, d'une part, de reproduire et comprendre les observations faites par Cassini et, d'autre part, d'analyser le plus finement possible le fonctionnement du climat de Titan, et en particulier les grands cycles atmosphériques.

Exoplanètes : Nous assistons aussi à l'éclosion de la thématique des exoplanètes grâce aux télescopes terrestres et en orbite de plus en plus puissants qui dévoilent peu à peu l'extrême variété de ces objets. Ces nouvelles planètes peuvent maintenant être étudiées en traitant la spectroscopie et le transfert radiatif - la grande spécialité du GSMA. Depuis la première détection indirecte de *Pegasi 51b* en 1995, on compte aujourd'hui 3408 exoplanètes confirmées. Pour mesurer la dynamique du sujet, il suffit de savoir qu'en 2016, on en trouve en moyenne 10 nouvelles par jour. Il s'agit donc d'un nouveau champ d'étude à investir et qui va donner du travail pour des générations de chercheurs. Avec plusieurs milliers d'exoplanètes, dont certaines ayant des traits communs avec la terre, il commence à y avoir des données à analyser. Nous avons, au GSMA, quelques atouts pour aborder ce sujet à travers la modélisation de la photochimie et de la formation des aérosols, mais aussi à travers l'utilisation des données spectroscopiques pour les gaz chauds. Deux axes d'étude sont envisagés :

- Nous allons continuer l'étude de la photochimie des planètes extrasolaires, en nous appuyant sur notre expérience déjà établie sur la chimie atmosphérique complexe de Titan, et en incluant cependant la description cinétique d'équilibre thermochimique et photochimique de des éléments H, C, N, O, Si et S, ainsi que les autres métaux présents dans ces atmosphères. Nous utiliserons également les modèles de microphysique des aérosols et la formation des nuages dans les conditions de exoplanètes chaudes afin d'évaluer les contributions possibles et caractériser ces composants hétérogènes dans les spectres disponibles. (Collaborations : T. Koskinen, R. Yelle, G. Ballester – LPL, U. of Arizona, A. Garcia-Munoz, Zentrum für Astronomie und Astrophysik, Technische Universität Berlin, L. Ben-Jaffel, IAP, Paris)

- Dans le cadre d'un consortium français se mettant en place pour l'étude des gaz chauds (projet ePYTHEAS), nous souhaitons également participer aux études photométriques sur ces objets. Ce projet est nouveau pour notre équipe et correspond aussi à une thématique transversale avec les équipes de spectrométrie du laboratoire. Nous utiliserons les modèles de photométrie que nous utilisons déjà, en y ajoutant les aspects d'émissions thermiques et les raies spectroscopiques pour les gaz chauds. Le but dans

un premier temps est de tester les nouveaux jeux de raies moléculaires produits dans ce cadre et de simuler les spectres d'exoplanètes pour les comparer aux observations obtenues en transmission ou en réflexion. Il y a déjà des spectres d'exoplanètes qui serviront à préparer les modèles et aussi préparer l'analyse des futures observations. Ce travail se fera en lien avec le LESIA (A. Coustenis, porteuse du projet ePYTHEAS) mais aussi avec R. West (JPL/NASA).

Mars - Capteur ODS sur Exomars 2018 : Le capteur de poussière et de nuage ODS a été sélectionné puis débarqué d'Exomars 2016, faute de moyen au CNES, au profit de SIS (instrument espagnol de l'INTA similaire à ODS). ODS est maintenant inclus dans la charge utile d'Exomars 2018, mais sous responsabilité russe. Le développement des codes d'analyse du signal sont déjà développés (thèse de Daniel Toledo) et le travail de préparation d'Exomars 2018 se fera dans la période à venir en lien avec les chercheurs de l'IKI (Moscou). Il est à noter que ce travail se fera essentiellement en collaboration avec D. Toledo et I. Arruego (INTA, Espagne) et Anna Fedorova et Oleg Korablev (IKI Russie).

Mars – Capteur TDLAS sur EXOMARS 2018 et missions lunaires Russes : dans la continuité de la mission Russe Phobos-Grunt qui avait vu en 2011 l'embarquement d'un spectromètre à diodes laser, « TDLAS », sous responsabilité du GSMA (PI. G. Durry), il est prévu un spectromètre laser, « MDLAS » sur la plate-forme de surface d'Exomars 2018. Sous responsabilité de l'IKI, MDLAS verra également une forte contribution du GSMA (spectroscopie, inversion des données, intégration et calibration, , ..) si le CNES décide finalement de soutenir le projet ; une proposition de recherche CNES avec lettre de soutien de l'IKI et de Roskosmos est actuellement en cours d'expertise dans le cadre de l'appel d'offre annuel du CNES. De la même façon, le laboratoire est impliqué (spectroscopie, inversion des spectres, calibration spectroscopique) dans la mission lunaire Luna-resurs (2020) avec un spectromètre TDLAS identique à Phobos-Grunt pour l'analyse de la subsurface des régions polaires de la lune. Ces activités traduisent une collaboration de près de 15 ans avec l'Institut de Recherche Spatiale de Moscou (IKI) [O. Korablev, I. Vinogradov, M. Gerasimov] et l'Institut de Physique de Moscou (A. Rodin) ; cette collaboration s'est traduite notamment par des séjours de plusieurs mois de nos collègues russes au laboratoire pendant la période étudiée.

Pluto – New Horizons : Nous allons également continuer l'interprétation des observations récentes de l'atmosphère de Pluton de la mission spatiale New Horizons. Pluton est assez similaire à Titan sur de nombreux aspects et les nouvelles observations révèlent que son atmosphère et la surface sont aussi marquées par des brumes. Nous étudions actuellement la photochimie et formation d'aérosols dans cette atmosphère à l'aide des outils déjà développés pour Titan, et les contraintes disponibles à partir de la mission, en collaboration avec l'équipe de New Horizons. (Collaboration : R. Gladstone, Southwest Research Institute, Texas, M. Summers, George Mason University, Virginia, D. Strobel, Johns Hopkins University, Baltimore, E. Lellouch, LESIA, Paris)

Disques protoplanétaires : Les disques protoplanétaires sont à l'origine des systèmes planétaires, de leurs propriétés découlent celles des planètes solaires et extrasolaires. Leur physique, très complexe, présente des analogies avec celle des atmosphères planétaires. En effet, les disques protoplanétaires sont formés d'un mélange de gaz et de poussières qui sont les analogues des « aérosols » des atmosphères planétaires. Le modèle de disque protoplanétaire *EvAD*, développé en partie au GSMA, a vu récemment ses premiers résultats publiés. Ce code permet d'envisager plusieurs voies de recherche, dans un premier temps l'influence des poussières sur la durée de vie du disque. Cet aspect est particulièrement important pour l'existence des systèmes planétaires car il conditionne l'apparition des planètes.

2 - Aspects fonctionnement : Sur la période 2011-2015, le financement de l'équipe a reposé sur plusieurs sources liées au financement de la recherche que l'on peut qualifier de fondamentale (ANR Blanche, PNP/CNRS, CNES) à hauteur de 220 k€. Les tentatives de financement de la recherche auprès de la région ont échoué. En revanche, le financement de doctorants et de mobilités reflète un équilibre plus homogène des sources extérieures (~ 75 k€), Région (~102 k€) et URCA/MENRT (~103 k€). Quelques financements sont

déjà acquis, ou facilement accessibles, pour le futur (PICS/CNRS 2016-2020, 40 k€) et bien sûr le financement sur AO du PNP. Mais les possibilités (ou les probabilités) réelles de décrocher des financements pour des projets plus ambitieux paraissent de plus en plus incertaines. L'assèchement progressif des sources de financement pour les thèmes de recherche fondamentale associé à des axes régionaux centrés sur de la recherche thématique excluant notre discipline est, de façon prévisible, un risque que nous devons contourner d'une façon ou d'une autre si nous souhaitons maintenir un niveau de recherche ambitieux (participation à des congrès, recrutement de doctorants, accueil de chercheurs, ...). Enfin la tendance croissante au financement des bourses de thèse avec co-financement finit d'achever un tableau dans lequel on voit mal comment de la recherche fondamentale, comme les sciences planétaires et sans doute d'autres thématiques, peut continuer de prospérer à Reims.

THEMATIQUE INSTRUMENTATION LASER INNOVANTE

Personnels permanents : B. Parvite (Pr1), G. Durry (PRCE1), L. Gomez (MCF), L. Joly (CR1), N. Petrochilos (MCF), R. Vallon (MCF), V. Zeninari (PR1)

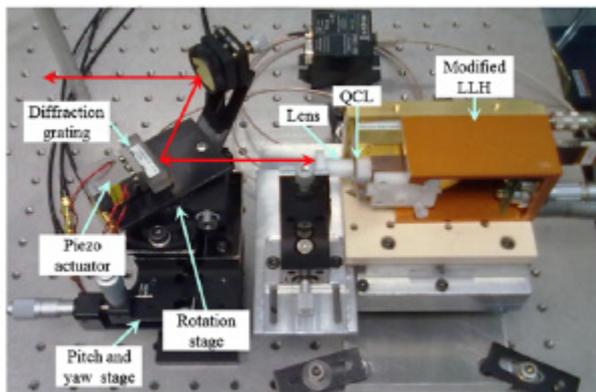
Pour la période 2018-2023, l'ancienne équipe « Spectrométrie Laser et Applications » se propose de travailler majoritairement dans le cadre de la thématique « Instrumentation Laser Innovante » sur les deux axes de recherche définis lors de la précédente campagne : les tests et les améliorations de sources lasers de nouvelle génération ainsi que les diverses applications de la spectrométrie laser infrarouge. En ce qui concerne l'instrumentation laser développée par l'équipe d'Aéronomie, elle sera axée essentiellement sur la miniaturisation pour le radiosondage et sur l'utilisation de nouveaux porteurs, drones et ballons pressurisés.

Axe 1 : Tests et améliorations de sources lasers de nouvelle génération

Au cours du précédent contrat, les travaux de cet axe avaient été séparés en plusieurs actions majoritairement en lien avec les lasers à cascade quantique émettant de façon plus large dans l'infrarouge. Ces travaux seront poursuivis et on s'intéressera également à de nouvelles sources infrarouge telles que OPO et peignes de fréquence.

Action 1-1 : Poursuite des développements autour de laser à cascade quantique largement accordable.

L'objectif de cette action est de développer et de tester des sources basées sur des lasers à cascade quantique émettant de façon plus large dans l'infrarouge que des sources standards afin de développer la détection simultanée de plusieurs molécules ou la détection de molécules ne possédant pas de transitions fines dans l'infrarouge tels que les pesticides, les polluants atmosphériques ou les explosifs. Ces travaux avaient été initiés au début des années 2010 dans le cadre d'un projet national REI-DGA SELECTIF et du projet européen Euripides ACOUSTICNOSE et poursuivis dans la cadre de la thèse de D. Mammez (2010-2013, allocation DGA-Région), de la partie source du projet ANR MIRIADE (2012-2015) et du projet ANR COCASE (2012-2014) en collaboration avec le III-V lab. Aujourd'hui, les collègues du III-V lab ont fondé la start-up MIRSENSE. Ils continueront à nous fournir régulièrement des puces qui peuvent être montées en cavité ou de type MIRIADE ou COCASE (voir prochaine photo à gauche). Celles-ci auront généralement des caractéristiques améliorées (passage d'un fonctionnement du mode impulsif au mode continu, augmentation de la puissance...). Elles seront donc testées et les meilleures d'entre elles permettront d'améliorer les caractéristiques des sources largement accordables (voir prochaine photo à droite) et donc des spectromètres développés pour différentes applications. En particulier, celles-ci pourront ensuite être utilisées par la société AEROVIA pour améliorer les limites de sensibilité des instruments ou encore pour développer des systèmes de mesure multi-gaz ou de grosses molécules. Cette dernière application est à ce jour trop difficile à réaliser pour un rapport qualité-prix acceptable.



A gauche, photographie d'une puce COCASE. On visualise très nettement les petits rectangles blancs qui correspondent aux émetteurs lasers enterrés d'un même dispositif monobloc. A droite, photographie d'un laser à cascade quantique monté en cavité étendue.

Action 1-2 : Développement de la technique intra-cavité à partir de composants à cascade quantique.

Dans le cadre des actions menées au 1.1, nous avons également démarré une nouvelle activité basée sur la technique intracavité dans le cadre de la thèse L. Bizet (2015-2018, allocation DGA-Région). En effet, cette technique généralement utilisée dans le proche infrarouge permet d'améliorer les caractéristiques des spectromètres développés. Le développement dans le cadre du 1.1 de sources largement accordables montées en cavité étendue permet d'utiliser cette technique qui était jusqu'alors impossible puisque les composants diode lasers sont des blocs monolithiques incluant milieu amplificateur et cavité résonnante.

Action 1-3 : Travaux autour de sources OPO.

Dans le cadre de projets InterReg & H2020 soumis en collaboration avec la Belgique et de nombreux autres pays, nous serons les utilisateurs privilégiés de nouvelles sources de type OPO. Le laboratoire Multitel est spécialisé dans la réalisation de pompes pour OPO et la société EKSPLA a développé des OPO utilisant ces pompes. L'un des objectifs de ces projets est de réaliser des sources largement accordables, puissantes et d'une taille relativement petite, pouvant être intégrées dans des instruments de mesure de terrain. Notre travail consistera principalement à faire fonctionner ces sources et à tester leurs caractéristiques à la fois du point de vue spectral et également du point de vue spatial : forme de faisceau, puissance...

Action 1-4 : Travaux autour de peignes de fréquences moyen infrarouge.

La prochaine révolution en matière de sources lasers pour la spectroscopie est déjà présente, il s'agit des peignes de fréquence (Prix Nobel Physique 2005). Actuellement, ces dispositifs sont encombrants et fonctionnent dans le proche infrarouge. Dans le cadre d'un projet de recherche soumis à l'ANR et porté par l'INL de Lyon, il est envisagé de développer des peignes de fréquences dans le moyen infrarouge basés sur de l'optique non-linéaire dans le silicium et le germanium. Le deuxième partenaire de ce projet est le CEA-Leti. Nous interviendrons comme troisième partenaire afin de tester les dispositifs réalisés et afin de valoriser leur utilisation pour des applications spectroscopiques.

Axe 2 : Applications de la spectrométrie laser infrarouge

Au cours du précédent contrat, les travaux de cet axe ont été séparés en plusieurs actions qui seront également poursuivies.

Action 2-1 : Applications à la mesure de paramètres spectroscopiques de molécules d'intérêt.

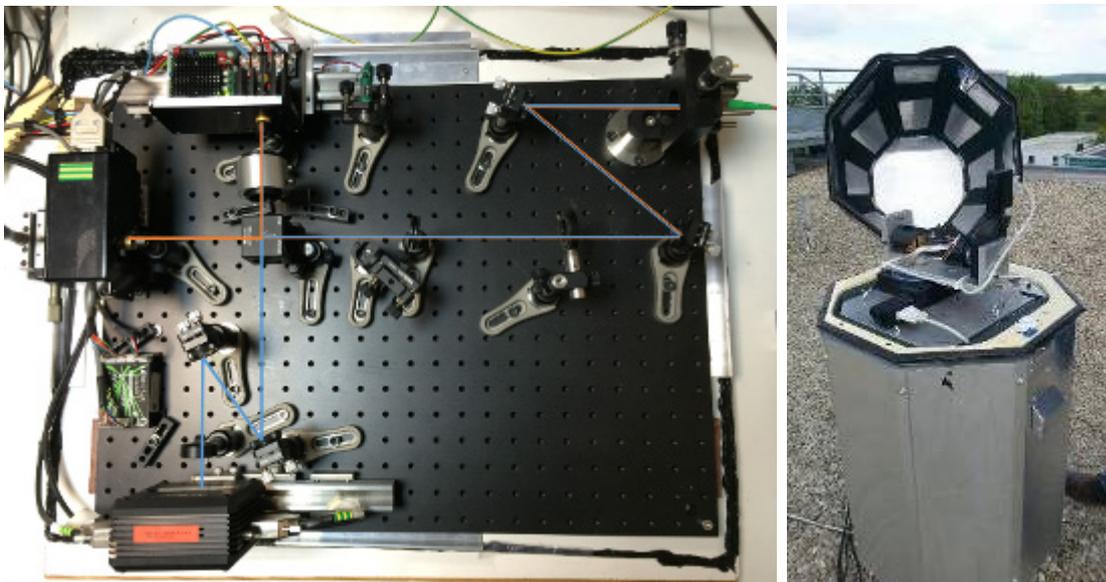
Le banc de mesure développé durant le précédent contrat pour le projet MERLIN et financé par le CNES continuera d'être utilisé pour l'étude à très haute résolution de molécules d'intérêt atmosphérique ou astrophysique suivant les demandes. On peut citer par exemple le cas de l'éthylène dont l'étude serait faite en collaboration avec les collègues spectroscopistes du GSMA et en particulier M. Rotger, spécialiste de cette molécule. L'objectif sera également de valoriser les lasers que nous possédons et qui émettent vers 10 μm . Nous profiterons également de ce banc de mesure pour continuer la collaboration avec l'équipe de Jean-Michel Hartmann et Ha Tran (LMD, ex-LISA) sur l'étude des profils de raies grâce à la très haute résolution des enregistrements avec laser. A noter que les performances atteintes par le spectromètre permettent des mesures de paramètres avec une précision de 0,2 %.

Action 2-2 : Applications à l'œnologie.

Lors de l'habilitation 2007-2011, notre équipe s'était intéressée aux applications de la spectrométrie laser à l'œnologie. Une thèse conjointe avec le laboratoire d'œnologie avait été soutenue. Cela avait conduit par la suite à l'intégration de Gérard Liger-Belair au sein du GSMA et à la création de l'équipe Effervescence durant le précédent contrat. A la suite de ces travaux, G. Liger-Belair et V. Zeninari co-encadrent actuellement la thèse de A.-L. Moriaux (2015-2018, allocation ministère) avec la participation active de tous les membres de l'équipe. Les objectifs de cette thèse sont de réaliser un montage basé sur la spectrométrie laser afin de mesurer le dioxyde de carbone qui s'échappe des vins effervescents et en particulier du Champagne (voir prochaine photo à gauche). Ces mesures seront comparées avec celles obtenues par micro-chromatographie en phase gazeuse. Par ailleurs, des développements sont envisagés afin de pouvoir également quantifier la quantité d'alcool qui s'échappe. Enfin, une troisième voie d'amélioration consistera en le développement d'une mesure non plus seulement au buvant de la flûte contenant le Champagne mais en différentes positions et altitudes au-dessus de la flûte, ce qui permettra d'établir une cartographie des panaches de dioxyde de carbone.

Action 2-3 : Applications aux mesures atmosphériques à distance.

Dans le cadre de la thèse de M.-H. Mammez (2012-2016) et du projet ANR QUIGARDE coordonné par l'équipe (2013-2016), nous avons relancé l'activité historique de radiométrie hétérodyne de l'équipe. En effet, celle-ci avait été mise en sommeil durant de longues années suite à l'indisponibilité de sources permettant la mesure aux alentours de $10 \mu\text{m}$. Avec l'arrivée de nouveaux fournisseurs de ces sources, ces études ont pu être relancées. Les objectifs des futures mesures concernent la concentration intégrée à partir du sol de la quantité d'ozone, de dioxyde de carbone voire de méthane si l'on peut copier le dispositif autour de $8 \mu\text{m}$. Les travaux d'inversion atmosphériques pourront se faire en collaboration avec l'équipe de Sébastien Payan du LMD qui est demandeuse de mesures atmosphériques afin de les comparer aux calculs et de les inclure dans les modèles climatiques.



A gauche, photographie du nouveau dispositif dédié aux études œnologiques. Deux sources lasers sont utilisées suivant la concentration de dioxyde de carbone à mesurer. A droite, photographie de l'héliostat développé pour viser le soleil pour les mesures atmosphériques à distance.

Dans l'idée de compléter les mesures atmosphériques à distance, nous travaillerons au développement de mesures atmosphériques en utilisant un rétro-reflecteur ce qui constitue le premier pas vers des mesures LIDAR. Ces dernières nécessitent une source puissante et actuellement, les lasers à cascade quantique ne sont pas assez puissants et les sources OPO pas assez compactes pour le développement d'un instrument de terrain. Dans le cadre des projets InterReg & H2020, en plus du test des sources, nous participerons donc à leur utilisation pour des mesures de gaz atmosphériques. Pour ces travaux, nous pourrions également faire appel aux compétences en traitement du signal de N. Petrochilos.

Action 2-4 : Applications à la spectrométrie photoacoustique.

Lors du précédent contrat, la spectrométrie photoacoustique a été beaucoup valorisée. En effet, elle a fait l'objet de la partie capteur du projet ANR MIRIADÉ coordonné par l'équipe (2012-2015), de la thèse en contrat CIFRE de Christophe Risser (2012-2015) qui a, dès sa soutenance, été embauché chez Aerovia et de la thèse de Justin Rouxel (2012-2015) qui était financé par le CEA. Les travaux à venir sur cette thématique vont consister, d'une part, à terminer la valorisation des travaux effectués. En effet, le dépôt de brevets a ralenti la production scientifique traditionnelle en termes de publication. D'autre part, nous espérons continuer les travaux communs avec Aerovia par plusieurs voies, par exemple :

- Amélioration des caractéristiques des cuves résonnantes type Helmholtz et conception de nouveaux types de cuves photoacoustiques résonnantes (plus sensibles, pouvant être ouvertes sur l'extérieur, ...);
- Aide à la recherche des zones spectrales de mesures pertinentes de différentes molécules d'intérêt atmosphérique (sensibilité et sélectivité, interférents...);
- Aide au développement de systèmes de mesure de composés gazeux ne possédant pas de signature fine dans l'infrarouge.

Axe 3 : spectrométrie laser embarquée (ballons, drones) pour la mesure atmosphérique in situ

Le laboratoire a une reconnaissance internationale dans le domaine de la mesure in situ par diodes lasers (SDLA, microSDLA, PicoSDLA, PI. G. Durry) embarquée sous ballons stratosphériques ouverts (BSO). Cette collaboration avec la Division Ballons du CNES dure depuis près de 20 ans (premier vol SDLA en 1998). Les ballons sont un outil important de la thématique recherche du laboratoire dédiée à la moyenne atmosphère (par exemple la campagne internationale Tropico conduite par le GSMA pour le sondage de la tropopause tropicale).

En termes de prospective, nous nous orientons vers le développement de capteurs de faibles poids capables d'être utilisés sous des ballons météo pour CH₄, CO₂ et H₂O. Il s'agit d'abord de la génération des capteurs à diodes lasers AMULSE (PI. L. Joly) qui ont déjà fait une campagne de test sous ballons météo en collaboration avec Météo-France et à bord d'un ULM avec le CNES, et que nous allons finaliser lors du quinquennat à venir. Ces instruments mesurent CH₄ et CO₂. La capacité à lancer ces capteurs sous des ballons météo (les mêmes que pour le radiosondage) est extrêmement intéressante d'un point de vue scientifique car cela permet d'augmenter la fréquence des vols pour aborder les tendances des gaz à effet de serre dans la basse atmosphère ce qui est difficilement abordable avec les ballons géants type BSO (un à deux vols par an). Les ballons météo présentent également une grande souplesse pour le lancement et quasiment pas de besoin en logistique par comparaison avec les ballons stratosphériques ouverts et donc des coûts beaucoup plus faibles. Ils permettent donc de nouer de nouvelles collaborations scientifiques car ils peuvent être utilisés par des nonspécialistes, par exemple dans des réseaux de surveillance de la composition de l'atmosphère. Il y a également des besoins importants en validation de missions satellitaires dédiés à ces deux gaz à effet de serre (MicroCarb, Merlin).

Les senseurs Amulses présentent également un intérêt pour des applications industriels : au moment d'écrire ce document un contrat (~500k€) est en cours de négociation entre Total et le CNRS pour utiliser ces senseurs sur des drones pour des applications liées aux forages pétroliers.

En ce qui concerne la miniaturisation des senseurs pour H₂O stratosphérique, nous avons commencé un travail d'allègement et de réduction de taille du senseur laser PicoSDLA-H₂O en collaboration avec la Division Technique de l'INSU (N. Amarouche) : la possibilité d'aborder les tendances de H₂O par radiosondage dans la stratosphère est très intéressante scientifiquement car H₂O influe sur le bilan radiatif de la stratosphère et donc sur la couche d'ozone et également sur le réchauffement climatique. Il n'y a que quelques instruments au monde qui soient capables de mesurer la vapeur d'eau dans la stratosphère terrestre.

Un autre axe de développement instrumentale concerne les ballons préssurisés : ces ballons dérivent pendant plusieurs mois à niveau de densité (d'altitude) constante dans l'atmosphère. Un projet international, « Strateole » vient d'être sélectionné par le CNES en juin 2016 ; le laboratoire est impliqué en collaboration avec la Division Technique de l'INSU dans l'adaptation des senseurs à diode laser PicoSDLA – H₂O et PicoSDLA-CO₂ à la mesure sous ballons préssurisés. Ces instruments vont faire le tour du monde à l'équateur en dérivant pendant plusieurs mois à une altitude d'environ 18km pour contribuer à l'étude de la dynamique de la tropopause tropicale, région majeure de l'atmosphère car point d'entrée dans la stratosphère. La première campagne de test est prévue fin 2018 et les campagnes scientifiques vont ensuite se dérouler en 2020 et 2023. Du point du développement instrumental atmosphérique, ce projet acté et financé par le CNES et qui se déroulera pendant la durée du prochain quinquennat, sera l'un de projets importants de l'unité. Par delà le développement instrumental, il faudra aussi traiter les données de la campagne et participer à l'interprétation scientifique dans le cadre du consortium franco-américain du projet.

EFFERVESCENCE, CHAMPAGNE et APPLICATIONS

Personnels permanents D. Bonhommeau (MCF), C. Cilindre (MCF), G. Liger-Belair (PR1), B. Parvitte (PR1), V. Zeninari (PR1)

Au 1^{er} janvier 2012, une nouvelle équipe a vu le jour au GSMA autour d'un petit groupe de chercheurs, issus d'horizons divers : l'équipe **ECA** (Effervescence, Champagne et Applications). L'équipe était alors composée de trois enseignants-chercheurs : deux professeurs (Gérard Liger-Belair et Bertrand Parvitte) et une maîtresse de conférences (Clara Cilindre). L'activité première de l'équipe **ECA** s'articule autour des processus physico-chimiques liés aux phénomènes d'effervescence et de mousse (en œnologie, mais plus largement dans les liquides sursaturés en gaz dissous). Les phénomènes d'ingestion et de désorption de gaz dissous par une phase liquide retiennent donc toute notre attention. Depuis 2012, la **transdisciplinarité** est au cœur de notre démarche. Chacun des permanents de l'équipe possède d'ailleurs une compétence bien spécifique afin de pouvoir aborder, autant que faire se peut, chaque projet selon différents points de vue.

La science du champagne au sens large et les mécanismes liés à l'effervescence en particulier sont des thématiques développées depuis une quinzaine d'années à l'URCA. Elles ont été porteuses d'innovations et sont des vecteurs de communication très positifs pour la région Champagne-Ardenne, à l'échelle nationale et internationale. L'effervescence est un marqueur fort de l'identité champenoise, ce qui en fait une vitrine susceptible d'attirer, au sens le plus noble du terme : étudiants, chercheurs, journalistes, industriels...français et étrangers. L'équipe **ECA** a acquis un leadership reconnu autour de la bulle.

Afin de renforcer le lien avec le tissu socio-économique local, il a été décidé de renforcer l'équipe en créant un **axe « Effervescence, Champagne et Applications »**. Un maître de conférences supplémentaire souhaite d'ailleurs nous rejoindre pour le prochain contrat (le docteur David Bonhommeau, théoricien et spécialiste de la dynamique moléculaire).

Les nombreuses passerelles qui existent entre les phénomènes d'effervescence en œnologie et la formation de bulles dans d'autres disciplines continueront d'être explorées (comme la formation des embruns marins, par exemple). L'œnologie du champagne et des vins effervescents pourra ainsi s'enrichir de l'expérience et du savoir faire d'autres chercheurs issus d'autres disciplines, et inversement.

Vous trouverez ci-après les contours des différents projets que nous souhaitons poursuivre et/ou engager pour le prochain contrat.

1. Les propriétés de transport dans les liquides sursaturés en CO₂ : le cas des vins de Champagne

La diffusion du CO₂ en phase liquide est le processus physico-chimique responsable de la nucléation et du grossissement des bulles dans les boissons carbonatées au sens large, et notamment dans les vins de Champagne où l'effervescence joue un rôle fondamental lors de la dégustation.

La diffusion moléculaire est responsable de la formation des bulles de CO₂ au sein de sites de nucléations telles que des fibres de cellulose⁶². Les minuscules poches d'air initialement emprisonné dans ces fibres creuses de taille micrométrique au moment du service dans le verre servent de germe à la formation de bulles (on parle de *nucléation hétérogène non classique*)¹. Ces bulles grossissent au sein du lumen de la fibre, par diffusion progressive des molécules de CO₂ qui traversent sa paroi latérale, avant d'être libérées

⁶² Liger-Belair et al. Chem. Soc. Rev. 11, 2490, 2008 ; Liger-Belair. J. Phys. Chem. B 118, 3156, 2014

dans le liquide lorsque leur taille devient suffisante pour s'extraire de la fibre. Les bulles remontent alors sous l'effet de la poussée d'Archimède, dans un liquide sursaturé en CO₂ dissous, ce qui leur permet de grossir, toujours par diffusion du CO₂ dissous de la phase liquide vers la bulle.

L'objectif de ce projet est d'affiner le calcul des coefficients de diffusion du CO₂ dans le champagne, récemment conduit par des simulations de dynamique moléculaire avec champ de forces classique⁶³, et de compléter cette étude par leur détermination à travers la paroi de la fibre de cellulose en fonction de la température. On se propose tout d'abord d'évaluer finement l'influence des paramètres du champ de forces de l'éthanol et de l'eau sur les valeurs des coefficients de diffusion dans le liquide. Ces données permettront notamment une estimation simple de la viscosité du mélange par la relation de Stokes-Einstein. Il s'agira aussi de tester l'effet des sucres et du glycérol sur les propriétés de transport du champagne, modélisé en première approximation comme un mélange hydro-alcoolique carbonaté, de manière à collecter suffisamment d'information sur le comportement des molécules dans le liquide avant d'aborder la diffusion dans des milieux confinés telles que les fibres de cellulose. Avant de considérer la fibre de cellulose, on envisage par ailleurs d'ajuster les approches théoriques pour l'étude de la diffusion moléculaire en milieu confiné sur des systèmes plus homogènes tels que des nanotubes de carbones, des nanopores silicatés, ou des zéolithes, plus fréquents dans la littérature.

2. Applications de la chromatographie en phase gazeuse et de la spectrométrie laser à l'étude de la désorption du CO₂ et des composés organiques volatils hors d'un vin de Champagne

Le phénomène d'effervescence qui caractérise les vins de Champagne ou les boissons gazeuses au sens large est la manifestation visuelle évidente du processus de désorption du gaz carbonique dissous. Néanmoins, outre la formation de bulles pendant cette phase transitoire de dégazage, le CO₂ en solution va également s'échapper directement par diffusion à travers la surface libre. Dans une flûte de champagne, une estimation de l'importance relative du dégazage par formation de bulles par rapport au dégazage par diffusion à travers la surface libre a été effectuée dans un précédent travail⁶⁴. Des études comparatives de la désorption simultanée du CO₂ et de l'éthanol hors d'un vin de Champagne (par µGC et imagerie infrarouge), servi en flûte ou en coupe, ont donné lieu à une première série de résultats qui démontrent clairement l'influence de la géométrie du verre et des conditions d'effervescence sur la cinétique de désorption des composés organiques volatils (COVs) qu'il contient⁶⁵.

A ce jour, les interactions du CO₂ avec les COVs, tel que l'éthanol, et l'effet éventuel d'un excès ou d'un déficit de CO₂ lors d'une dégustation n'ont fait l'objet d'aucun travail analytique rigoureux. Nous souhaitons donc optimiser cette détection simultanée du CO₂, de l'éthanol et de certains COVs en l'étendant à l'espace tridimensionnel au-dessus du buvant des verres, en conditions de dégustation (toujours par spectrométrie laser, chromatographie gazeuse et imagerie infrarouge). Une thèse de doctorat vient de débiter en octobre 2015 sur ce thème, en collaboration avec nos collègues de l'équipe SLA.

Il est à noter que ce travail se poursuit en lien étroit avec l'interprofession champenoise, quelques Maisons de Champagne et un restaurant étoilé de Reims, soucieux de proposer aux consommateurs des verres à dégustation optimisés pour la dégustation des vins de Champagne.

3. Effervescence et production d'aérosols : vers la compréhension des mécanismes des systèmes exhausteurs d'arômes

⁶³ Perret et al. J. Phys. Chem. B *118*, 1839, **2014** ; Bonhommeau et al. J. Phys. Chem. Lett. *5*, 4232, **2014**

⁶⁴ Liger-Belair. Ann. Phys. (Paris) *27*, 1, **2002**

⁶⁵ Cilindre et al. J. Agric. Food Chem. *59*, 7317, **2011** ; Liger-Belair et al. PLoS ONE *7*, e30628, **2012** ; Bourget et al. J. Vis. (Japan) *16*, 47, **2013** ; Liger-Belair et al. Food Res. Int. *54*, 516, **2013**

Des centaines de bulles éclatent chaque seconde au cours des quelques minutes qui suivent le service d'une flûte de champagne. La surface du liquide est alors piquetée de centaines de jets minuscules qui se brisent en de fines gouttelettes⁶⁶, libérant ainsi un « aérosol de champagne » surconcentré en composés tensioactifs et pour certains aromatiques⁶⁷. Notons que les aérosols marins, produits par l'action combinée du vent, des vagues qui déferlent et de l'éclatement de bulles à la surface des océans, recèlent eux aussi des concentrations en molécules tensioactives et autres sels dissous très supérieures par rapport aux eaux de surface dont ils proviennent. Cette similitude de principe entre aérosols marins et aérosols de champagne, qui renforce le caractère très multidisciplinaire de nos approches, a d'ailleurs donné lieu à une publication commune avec des collègues océanographes⁶⁸.

A la suite de ce travail, nous nous sommes donc naturellement posé la question du rôle joué par les paramètres de l'effervescence dans une flûte sur cet effet de surconcentration détecté dans l'aérosol et la perception que le dégustateur en aura. A partir de 2012, en collaboration étroite avec les docteurs Thomas Séon et Elisabeth Ghabache, de l'Institut Jean Le Rond d'Alembert (Paris 6), des expériences furent mises en place dans le but de suivre finement – avec une résolution spatiale et temporelle inégalées jusqu'à présent – la production de gouttelettes engendrées par l'éclatement de bulles de tailles variables.

Le rôle fondamental de la viscosité de la phase liquide sur la vitesse, le nombre et la taille des gouttelettes produites par l'éclatement d'une bulle a été mis en évidence⁶⁹. Or, on sait bien que la viscosité du champagne varie, selon son caractère plus ou moins sucré, mais aussi et surtout selon sa température de service⁷⁰. Ce dispositif expérimental a donc été tout naturellement utilisé dans le cadre d'un travail collaboratif destiné à mieux comprendre la production d'aérosols qui caractérisent la dégustation des vins de Champagne. En première approche, le champagne a été remplacé par une solution modèle faite d'un mélange d'eau, d'éthanol et de glycérol (de même viscosité et de même tension de surface que le champagne). Le rôle de la température a même été mimé en augmentant la proportion de glycérol, et ce afin de reproduire l'augmentation de la viscosité dynamique du champagne liée à la décroissance de sa température. En parallèle de cette approche expérimentale, un modèle numérique a été construit (sur la base des résultats de l'étude expérimentale) qui permet de quantifier la masse de fluide évaporé lors du trajet des gouttelettes projetées par l'éclatement des bulles⁷¹.

Des expériences complémentaires sont en cours afin de faire le lien entre la masse de fluide évaporée par l'aérosol de champagne et les paramètres caractéristiques de l'effervescence (i.e., la fréquence d'éclatement des bulles, leurs tailles ainsi que la viscosité de la phase liquide).

L'éclatement de bulles à l'interface champagne/air se traduit par la formation d'un jet de gouttelettes de quelques dizaines de micromètres de diamètre, qui évaporent progressivement des molécules de solvant. Si ces tailles de gouttelettes sont inaccessibles aux simulations de dynamique moléculaire, les processus de réarrangement des molécules de solvant et d'évaporation peuvent être étudiés soit en considérant des gouttelettes de taille nanométrique (système de taille finie) soit en se focalisant sur l'interface liquide/air (système de taille infinie), la surface de la gouttelette micrométrique étant supposée plane à l'échelle de la molécule. Dans un premier temps, on se propose donc de modéliser une gouttelette de quelques nanomètres de rayon de composition similaire aux gouttelettes de champagne de manière à identifier les différents paramètres de la phase liquide (comme par exemple la viscosité, la température, la composition chimique, etc.) permettant d'optimiser la libération des arômes et leur potentielle perception par un dégustateur. Dans un second temps on pourra construire une boîte de simulation avec conditions aux bords périodiques pour modéliser l'interface champagne/air, réaliser la dynamique classique des molécules composants le mélange avec des programmes libres tels que Gromacs, et ainsi évaluer la propension à

⁶⁶ Liger-Belair et al. *Am. J. Enol. Vitic.* 52, 88, **2001** ; Liger-Belair et al. *Bubble Sci. Eng. Technol.* 4,21, **2012**

⁶⁷ Liger-Belair et al. *Proc. Natl. Acad. Sci. USA.* 106, 16545, **2009**

⁶⁸ Schmitt-Kopplin et al. *Biogeosciences* 9, 1571, **2012**.

⁶⁹ Ghabache et al. *Phys. Fluids* 26, 121701, **2014**

⁷⁰ Liger-Belair. *Ann. Phys. (Paris)* 31, 1, **2006** ; Liger-Belair et al. *Eur. Phys. J. Special Topics* 201, 1, **2012**

⁷¹ Ghabache et al. *Sci. Rep.* 6, 25148, **2016**

l'évaporation de molécules telles que l'éthanol et le réarrangement consécutif des autres molécules composant le liquide champagne. La dualité gouttelette-liquide (ou bulk en anglais) est fondamentale en physico-chimie, et il pourra aussi être intéressant d'évaluer la tension de surface, donc l'énergie de Gibbs de surface par unité d'aire, de ces systèmes pour mieux appréhender les processus mis en jeu.

4. Instabilités hydrodynamiques en solutions carbonatées

Ce projet comporte deux volets. Le premier concerne les processus qui décrivent la désorption du CO₂ par un fluide sursaturé en gaz dissous et en mouvement, alors que le second volet a pour ambition de décrire et de mieux comprendre un phénomène redouté des élaborateurs de champagne et de vins effervescents : le gerbage.

4.1. **Désorption du CO₂ et recirculation induite, in situ, en conditions de dégustation**

La production de bulles, amorcée par des micro-cavités ou des hétérogénéités de composition à la surface du verre, engendre en retour une recirculation du fluide, essentiellement par effet visqueux. Ce volet a fait l'objet d'un travail de thèse⁷² (menée en partenariat avec le GRESPI de l'URCA) soutenue en décembre 2014.

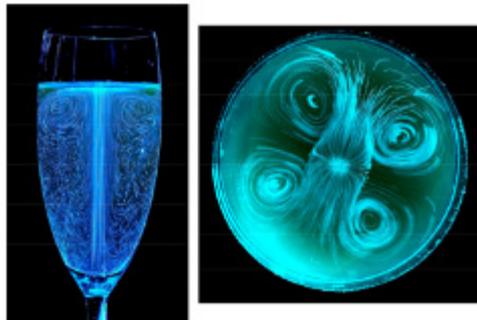


Figure 1 : Lignes de courant, obtenues par tomographie laser, qui illustrent l'allure des tourbillons qui agitent le cœur du fluide (gauche) et sa surface (droite).

La **figure 1a** montre l'effet obtenu avec un anneau gravé circulaire, concentrique de l'axe de la flûte. L'anneau crée un flux ascendant de bulles, qui à son tour déclenche une convection générale dans le fluide. Au voisinage de l'anneau et dans la majeure partie du volume au-dessus, la convection présente une symétrie cylindrique, de façon non surprenante compte tenu de la configuration de la source et du récipient. De nombreuses observations in situ (en conditions de dégustation, dans diverses formes de verres et de flûtes) ont été menées⁷³. Le problème a également été abordé du point de vue de la modélisation numérique et avec succès par le doctorant⁷⁴. Cependant, et de façon non triviale, la symétrie cylindrique est brutalement brisée au voisinage de la surface libre, où on observe une série de tourbillons régulièrement répartis (**figure 1b**). Leur nombre est variable en fonction du temps et des conditions de l'expérience⁷⁵.

Aucune explication formelle de l'effet n'est connue à l'heure actuelle et les investigations se poursuivent sur cette thématique, notamment par simulation numérique.

⁷² Beaumont. PhD Thesis, **2014**

⁷³ Liger-Belair et al. *Bubble Sci. Eng. and Technol.* **4**, 35, **2012** ; Beaumont et al. *Exp. Fluids* **56**, 170, **2015** ; Beaumont et al. *Exp. Fluids* **57**, 85, **2016**

⁷⁴ Beaumont et al. *Advances in Mechanical Engineering*, ID 156430, **2013** ; Beaumont et al. *International Journal of Numerical Methods for Heat and Fluid Flow*, **24**, 563, **2014**.

⁷⁵ Liger-Belair et al. In: *Advances in Food and Nutrition Research*, Elsevier, **67**, 289, **2012** ; Liger-Belair et Polidori, *Nouveau voyage au cœur d'une bulle de champagne*, Odile Jacob, **2015** ; Beaumont et al. *J. Food. Eng.* **188**, 58, **2016**

4.2. Une désorption du CO₂ explosive : depuis le gerbage d'une bouteille de Champagne jusqu'à l'explosion meurtrière du lac Nyos

Les quelques millièmes de secondes qui accompagnent le débouchage d'une bouteille de champagne s'inscrivent aujourd'hui dans un programme de recherche récent dont le but avéré est de mieux comprendre un phénomène redouté des élaborateurs de vins effervescents: le gerbage.

Le gerbage consiste en une production rapide et très excessive de bulles et de mousse à l'ouverture de la bouteille⁷⁶. Lorsqu'il survient, cela se produit généralement au cours du dégorgement, avant l'étape de dosage. Outre la perte de vin qu'il occasionne, le gerbage ralentit la cadence de production de manière très significative, et entraîne une hétérogénéité aromatique des vins. Lors de son débouchage, une bouteille gerbeuse peut perdre plus de la moitié du volume de champagne qu'elle contient. Il convient donc de mieux comprendre l'origine physique du phénomène si on veut espérer pouvoir l'éradiquer, ce qui nous a conduit à mettre en place un travail exploratoire en 2014 (sous la forme d'un projet incitatif amont). Une série d'observations a été conduite en collaboration avec deux partenaires industriels : le bouchonnier portugais AMORIM (numéro un du bouchage liège dans le monde) et le champagne POMMERY (l'un des partenaires historiques de nos travaux sur l'effervescence). La chronologie des événements qui surviennent lors de la première seconde qui suit le débouchage d'une bouteille de champagne stockée à 20 °C⁷⁷ a été présentée sur la figure 7 de la page 56 du présent rapport, dans la partie consacrée au bilan de l'équipe ECA.

C'est la chronologie des événements qui conduit parfois à ce type de gerbage dit « explosif » qui retient aujourd'hui toute notre attention. Ces travaux sur le gerbage se poursuivent en lien étroit avec l'interprofession champenoise désireuse de comprendre l'origine du phénomène et de s'en prémunir à l'avenir. Nous ambitionnons de poursuivre ces travaux sur le gerbage en mettant en place une thèse CIFRE avec l'interprofession soucieuse de proposer des solutions pour limiter le phénomène.

Ce gerbage explosif n'est pas sans rappeler un événement tragique survenu à la fin du siècle dernier. Le 21 août 1986, le lac Nyos, situé au nord-ouest du Cameroun, a soudainement « explosé » et libéré environ 1 kilomètre cube de dioxyde de carbone⁷⁸. Le CO₂ dissous d'origine mantellique, progressivement stocké dans les eaux profondes du lac, se serait brusquement échappé hors du lac sous l'effet d'un séisme ou d'un glissement de terrain. L'énorme quantité de CO₂ libérée, plus dense que l'air, a ainsi stagné de longues heures dans les vallées avoisinantes, asphyxiant hommes et animaux jusqu'à 30 km du lac. Bilan total : 1 746 morts retrouvés dans un paysage quasi intact, portant seulement, à certains endroits, les traces d'un violent coup de vent. Plus de 3 000 personnes ont dû quitter leurs maisons et ont été regroupées dans des camps.



Figure 2: Sous l'action d'un processus de pompage auto entretenu, un jet d'eau surgi des profondeurs du lac Nyos permet de drainer le CO₂ dissous enfoui dans ses profondeurs.

⁷⁶ Liger-Belair et al. Rev Oenol. Fr. 147, 47, 2013

⁷⁷ Liger-Belair et al. Rev. Oenol. Fr. 155, 53, 2015

⁷⁸ Clarke. Nature 409, 554, 2001

Depuis 2001, une équipe française dirigée par le professeur Michel Halbwachs mène une opération de dégazage du CO₂ piégé au fond du lac, afin d'éviter que la catastrophe de 1986 ne se reproduise. L'opération baptisée « Les Orgues de Nyon », utilise plusieurs tuyaux verticaux en polyéthylène reliant les eaux profondes et saturées en CO₂, à la surface. Une pompe mécanique aspire l'eau en tête de colonne. Le liquide prélevé dans les eaux profondes du lac (riche en gaz dissous) s'élève dans la colonne. Sa pression diminue et l'eau approche de la limite de saturation. Lorsque celle-ci est atteinte, des bulles commencent à se former qui entraînent le liquide sous-jacent avec elles. Une fois le processus amorcé, l'action de la pompe est inutile et celle-ci peut être arrêtée. Un jet d'eau et de dioxyde de carbone jaillit une cinquantaine de mètres au-dessus de la surface du lac (telle une fantastique fontaine – Cf. **figure 2**) et le dioxyde de carbone se dissipe alors en quantité inoffensive dans l'atmosphère.

Or, il s'avère que le lac Nyon n'est pas le seul lac africain sursaturé en gaz dissous et concerné par une possible **éruption limnique**. Le lac Kivu, au Congo, recèle dans ses profondeurs une énorme quantité de méthane dissous (en plus du gaz carbonique). Contrairement à la cinétique de désorption progressive du CO₂ pur hors du lac Nyon, la cinétique de désorption du mélange CO₂-méthane semble ne pas obéir aux modèles développés par Michel Halbwachs et son équipe. Un partenariat pourrait être envisagé sur ce sujet pour tenter de mettre en relation les modèles de dégazage développés récemment pour rendre compte de la cinétique de désorption du CO₂ dans le champagne⁷⁹, avec ceux développés pour rendre compte de la désorption des gaz dissous à grande échelle hors des lacs africains.

⁷⁹ Liger-Belair. J. Phys. Chem. B 120, 3724, 2016

I. ANNEXES

Annexe 1 : Présentation synthétique (Executive Summary)

VOIR DOCUMENTS CI-JOINTS

Vague C :
campagne d'évaluation 2016-2017
Présentation synthétique de l'entité
Unité de recherche : GSMA, UMR CNRS 7331

Intitulé de l'entité : Groupe de Spectrométrie Moléculaire et Atmosphérique, GSMA UMR CNRS 7331

Nom du directeur de l'entité pour le contrat en cours : Georges DURRY

Nom du directeur de l'entité pour le contrat à venir : Georges DURRY

Effectifs de l'entité (au début du contrat en cours)

21 enseignants-chercheurs ; 2 chercheurs ; 8 techniciens, ingénieurs et autres personnels ; 8 post-docs et doctorants.

Personnels ayant quitté l'entité pendant le contrat en cours (et nombre de mois cumulés passés dans l'entité au cours de cette période).

2 statutaires (16 mois) ; 19 doctorants (614 mois)

Nombre de recrutements réalisés au cours de la période considérée et origine des personnels

2 CR-CNRS (1 mutation, 1 recrutement), 2 MCF (1 mutation, un retour de disponibilité), 2.5 IR (2 mutations, 1 recrutement), 2 Tech (1 mutation, 1 recrutement), 0.5 Adj. Tech (mutation), 14 doctorants, 2 post-doctorants

Réalizations et produits de la recherche au cours de la période écoulée (1er janvier 2011 - 30 juin 2016) :

- La première caractérisation précise de l'état de transition de l'ozone vers la dissociation, confirmée par les analyses de spectres, a permis de résoudre une controverse débattue dans la littérature depuis 20 ans: c'est le résultat majeur de l'ANR IDEO coordonnée par VI.Tyuterev (GSMA) qui a fait l'objet d'une publication dans PRL [VI. G. Tyuterev & al., Physical Review Letters, 113, (2014)].
- Premières prédictions ab initio de spectres du méthane et d'éthylène qui ont permis une avancée décisive pour l'attribution de spectres dans une large gamme de fréquences (doublement du nombre de bandes interprétées), ainsi que pour la génération de listes théoriques pour l'astrophysique à 2000 K ; ANR CH4@Titan, publications par M. Rey et al, Physical Chemistry Chemical Physics -2013, Astrophysical Journal-2014, Astronomy and Astrophysics – 2016.
- Médaille de bronze du CNRS remise en 2015 à Panayotis Lavvas pour ses travaux en planétologie. P Lavvas est co-auteur du papier dans Science en 2016 sur Pluton\new-Horizon : "The atmosphere of Pluto as observed by New Horizons", G. R.Gladstone & al., Science, Vol. 351, Issue 6279, 2016.
- La mission Russe vers Phobos, la lune de Mars, « Phobos-Grunt » est lancée depuis Baïkonour en novembre 2011 avec à son bord le spectromètre laser TDLAS pour l'analyse de la subsurface sous responsabilité du GSMA (PI. G. Durry).
- Le laboratoire a participé à un travail très médiatique autour de l'analyse d'un champagne vieux de 170 ans découvert au fond de la Baltique ; G. Liger Belair et C. Cilindre sont co-auteurs de la publication dans PNAS en 2015 [Jeandet P& al, « Chemical messages in 170-year-old champagne bottles from the Baltic Sea: Revealing tastes from the past », Proc. Natl. Acad. Sci. USA, 112, 2015].

Bilan quantitatif des publications de l'entité.

	2011	2012	2013	2014	2015	2016*	TOTAL
Journaux internationaux avec comité de lecture référencés (ACL de rang A)	25	44	51	42	45	23*	230

*publications jusqu'au 30 juin 2016

Indiquer les **5 publications majeures** de l'entité

- « Precision Measurements and Computations of Transition Energies in Rotationally Cold Triatomic Hydrogen Ions up to the Midvisible Spectral Range », M. Pavanello, L. Adamowicz, A. Alijah, N. F. Zobov, I. I. Mizus, O. L. Polyansky, J. Tennyson, T. Szidarovszky, A. G. Császár, M. Berg, A. Petrigiani, and A. Wolf, , *Physical Review Letters*, 108, 023002 (2012).
- "Aerosol growth in Titan's ionosphere", Lavvas, P., Yelle, R.V., Koskinen, T., Bazin, A., Vuitton, V., Vigren, E., Galand, M., Wellbrock, A., Coates, A.J., Wahlund, J.-E., Crary, F.J., Snowden, D., *Proc. Natl. Acad. Sci. USA* (PNAS), doi/10.1073/pnas.1217059110, (2013).
- "Unveiling the interplay between diffusing CO2 and ethanol molecules in Champagne wines by classical molecular dynamics and 13C-NMR spectroscopy", D. Bonhommeau, A. Perret, J.-M., Nuzillard, C. Cilindre, T. Cours, A. Alijah, G. Liger-Belair, *J. Phys. Chem. Lett.*, 5, 4232-4237, 2014.

- "Does the "Reef Structure" at the Ozone Transition State towards the Dissociation Exist? New Insight from Calculations and Ultrasensitive Spectroscopy Experiments", Vl. G. Tyuterev, R. Kochanov, A. Campargue, S. Kassi, D. Mondelain, A. Barbe, E. Starikova, M. R. De Backer, P. G. Szalay, and S. Tashkun, *Physical Review Letters*, 113, (2014)].
- "Theoretical hot methane line list up to 2000 K", M. Rey, A.V. Nikitin and Vl. G. Tyuterev, *Astrophysical Journal*, 789 (2014)

Indiquer **au maximum 5 documents majeurs** (autres que les publications) produits par l'entité (par exemple : rapport d'expertise, logiciel, corpus, protocole, brevet en licence d'exploitation...).

- Brevet : « détecteur de gaz photoacoustique à cellule de Helmholtz », M. Brun, S. Nicoletti, B. Parvitte, V. Zéninari, publication n° fr 2974413 (a1), bopi 2012-10, le 26.10.2012, publication n° fr 2974413 (b1), bopi 2014-06, le 13.06.2014.
- Brevet : « Procédé et dispositif de détection de traces de gaz multiples », V. Zéninari, B. Parvitte, L. Joly, G. Durry, R. le Loarer, J-C. Garcia, R. Hamelin, publication n° fr 2 963 102 (a1), bopi 2012-04, le 27.01.2012, publication n° wo 2012 010806 (a1), le 26.01.2012, publication n° ep 2 596 331 (a1), le 29.05.2013, publication us patent n° us 2013 0205871 (a1), le 15.08.2013
- Base de données moléculaires et logiciel de modélisation sur l'ozone gérés par le GSMA: système informatique S&MPO, " Spectroscopy and Molecular Properties of Ozone," développé et maintenu conjointement par le GSMA (V.Tyuterev, A.Barbe) et l'Académie des Sciences de Russie (Yu.Babikov, S.Mikhailenko), <http://smo.univ-reims.fr>.
- Base de données moléculaires et logiciel de modélisation: TheoReTS, "Information system for theoretical line lists based on variational predictions from molecular potential energy and dipole moment surfaces" destiné à la modélisation de spectres de molécules d'intérêt astrophysique et planétologique (méthane, éthylène, phosphine, germane, silane, ...) développé par les équipes de Reims (GSMA : M.Rey et V.Tyuterev) et de Tomsk (A.Nikitin Y.Babikov) dans le cadre du LIA Franco-Russe « SAMIA » <http://theorets.univ-reims.fr>
- Ouvrage grand public : G. Liger-Belair, D. Demarville, M. Onfray "Champagne ! la vie secrète des bulles", Cherche Midi, Paris, 2014.

Indiquer **au maximum 5 faits illustrant le rayonnement ou l'attractivité académiques** de l'entité

- Obtention de la Médaille de bronze du CNRS en 2015 par Panayotis Lavvas (INSU, Planétologie).
- Organisation du congrès international de spectroscopie atmosphérique ASA- HITRAN en 2012 et 2016 en partenariat avec l'université d'Harvard (alternance tous les deux ans, Boston/Reims).
- Organisation du workshop international Water Budget in the Tropical Tropopause Layer (WBTL) par le GSMA en juillet 2015.
- Obtention d'un PICS « Titan Aerosol & Clouds » avec l'université d'Arizona en 2016 et séjour pendant 4 mois au GSMA de Robert A. West, Senior scientist à la NASA - Jet Propulsion Laboratory.
- Conférence invitée de M. Rey, "Accurate first-principles spectra predictions for planetological and astrophysical applications at various t-conditions", Colloque International HITRAN, Harvard, Boston USA, 2014.

Au maximum 5 faits illustrant les interactions de l'entité avec son environnement socio-économique ou culturel

- En 2011, la startup Aérovia cofondée par quatre chercheurs du GSMA, pour la mesure de gaz par lasers, est lauréate du concours national à l'innovation OSEO. En 2013, le groupe Schlumberger en devient le principal actionnaire. En 2016, Aérovia compte dix salariés, ingénieurs et techniciens à Reims.
- Financement par le plan Etat - Région en 2013, d'une nouvelle TF Bruker à haute résolution spectrale (350k€) pour le GSMA.
- Bourse CIFRE avec Bull (2012-2105) pour la modélisation moléculaire appliquée à l'effervescence en utilisant le supercalculateur ROMEO de Champagne-Ardenne.
- Projet ECO-Industrie obtenu en 2014 (ADEME, BPI-France) «Ultra Low Infrared Spectroscopy», avec la PME Environnement SA pour 230k€.
- Organisation de 6 conférences atmosphère/planète grand public en ville (Mairie, Médiathèque, siège Université) et conférence inaugurale de la Fête de la Science en région Champagne Ardenne en 2015 (« Lumière et climat », G. Durry).

Indiquer **les principales contributions de l'entité à des actions de formation**

Responsabilité de la mention de master « Physique-Chimie » (G. Durry), la spécialité (M2) « Nanosciences Optique Atmosphère » (V. Zéninari) et de la spécialité « Sciences Physiques » de préparation aux métiers de l'enseignement (L. Régalia). Responsabilité de la préparation à l'agrégation de physique (M. Rotger). Responsabilité du département de Physique de l'URCA (M. Rotger). Au sein de la mention Génie des Environnements Naturels et Industriels (GENI), responsabilité du MASTER 2 « *Management de l'Environnement Déchets et Énergie* » (E. Roth) et celle du MASTER 1 « *Génie des Environnements naturels et Industriels* » (A. Chakir).

Group C: 2016-2017 evaluation campaign

Executive summary of the unit

Research unit: GSMA,UMR CNRS 7331

Unit name : Groupe de Spectrométrie Moléculaire et Atmosphérique, GSMA UMR CNRS 7331

Name of the unit for the current contract: Georges DURRY

Name of the unit for the future contract: Georges DURRY

Unit workforce (at the start of the current contract).

21 professors; 2 researchers; 8 technicians, engineers and other staff; 8 post-doctoral and doctoral students.

Staff who have left the unit during the current contract.

2 established staff (16 months); 19 doctoral students (614 months).

Number of recruitments carried out during the period in question and where the staff come from

2 CR-CNRS (1 mutation, 1 recruitment), 2 MCF (1 mutation, 1 back from a sabbatical year), 2.5 IR (2 mutations, 1 recruitment), 2 Tech (1 mutation, 1 recruitment), 0.5 Adj. Tech (mutation), 14 PhD, 2 post-doc.

Research products and achievements over the previous period (1 January 2011 - 30 June 2016):

- First accurate characterization of the ozone transition state towards the dissociation, confirmed by spectra analyses, has permitted resolving a controversial issue discussed in the literature since twenty years: this is a major result of the ANR IDEO project coordinated by VI.Tyuterev that was the subject of the publication in PRL ["Does the "Reef Structure" at the Ozone Transition State towards the Dissociation Exist? New Insight from Calculations and Ultrasensitive Spectroscopy Experiments", VI. G. Tyuterev & al., Physical Review Letters, 113, (2014)].
- First ab initio prediction of methane and ethylene spectra has permitted a breakthrough in the spectra analyses in a large frequency range (the number of assigned methane bands has been doubled) and also the generation of a theoretical line lists for astrophysical applications up to 2000 K: following the ANR CH4@Titan, publications by M. Rey et al, Physical Chemistry Chemical Physics -2013, Astrophysical Journal-2014, Astronomy and Astrophysics – 2016.
- Panayotis Lavvas was one of the CNRS Bronze Medal winners for 2015. He was awarded in recognition for his research upon Titan atmosphere. Panayotis Lavvas was also co-author of the paper in Science on Pluto as seen by New-Horizons: "The atmosphere of Pluto as observed by New Horizons", G. R.Gladstone & al., Science, Vol. 351, Issue 6279, 2016.
- The Russian space mission to Mars, "Phobos-Grunt" was launched from Baikonur, on November 2011. A laser spectrometer of the GSMA, "TDLAS" (Pl.G.Durry), was installed in the Lander for the in situ analysis of the Phobos soil.
- The laboratory was involved in the analysis of a 170-year-old champagne recovered from a Baltic shipwreck; G. Liger Belair et C. Cilindre are co-authors of a paper in PNAS in 2015 [Jeandet P& al, « Chemical messages in 170-year-old champagne bottles from the Baltic Sea: Revealing tastes from the past », Proc. Natl. Acad. Sci. USA, 112, 2015].

Quantitative overview of the unit's publications.

	2011	2012	2013	2014	2015	2016*	TOTAL
Peer-reviewed articles ("A")	25	44	51	42	45	23*	230

*until 30 June 2016

Please state the unit's **5 major publications.**

- «Precision Measurements and Computations of Transition Energies in Rotationally Cold Triatomic Hydrogen Ions up to the Midvisible Spectral Range », M. Pavanello, L. Adamowicz, A. Alijah, N. F. Zobov, I. I. Mizus, O. L. Polyansky, J. Tennyson, T. Szidarovszky, A. G. Császár, M. Berg, A. Petrigani, and A. Wolf, , *Physical Review Letters*, 108, 023002 (2012).
- "Aerosol growth in Titan's ionosphere", Lavvas, P., Yelle, R.V., Koskinen, T., Bazin, A., Vuitton, V., Vigren, E., Galand, M.,Wellbrock, A., Coates, A.J., Wahlund, J.-E., Cray, F.J., Snowden, D., *Proc. Natl. Acad. Sci. USA* (PNAS), doi/10.1073/pnas.1217059110, (2013).
- "Unveiling the interplay between diffusing CO₂ and ethanol molecules in Champagne wines by classical molecular dynamics and 13C-NMR spectroscopy", D. Bonhommeau, A. Perret, J.-M., Nuzillard, C. Cilindre, T. Cours, A. Alijah, G. Liger-Belair, *J. Phys. Chem. Lett.*, 5, 4232-4237, 2014.

- "Does the "Reef Structure" at the Ozone Transition State towards the Dissociation Exist? New Insight from Calculations and Ultrasensitive Spectroscopy Experiments", Vi. G. Tyuterev, R. Kochanov, A. Campargue, S. Kassi, D. Mondelain, A. Barbe, E. Starikova, M. R. De Backer, P. G. Szalay, and S. Tashkun, *Physical Review Letters*, 113, (2014)].
- "Theoretical hot methane line list up to 2000 K", M. Rey, A.V. Nikitin and Vi. G. Tyuterev, *Astrophysical Journal*, 789 (2014)

Please state **5 major documents at the most** (other than publications).

- Patent : « détecteur de gaz photoacoustique à cellule de Helmholtz », M. Brun, S. Nicoletti, B. Parvitte, V. Zéninari, publication n° fr 2974413 (a1), bopi 2012-10, le 26.10.2012, publication n° fr 2974413 (b1), bopi 2014-06, le 13.06.2014.
- Patent : « Procédé et dispositif de détection de traces de gaz multiples », V. Zéninari, B. Parvitte, L. Joly, G. Durry, R. le Loarer, J-C. Garcia, R. Hamelin, publication n° fr 2 963 102 (a1), bopi 2012-04, le 27.01.2012 , publication n° wo 2012 010806 (a1), le 26.01.2012 , publication n° ep 2 596 331 (a1), le 29.05.2013, publication us patent n° us 2013 0205871 (a1), le 15.08.2013
- Open molecular database and modelization software dedicated to ozone and managed by the GSMA: S&MPO computing system, " Spectroscopy and Molecular Properties of Ozone," jointly implemented by the GSMA (V.Tyuterev , A.Barbe) and the Russian Academy of Sciences (Yu.Babikov, S.Mikhailenko), <http://smmpo.univ-reims.fr>.
- Open molecular database and modelization software managed by the GSMA: TheoReTS, "Information system for theoretical line lists based on variational predictions from molecular potential energy and dipole moment surfaces » dedicated to molecules of interest for astrophysics and planetary sciences (methane, ethylene, phosphine, germane, silane, ...) and jointly implemented by the GSMA (M.Rey et V.Tyuterev) and Tomsk (A.Nikitin Y.Babikov) within the framework of the CNRS International Associated Laboratory "SAMIA", <http://theorets.univ-reims.fr>
- General audience and educational book : G. Liger-Belair, D. Demarville, M. Onfray "Champagne ! la vie secrète des bulles", Recherche Midi, Paris, 2014.

Please state **no more than 5 facts illustrating the academic appeal or reputation** of the unit

- Panayotis Lavvas (CNRS junior researcher) was one of the CNRS Bronze Medal winners for 2015 (INSU).
- Organization in Reims, in 2012 and 2016, of an international congress in the field of atmospheric spectroscopy, "ASA-HITRAN" in collaboration with the Harvard University (held every two years, alternatively in Boston and Reims).
- Organization of an international workshop dedicated to the water vapour in the tropical tropopause in July 2015: "Water Budget in the Tropical Tropopause Layer (WB TTL)".
- A CNRS program for international scientific cooperation (PICS) proposed by the GSMA in 2016 was selected to strengthen the collaboration with the University of Arizona in the field of planetary sciences. Robert. A. West, Senior Scientist at NASA-Jet Propulsion Laboratory spent 4 months in the lab for a collaborative work on Titan atmosphere.
- Invited lecture of M. Rey (CNRS junior researcher), "Accurate first-principles spectra predictions for planetary and astrophysical applications at various t-conditions", International congress HITRAN , Harvard, Boston USA, 2014

Please state **no more than 5 facts illustrating the unit's interactions with its socioeconomic or cultural environment**

- In 2011, the start-up « Aerovia », cofounded by 4 researchers of the lab and dedicated to environmental sensors, was winner of the OSEO national innovation contest. In 2013, the Schlumberger international company became the main shareholder of Aerovia. In 2016, Aerovia has ten employees (engineers and technicians) in Reims (www.aerovia.fr).
- The purchase of a high-resolution Bruker FT spectrometer was funded (350k€) in 2013, within the framework of the state – region contract plan.
- A PhD thesis was supported through a CIFRE contract (2012-2015) with the Bull company to apply molecular modelization to effervescence in Champagne using the regional supercomputer, ROMEO.
- «Ultra Low Infrared Spectroscopy», an ECO-Industry project (ADEME, BPI-France) submitted by the GSMA in tight collaboration with Environment SA (a French company dedicated to environmental sensors) was selected in 2014 (230k€).
- Organization of six major public conferences in planetary sciences in the Reims city hall and multimedia library. Inaugural lecture for the Fête de la Science in the Champagne Ardenne region in 2015 (« Light and climate », G. Durry).

Please state **the unit's main contributions to training actions**.

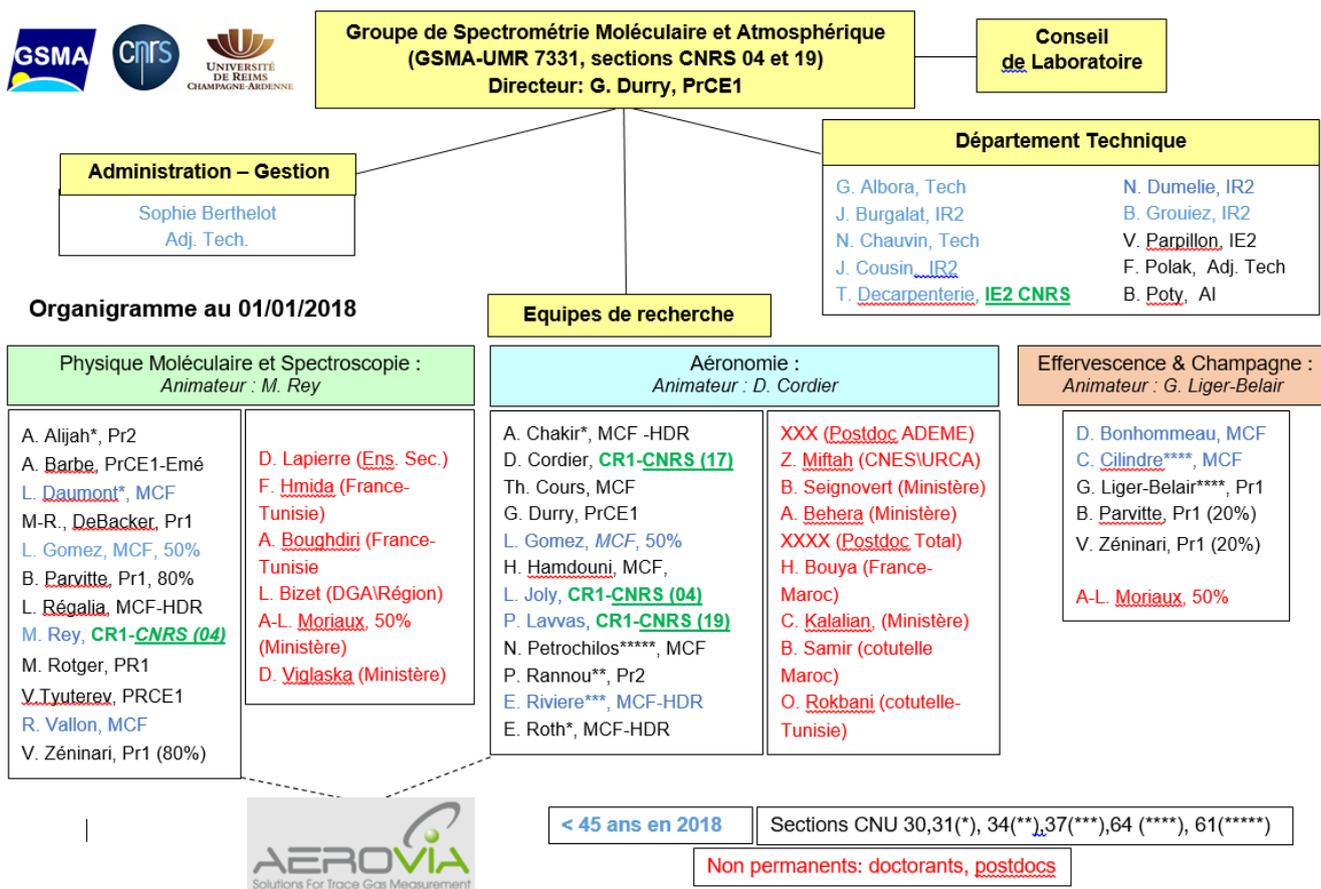
Responsibility of the overall Master degree « *Physics and Chemistry* » (G. Durry). Responsibility of the Master 2 degree « *Nanosciences, Optics, Atmosphere* » (V. Zéninari) . Responsibility of Master 1 & 2 degrees "Preparation to careers in education" (L. Régalia). Responsibility of the preparation to the « agrégation » of Physics (M. Rotger). Head of the Physics department of the university (M. Rotger). Responsibility of the Master 2 degree « *Waste, Energy and environmental Management* » (E. Roth) and responsibility of the Master 1 degree « *Environmental and industrial engineering* » (A. Chakir).

Annexe 2 : Lettre de mission contractuelle

Annexe 3 : Équipements, plateformes

Équipement / Plateforme	Appartenance	N de projets	Heures CPU	Années
Meso-Centre de calcul « ROMEO »	Région Champagne-Ardenne	4	Access libre	2011-2016
Centre National « IDRIS »	CNRS	1	800 000	2011-2016
Centre National « CINES »	Ministère MENESR	1	1 100 000	2011-2016
Centre National « CURIE »	CEA	1	2 240 000	2013-2014
P3M	URCA	1	N / A	2012-2014

Annexe 4 : Organigramme fonctionnel



Annexe 5 : Règlement intérieur

En cours de finalisation au moment d’écrire le document. Il sera présenté lors de l’audition.

Annexe 6 : Liste des réalisations et produits de la recherche

Cette liste sera répartie selon les trois rubriques indiquées dans le dossier : 1) la production scientifique ; 2) les indices de rayonnement et d'attractivité académiques ; 3) les produits destinés à des acteurs du monde social, économique et culturel.

On classera les réalisations selon la subdivision en équipes internes ou en thèmes, si l'unité de recherche est organisée de cette manière. Les produits communs à plusieurs équipes internes seront regroupés dans une rubrique spécifique.

Dans le cas de publications cosignées par plusieurs personnes, la liste de tous les auteurs sera établie, excepté lorsque le nombre de co-auteurs sera supérieur à la quinzaine. Les noms des membres de l'unité de recherche, de l'équipe interne ou du thème seront soulignés dans la liste des co-auteurs.

Pour les personnels recrutés au cours des cinq dernières années, les produits réalisés dans leur unité de recherche d'origine seront mentionnés dans une liste séparée.

Equipe PMT (E1)

	2011	2012	2013	2014	2015	2016	TOTAL
<i>Journaux internationaux avec comité de lecture référencés (ACL de rang A)</i>	6	16	19	15	21	5	82
<i>Journaux nationaux avec comité de lecture</i>					1		1
<i>Chapitres d'ouvrage</i>					1		1
<i>Communications orales invitées (INV)</i>	1	1	1	4	1		8
<i>Communications internationales avec actes (ACTI)</i>	1				1		2
<i>Communications orales internationales</i>	2	4	2	4	3		11
<i>Communications orales nationales</i>	4	3	5	5	2		14
<i>Communications par affiche</i>	7	12	15	11	22		67

Equipe MSA (E2)

	2011	2012	2013	2014	2015	2016	TOTAL
<i>Journaux internationaux avec comité de lecture référencés (ACL de rang A)</i>	5	5	13	10	3	4	40
<i>Brevets</i>							
<i>Journaux nationaux avec comité de lecture</i>							
<i>Chapitres d'ouvrage</i>							
<i>Communications orales invitées (INV)</i>		1	1				2
<i>Communications internationales avec actes (ACTI)</i>							
<i>Communications orales internationales</i>	4	3	4	4	2		17
<i>Communications orales nationales</i>		1		1	1		3
<i>Communications par affiche</i>	14	19	6	17	13		69

Equipe SLA (E3)

	2011	2012	2013	2014	2015	2016	TOTAL
<i>Journaux internationaux avec comité de lecture référencés (ACL de rang A)</i>	4	4	3	2	2	3	18
<i>Brevets et extensions</i>		8	11	2	4		21
<i>Communications orales invitées (INV)</i>	1				1		2
<i>Communications internationales avec actes (ACTI)</i>		1	1	3			5
<i>Communications orales internationales</i>	1		2	3	2		8
<i>Communications orales nationales</i>		1	1	2	1		5
<i>Communications par affiche</i>	11	8	11	13	6		49

Equipe RPA (E4)

	2011	2012	2013	2014	2015	2016	TOTAL
<i>Journaux internationaux avec comité de lecture référencés (ACL de rang A)</i>	2	5	9	6	5	1	28
<i>Communications orales invitées (INV)</i>				1	1		2
<i>Communications orales internationales</i>	5	1		2	2		10
<i>Communications orales nationales</i>		1	1	1	1		4
<i>Communications par affiche</i>	4	1	4	5	1		15

Equipe ECA (E5)

	2011	2012	2013	2014	2015	2016	TOTAL
<i>Journaux internationaux avec comité de lecture référencés (ACL de rang A)</i>	3	8	5	5	8	4	33
<i>Brevets</i>	0	0	0	0	0		0
<i>Journaux nationaux avec comité de lecture</i>	2	0	0	1	1		4
<i>Ouvrages et Chapitres d'ouvrage</i>	1	1	4	2	5		13
<i>Communications orales invitées (INV)</i>	7	9	5	4	5		30
<i>Communications internationales avec actes (ACTI)</i>		3		1			4
<i>Communications orales internationales</i>	1	1	1	4	2		9
<i>Communications orales nationales</i>			6		1		7

Equipe Aéronomie (E6)

	2011	2012	2013	2014	2015	2016	TOTAL
<i>Journaux internationaux avec comité de lecture référencés (ACL de rang A)</i>	11	14	15	12	9	6	67

Publications GSMA dans des revues internationales de rang A (2011- juin 2016).

Le nom des équipes impliquées figure au début de la publication (E1 = PMT, E2 = MSA, E3 =SLA, E4 = RPA, E5 = ECA, E6 = Aéronomie). Les membres du laboratoire sont soulignés.

La liste des brevets est donnée à la fin.

2011

1. **E1-2011-1** Are ab initio quantum chemistry methods able to predict vibrational states up to the dissociation limit for multi-electron molecules close to spectroscopic accuracy?
P.Szalay, F. Holka, J.Fremont, M.Rey, K.Peterson, Vl.G.Tyuterev,
Phys. Chem. Chem. Phys, 13, pp. 3654-3659 (2011).
2. **E1-2011-2** Accurate ab initio determination of the adiabatic potential energy function and the Born-Oppenheimer breakdown corrections for the electronic ground state of LiH isotopologues
F. Holka, P.Szalay, J.Fremont, M.Rey, K.Peterson, Vl.G.Tyuterev,
J. Chem. Phys, 134 (7) (2011).
3. **E1-E2-2011-3-1** Detection and analysis of new bands of $^{16}\text{O}_3$ by CRDS between 6500 and 7300 cm^{-1} .
A. Barbe, M.-R. De Backer-Barilly, V.G. Tyuterev, S. Kassi, A. Campargue.
Journal of Molecular Spectroscopy 269 (2), pp 175-186 (2011).
<http://dx.doi.org/10.1016/j.jms.2011.06.005>
4. **E1-2011-4** Rotational and vibrational energy levels of methane calculated from a new potential energy surface Oppenheimer breakdown corrections for the electronic ground state of LiH isotopologues
A.Nikitin, M.Rey Vl.G.Tyuterev,
Chemical Physics Letters, 501, Issues 4-6, pp 179-186 (2011).
5. **E1-E2-2011-5-3** First assignment of the $5\nu_4$ and $\nu_2+4\nu_4$ band systems of $^{12}\text{CH}_4$ in the 6287-6550 cm^{-1} region.
A.V. Nikitin, X. Thomas, L. Régalia, L. Daumont, P. Von der Heyden, V. Tyuterev, L. Wang, S. Kassi, A. Campargue.
Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer 112, pp 28-40 (2011).
<http://dx.doi.org/10.1016/j.jqsrt.2010.08.006>
6. **E1-E2-2011-6-2** Preliminary assignments of $2\nu_3-\nu_4$ hot band of $^{12}\text{CH}_4$ in the 2 μm transparency window from long-path FTS spectra.
A.V. Nikitin, L. Daumont, X. Thomas, L. Régalia, M. Rey, V.G. Tyuterev, L.R. Brown.
Journal of Molecular Spectroscopy 268, Issues 1-2, pp 93-106 (2011).
<http://dx.doi.org/10.1016/j.jms.2011.04.002>
7. **E2-2011-3** D_{2h} TDS-ST software for Stark spectrum simulation of X_2Y_4 asymmetric-top molecules.
M. Sanzharov, M. Rotger, C. Wenger, M. Loëte, V. Boudon, A. Rouzée.
Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer 112, pp 41-52 (2011).
<http://dx.doi.org/10.1016/j.jqsrt.2010.08.023>
8. **E2-2011-4** The 2009 edition of the GEISA spectroscopic database.
N. Jacquinet-Husson, L. Crepeau, R. Armante, C. Boutammine, A. Chédin, N.A. Scott, C. Crevoisier, V. Capelle, C. Boone, N. Poulet-Crovisier, A. Barbe, A. Campargue, D. Chris Benner, Y. Benilan, B. Bézard, V. Boudon, L.R. Brown, L.H. Coudert, A. Coustenis, V. Dana, V.M. Devi, S. Fally, A. Fayt, J.M. Flaud, A. Goldman, M. Herman, G.J. Harris, D. Jacquemart, A. Jolly, I. Kleiner, A. Kleinböhl, F. Kwabia-Tchana, N. Lavrentieva, N. Lacome, L.H. Xu, O.M. Lyulin, J.Y. Mandin, A. Maki, S. Mikhailenko, C.E. Miller, T. Mishina, N. Moazzen-Ahmadi, H.S.P. Müller, A. Nikitin, J. Orphal, V. Perevalov, A. Perrin, D.T. Petkie, A. Predoi-Cross, C.P. Rinsland, J.J. Remedios, M. Rotger, M.A.H. Smith, K. Sung, S. Tashkun, J. Tennyson, R.A. Toth, A.C. Vandaele, J. Vander Auwera.
Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer 112, pp 2395-2445 (2011).
<http://dx.doi.org/10.1016/j.jqsrt.2011.06.004>
9. **E3-E6-2011-1-6** Continuous-wave quantum cascade lasers absorption spectrometers for trace gas detection in the atmosphere

- L. Joly, V. Zéninari, T. Decarpenterie, J. Cousin, B. Grouiez, D. Mammez, G. Durry, M. Carras, X. Marcadet, B. Parvitte
Laser Physics, **21**, 4, pp. 805-812 (2011)
<http://dx.doi.org/10.1134/S1054660X11070127>
10. **E3-2011-2 Study of a thermophysical system with two time constants using an open photoacoustic cell**
B. Bonno, V. Zéninari, L. Joly, B. Parvitte
International Journal of Thermophysics, **32**, 3, pp. 630-640 (2011)
<http://dx.doi.org/10.1007/s10765-011-0918-x>
 11. **E3-E6-2011-3-5 Tunable diode laser measurement of pressure-induced shift coefficients of CO₂ around 2.05 μm for Lidar application**
J.S. Li, G. Durry, J. Cousin, L. Joly, B. Parvitte, P.H. Flamant, F. Gibert, V. Zéninari
Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer, **112**, 9, pp. 1411-1419 (2011)
<http://dx.doi.org/10.1016/j.jqsrt.2011.01.030>
 12. **E3-E6-2011-4-2 Development of a versatile atmospheric N₂O sensor based on quantum cascade laser technology at 4.5 μm**
L. Joly, T. Decarpenterie, N. Dumelié, X. Thomas, I. Mappe-Fogaing, J. Cousin, D. Mammez, R. Vallon, G. Durry, B. Parvitte, M. Carras, X. Marcadet, V. Zéninari
Applied Physics B, **103**, 3, pp. 717-723 (2011)
<http://dx.doi.org/10.1007/s00340-011-4522-3>
 13. **E4-2011-1 The heterogeneous photo-oxidation of difenoconazole in the atmosphere.**
M. Al Rashidi, O. El Mouden, A. Chakir, E. Roth, R. Salghi. Atmospheric Environment **45**, (2011) 5997-6003.
 14. **E4-2011-2 Electrooxidation of Bupirimate: A Comparative Study of SnO₂ and Boron Doped Diamond Anodes.**
M. Errami, R. Salghi, N. Abidi, L. Bazzi, B. Hammouti, A. Chakir, E. Roth, S. S. Al-Deyab Int. J. Electrochem. Sci., **6** (2011) 4927 - 4938.
 15. **E5-2011-1 Losses of dissolved CO₂ through the cork stopper during champagne aging: toward a multiparameter modelling**, Liger-Belair G, Villaume S (2011) J. Agric. Food Chem. **59**, 4051-4056.
 16. **E5-2011-2 Simultaneous monitoring of gaseous CO₂ and ethanol above champagne glasses via micro gas chromatography (μGC)**, Cilindre C, Conreux A, Liger-Belair G (2011) J. Agric. Food Chem. **59**, 7317-7323.
 17. **E5-2011-3 Metabolic influence of Botrytis cinerea infection in Champagne base wine**, Hong YS, Cilindre C, Liger-Belair G, Jeandet P, Hertkorn N, Schmitt-Kopplin P (2011) J. Agric. Food Chem. **59**, 7237-7245.
 18. **E6-2011-1 The 2010 European Venus Explorer (EVE) mission proposal**, C.F. Wilson, E. Chassefière, E. Hinglais, K.H. Baines, T.S. Balint, J.-J. Berthelier, J. Blamont, G. Durry, Cs. Ferencz, R.E. Grimm, T. Imamura, Jean-Luc Josset, F. Leblanc, S. Lebonnois, J.J. Leitner, S.S. Limaye, B. Marty, E. Palomba, S.V. Pogrebenko, S.C.R. Rafkin, D.L. Talboys, R. Wieler, L.V. Zasova, C. Szopa, and the EVE team. Experimental Astronomy, DOI 10.1007/s10686-011-9259-9, 2011.
 19. **E6-2011-3 Spectroscopy of CH₄ with a Difference Frequency Generation laser at 3.3 micron for atmospheric application**, M. Ghysels, L. Gomez, J. Cousin, N. Amarouche, H. Jost and G. Durry, Applied Physics B, Vol.104, pp. 989-1000, 2011.
 20. **E6-2011-4 An overview of the HIBISCUS campaign**, J-P. Pommereau, A. Garnier, G. Held, A.M. Gomez, F. Goutail, G. Durry, F. Borch, A. Hauchecorne, N. Montoux, P. Cocquerez, G. Letrenne, F. Vial, A. Hertzog, B. Legras, I. Pisso, J.A. Pyle, N.R.P. Harris, R.L. Jones, A.D. Robinson, G. Hansford, L. Eden, T. Gardiner, N. Swann; B. Knudsen, N. Larsen, J.K. Nielsen, T. Christensen, F. Cairo, F. Fierli, M. Pirre, V. Marecal, N. Huret, E.D. Riviere, H. Coe, D. Grosvenor, K. Edvarsen, G. Di Francesco, P. Ricaud, J.-J. Berthelier, M. Godefroy, E. Seran, K. Longo, and S. Freitas, Atmos. Chem. Phys., **11**, 2309-2339, 2011.
 21. **E6-2011-7 Dual Origin of Aerosols in Titan's Detached Haze Layer**, Cours T., Burgalat J., Rannou P., Rodriguez S., Brahic, A. and West, R. A., The Astrophysical Journal Letters, Volume 741, Issue 2, article id. L32 (2011).

22. **E6-2011-8 Titan's cloud activity from winter to spring with Cassini/VIMS**, Rodriguez S., Le Mouélic S., Rannou P., Sotin C., Brown, R.H., Barnes J.W., Griffith C.A., Burgalat J., Baines K.H., Buratti B.J., Clark R.N. and Nicholson, P.D. *Icarus*, 216, 89-110, (2011).
23. **E6-2011-9 The Evolution of Titan's Detached Haze near Equinox in 2009**, West R.A., Balloch J., Dumont P., Lavvas P., Lorenz R., Rannou P., Ray R., and Turtle E., *Geophysical Research Letter*, 38, L06204, (2011).
24. **E6-2011-10 Comparison of classical, semiclassical and quantum methods in hydrogen broadening of acetylene lines**, F. Thibault, S. V. Ivanov, O. G. Buzykin, L. Gomez, M. Dhyne, P. Joubert, M. Lepere. *Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer*, Volume 112, Issue 9, June 2011, Pages 1429-1437.
doi: 10.1016/j.jqsrt.2011.02.011
25. **E6-2011-11 Comparison of quantum, semiclassical and classical methods in hydrogen broadening of nitrogen lines**, L. Gomez, S. V. Ivanov, O. G. Buzykin, F. Thibault. *Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer*, Volume 112, Issue 12, August 2011, Pages 1942-1949.
doi: 10.1016/j.jqsrt.2011.04.005

2012

26. **E1-2012-1 Precision measurements and computations of transition energies in rotationally cold triatomic hydrogen ions up to the mid-visible spectral range**
M. Pavanello, L. Adamowicz, A. Alijah, N. F. Zobov, I. I. Mizus, O. L. Polyansky, J. Tennyson, T. Szidarovszky, A. G. Csaszar, M. Berg, A. Petrignani and A. Wolf,
Phys. Rev. Lett. 108, 023002 (2012).
27. **E1-2012-2 Spectroscopy of H₃⁺ and isotopologues, based on a new high accuracy global potential energy surface and dipole moment surface**
O. L. Polyansky, A. Alijah, N. F. Zobov, I. I. Mizus, R. I. Ovsyannikov, J. Tennyson, L. Lodi, T. Szidarovszky and A. G. Csaszar,
Phil. Trans. R. Soc. A 370, 5014-5027 (2012).
28. **E1-2012-3 Calibration-quality adiabatic potential energy surfaces for H₃⁺ and its isotopologues**
M. Pavanello, L. Adamowicz, A. Alijah, N. F. Zobov, I. I. Mizus, O. L. Polyansky, J. Tennyson, T. Szidarovszky and A. G. Csaszar,
J. Chem. Phys. 136, 184303 (2012).
29. **E1-2012-4 Core-mass nonadiabatic corrections to molecules : H₂ , H₂⁺ and isotopologues**
L. G. Diniz, A. Alijah and J. R. Mohallem,
J. Chem. Phys. 137, 164316 (2012).
30. **E1-E2-2012-5 FTS high resolution spectra of 16O₃ in 3500 and 5500 cm⁻¹ regions. First example of new theoretical modelling for a polyad of strongly coupled states**, A. Barbe, M.-R. De Backer, E. Starikova, S.A. Tashkun, X. Thomas, Vl.G. Tyuterev,
J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer, 113, 829-839 (2012).
31. **E1-2012-6 Predissociation and spectroscopy of the 3A₂(000) state of 18O₃ from CRDS spectra of the 3A₂(000) -> X1A₁(110) hot band near 7900 cm⁻¹,**
D. Mondelain, R. Jost, S. Kass, R.H. Judge, Vl.G. Tyuterev , and A. Campargue,
J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer, 113, 840-849 (2012).
32. **E1-E2-2012-1 Detection and analysis of four new bands in CRDS ¹⁶O₃ spectra between 7300 and 7600 cm⁻¹.**
M.R. De Backer, A. Barbe, E. Starikova, V.G. Tyuterev, S. Kass, A. Campargue.
Journal of Molecular Spectroscopy 272, pp 43-50 (2012).
<http://dx.doi.org/10.1016/j.jms.2012.01.001>
33. **E1-E2-2012-8-2 Analysis of the CRDS spectrum of ¹⁸O₃ between 6950 and 7125 cm⁻¹**
E. Starikova, A. Barbe, M.-R. De Backer-Barilly, V. Tyuterev, D. Mondelain, S. Kass, A. Campargue.
Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer 113 (14), pp 1741-1752 (2012).
<http://dx.doi.org/10.1016/j.jqsrt.2012.04.023>

34. **E1-2012-9 Rotational and vibrational energy levels of methyl fluoride calculated from a new potential energy surface**
V. Nikitin, M. Rey and V. G. Tyuterev,
J.Mol.Spectroscopy, 274 , 28 (2012).
35. **E1-2012-10 Complete nuclear motion Hamiltonian in the irreducible normal mode tensor operator formalism for the methane molecule**
M. Rey, A. V. Nikitin and V. G. Tyuterev,
J. Chem. Phys., 136, 244106 (2012).
36. **E1-2012-11 Extension of the MIRS computer package for the modeling of molecular spectra: From effective to full ab initio ro-vibrational Hamiltonians in irreducible tensor form**
A.V. Nikitin, M. Rey, J.P. Champion, Vl.G. Tyuterev,
J.Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer, 113, 1034-1042 (2012).
37. **E1-2012-12 Ab initio effective rotational Hamiltonians: a comparative study**
P. Cassam-Chenai, Y. Bouret, M. Rey, S. A. Tashkun, A. V. Nikitin and Vl. G. Tyuterev,
Int J. Quant. Chem., 112, 2201-2220 (2012).
38. **E1-2012-13 Applications of a new methane linelist to the modeling of Titan's spectrum in the 1.58 micron window**
C. De Bergh, R.Courtin, B.Bézar, A. Coustenis, E.Lellouch, M.Hirtzig, P.Drossart, A. Campargue, Samir Kassi, L. Wang, V. Boudon, A. Nikitin, Vl.G. Tyuterev,
Planetary and Space Science, 61, 85-98 (2012).
39. **E1-2012-14 Structure and stability of charged clusters**
M. A. Miller, D. A. Bonhommeau, C. J. Heard, Y. Shin, R. Spezia, and M.-P. Gaigeot,
J. Phys.: Condens. Matter 24, 284130 (2012).
40. **E1-2012-15 Charge localization in multiply charged clusters and their electrical properties: Some insights into electrospray droplets**
D. A. Bonhommeau, R. Spezia, and M.-P. Gaigeot,
J. Chem. Phys. 136, 184503 (2012).
41. **E2-2012-2 Stark spectrum simulation for X₂Y₄ molecules: Application to the ν_{12} band of ethylene in a high-silica zeolite.**
M. Sanzharov, M. Rotger, M. Loëte, V. Boudon, N. Zvereva-Loëte, A. Ballandras, G. Weber.
Journal of Chemical Physics 136 (13), pp 134314 (2012).
<http://dx.doi.org/10.1063/1.3700342>
42. **E2-2012-3 Fourier transform measurements of H₂¹⁸O and HD¹⁸O in the spectral range 1000-2300 cm⁻¹.**
C. Oudot, L. Régalia, S. Mikhailenko, X. Thomas, P. Von der Heyden, D. Décatore.
Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer 113, pp 859-869 (2012).
<http://dx.doi.org/10.1016/j.jqsrt.2012.03.012>
43. **E3-E6-2012-1 Self-induced pressure shift and temperature dependence measurements of CO₂ at 2.05 micron with a tunable diode laser spectrometer**
J.S. Li, G. Durry, J. Cousin, L. Joly, B. Parvitte, V. Zéninari
Spectrochimica Acta Part A, 85, pp. 74-78 (2012)
<http://dx.doi.org/10.1016/j.saa.2011.09.016>
44. **E3-E5-2012-2-1 Unraveling the evolving nature of gaseous and dissolved carbon dioxide in champagne wines: A state-of-the-art review, from the bottle to the tasting glass**
G. Liger-Belair, G. Polidori, V. Zéninari
Analytica Chimica Acta, 732, pp. 1-15 (2012)
<http://dx.doi.org/10.1016/j.aca.2011.10.007>
45. **E3-E6-2012-3-11 Wavelet denoising for infrared laser spectroscopy and gas detection**
Mappe-Fogaing, L. Joly, N. Dumelie, J.S. Li, G. Durry, B. Parvitte, V. Zéninari
Applied Spectroscopy, 66, 6, pp. 700-710 (2012)
<http://dx.doi.org/10.1366/11-06459>

46. **E3-E6-2012-4 Carbon dioxide and ethanol release from champagne glasses under standard tasting conditions**
G. Liger-Belair, F. Beaumont, M. Bourget, H. Pron, B. Parvitte, V. Zéninari, G. Polidori, C. Cilindre
Advances in Food and Nutrition Research, **67**, pp. 289-340 (2012)
<http://dx.doi.org/10.1016/B978-0-12-394598-3.00007-1>
47. **E4-2012-1 Gas phase UV absorption cross-sections for a serie of hydroxycarbonyls**
L. Messadia, G. El Dib, A. Ferhati, E. Roth and A. Chakir. *Chem. Phys. Lett.* 529 (2012) 16-22
48. **E4-2012-2 Electrochemical degradation of buprofezin insecticide in aqueous solutions by anodic oxidation at Boron-Doped Diamond electrode.**
Mohamed Errami, Rachid Salghi, Mohammed Zougagh, Abdelkader Zarrouk, El Houcine Bazzi, Abdelkhaleq Chakir, Hassan Zarrouk, Belkheir Hammouti, Lahcen Bazzi. *Research on Chemical Intermediates*. (2012)
DOI 10.1007/s11164-012-0574-1.
49. **E4-2012-3 Electrochemical combustion of insecticides endosulfan and deltamethrin in aqueous medium using a boron-doped diamond anode.**
M. Errami, R. Salghi, A. Zarrouk, A. Chakir, S. S. Al-Deyab, B. Hammouti, L. Bazzi, H. Zarrok. *Int. J. Electrochem. Sci.* 7 (2012) 4272 - 4285.
50. **E4-2012-4 Electrochemical Degradation of Cypermethrin Pesticide on a SnO₂ Anode.**
H. Bouya, M. Errami, R. Salghi, Lh.Bazzi, A. Zarrouk, S.S. Al-Deyab, B. Hammouti, L. Bazzi, A.Chakir. *Int. J. Electrochem. Sci.* 7 (2012) 3453 - 3465.
51. **E4-2012-5 Corrosion Inhibition of Steel in 1 M Hydrochloric Acid Medium by Chamomile Essential Oils.**
D. Ben Hmamou, R. Salghi, A. Zarrouk, B. Hammouti, S.S. Al-Deyab, Lh. Bazzi, H. Zarrok, A. Chakir, L. Bammou. *Int. J. Electrochem. Sci.* Sous press 2012. *Int. J. Electrochem. Sci.*, 7 (2012) 2361 - 2373
52. **E5-2012-2 The physics behind the fizz in champagne and sparkling wines, Liger-Belair G (2012) Eur. Phys. J. Special Topics 201, 1-88.**
53. **E5-2012-3 Monitoring gaseous CO₂ and ethanol above champagne glasses: flute versus coupe, and the role of temperature, Liger-Belair G, Bourget M, Pron H, Polidori G, Cilindre C (2012) PLoSONE 7 (2), e30628.**
54. **E5-2012-4 Dissolved organic matter in sea spray: A transfer study from marine surface water to aerosols, Schmitt-Kopplin P, Liger-Belair G, Koch BP, Flerus R, Kattner G, Harir M, Kanawati B, Lucio M, Tziotis D, Hertkorn N, Gebefügi I (2012) Biogeosciences 9, 1571-1582.**
55. **E5-2012-5 Metabolomics reveals simultaneous influences of plant defence system and fungal growth in Botrytis cinerea-infected Vitis vinifera cv. Chardonnay berries, Hong YS, Martinez A, Liger-Belair G, Jeandet P, Nuzillard JM, Cilindre C (2012) J. Exp. Botany 63, 5773- 5785.**
56. **E5-2012-6 More on the losses of dissolved CO₂ during champagne serving: Toward a multiparameter modelling, Liger-Belair G, Parmentier M, Cilindre C (2012) J. Agric. Food Chem. 60, 11777-11786.**
57. **E5-2012-7 Revealing ascending bubble-driven flow patterns in a laser-etched champagne glass by means of particle image velocimetry (PIV), Beaumont F, Popa C, Liger-Belair G, Polidori G (2012) Journal of Flow Visualization & Image Processing, 19, 279-289.**
58. **E6-2012-1 Optical constants of Titan's stratospheric aerosols in the 70-1500 cm⁻¹ spectral range constrained by Cassini/CIRS observations, Vinatier S., Rannou P., Anderson C., M., Bézard B., de Kok R. and Samuelson R., Icarus, Volume 219, Issue 1, 5-12, (2012)**
59. **E6-2012-2 Cloud and haze in the winter polar region of Titan observed with VIMS onboard Cassini, Rannou P., Le Mouélic S., Sotin, C. and Brown, R.H., The Astrophysical Journal, 748-4, (2012).**
60. **E6-2012-3 Titan Global Climate Model : a new 3-dimensional version of the IPSL Titan GCM, Lebonnois S., Burgalat J., Rannou P. and Charnay B., Icarus, 218, 707-722, (2012).**

61. **E6-E1-2012-4 Applications of a new set of methane line parameters to the modeling of Titan's spectrum in the 1.58-micron window**, De Bergh C., R. Courtin, B. Bézard A. Coustenis E. Lellouch M. Hirtzig, P. Drossart, A. Campargue, S. Kassi, L. Wang, V. Boudon, A. Nikitin, V. Tyuterev and P. Rannou Planetary and Space Science 61, 85-98,(2012).
62. **E6-2012-5 Titan's lakes chemical composition : sources of uncertainties and variability**, Cordier, D., Mousis, O., Lunine, J.I., Lebonnois, S., Rannou, P., Lavvas, P., Lobo, L.Q., and Ferreire, A.G.L., Planetary and Space Science 61, 99-107, (2012).
63. **E6-2012-6 Dissipation of Titan's North Polar Cloud at Northern Spring Equinox**, Le Mouélic, S., Rannou, P., Rodriguez, S., Sotin, C., Griffith, C., Le Corre, L., Barnes, J., Brown, R.H., Baines, K.H., Buratti, B., Clark, R.N., Nicholson, P.D. and , G., Planetary and Space Science, 60, Issue 1, p. 86-92 (2012).
64. **E6-2012-7 Rapid association reactions at low pressure: impact on the formation of hydrocarbons on Titan**, Vuitton, V., Yelle, R.V., Lavvas, P., Klippenstein S., Ap.J., 744, 11, (2012).
65. **E6-2012-8 Thermal and chemical structure variations in Titan's stratosphere during the Cassini mission**, Bampasidis, G., Coustenis, A., Achterberg, R.K., Vinatier, S., Lavvas, P., Nixon, C.A., Jennings, D.E., Teanby, N.A., Flasar, F.M., Carlson, R.C., Moussas, X., Preka-Papadema, P., Romani, P.N., Guandique, E.A., Stamogiorgos,S,.. Ap.J., 760, 144, (2012).
66. **E6-2012-9 Critical review of N, N+, N2+, N++ and N2++ main production processes and reactions of relevance to Titan's atmosphere**, O. Dutuit, N. Carrasco, R. Thissen, V. Vuitton, C. Alcaraz, P. Pernot, N. Balucani, P. Casavecchia, A. Canosa, S. Le Picard, J.- C. Loison, Z. Herman, J. Zabka, D. Ascenzi, P. Tosi, P. Franceschi, S. D. Price, P. Lavvas, Astrophysical Journal Supplement Series, 204, 20 (2012).
67. **E6-2012-10 A Singular Value Decomposition approach for the retrieval of N2O concentrations and fluxes by quantum cascade laser absorption spectroscopy**, I. Mape-Fogaing, L. Joly, G. Durry, N. Dumelié, T. Decarpenterie, and J. Cousin, Applied Physics B, 108, pp. 933-943, 2012.
68. "A theoretical study of H-abstraction réactions from CH₃Cl and CH₃Br molecules by ClO and BrO radicals"S. Canneaux, C. Hammaeher, T. Cours, F. Louis, M. Ribaucour, Journal of Physical Chemistry A, V 116, PP 4396-4408, 2012,doi : 10.1021/jp301557c.
69. **E6-2012-12 A lightweight balloonborne laser diode sensor for the in-situ measurement of CO₂ at 2.68 micron in the upper troposphere and the lower stratosphere**, M. Ghysels, G. Durry, N. Amarouche, J. Cousin, L. Joly, E.D. Riviere, and L. Beaumont, Applied Physics B, Vol. 107, pp. 213-220, 2012.

2013

70. **E1-2013-1 Vibrating H₃⁺ in a uniform magnetic field**
H. Medel Cobaxin and A. Alijah,
J. Phys. Chem. A 117, 9871-9881 (2013).
71. **E1- 2013-2 Vibrationally and rotationally nonadiabatic calculations on H₃⁺ using coordinate-dependent vibrational and rotational masses**
L. G. Diniz, J. R. Mohallem, A. Alijah, M. Pavanello, L. Adamowicz, O. L. Polyansky and J. Tennyson,
Phys. Rev. A 88, 032506 (2013).
72. **E1-2013-3 New analytical model for the ozone electronic ground state potential surface and accurate ab initio vibrational predictions at high energy range**
Vl.G. Tyuterev, R.V. Kochanov, S.A. Tashkun, F. Holka, P. Szalay,
J. Chem. Phys, 139, 134307 (2013).
73. **E1-E2-2013-4-1 The CW-CRDS spectra of the ¹⁶O/¹⁸O isotopologues of ozone between 5930 and 6340 cm⁻¹**

- 1-Part 1: $^{16}\text{O}^{16}\text{O}^{18}\text{O}$.
D. Mondelain, A. Campargue, S. Kassi, A. Barbe, E. Starikova, M.R. De Backer, V.G. Tyuterev.
Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer **116**, pp 49-66 (2013).
<http://dx.doi.org/10.1016/j.jqsrt.2012.10.023>
74. **E1-E2-2013-5-2** The CW-CRDS spectra of the $^{16}\text{O}/^{18}\text{O}$ isotopologues of ozone between 5930 and 6340 cm^{-1} . Part 2: $^{16}\text{O}^{18}\text{O}^{16}\text{O}$.
E. Starikova, A. Barbe, D. Mondelain, S. Kassi, A. Campargue, M.R. De Backer, V. Tyuterev.
Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer **119**, pp 104-113 (2013).
<http://dx.doi.org/10.1016/j.jqsrt.2012.12.023>
75. **E1-E2-2013-6-3** The CW-CRDS spectra of the $^{16}\text{O}/^{18}\text{O}$ isotopologues of ozone between 5930 and 6340 cm^{-1} -Part 3: $^{16}\text{O}^{18}\text{O}^{18}\text{O}$ and $^{18}\text{O}^{16}\text{O}^{18}\text{O}$.
M.R. De Backer, A. Barbe, E. Starikova, V. Tyuterev, D. Mondelain, S. Kassi, A. Campargue.
Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer **127**, pp 24-36 (2013).
<http://dx.doi.org/10.1016/j.jqsrt.2013.04.005>
76. **E1-E2-2013-7** The CW-CRDS spectra of the $^{16}\text{O}/^{18}\text{O}$ isotopologues of ozone between 5930 and 6340 cm^{-1} -Part 3: $^{16}\text{O}^{18}\text{O}^{18}\text{O}$ and $^{18}\text{O}^{16}\text{O}^{18}\text{O}$
A.Barbe, S. Mikhailenko, E. Starikova, M.-R. De Backer, Vl. G. Tyuterev, D. Mondelain, S. Kassi, A. Campargue, C. Janssen, S. Tashkun, R. Kochanov, R. Gamache, and J. Orphal,
Chem. Phys. Lett. , 565, 5-11 (2013).
77. **E1-2013-8** New dipole moment surfaces of methane
A.V. Nikitin, M. Rey, Vl.G. Tyuterev,
J.Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer, **127**, 24-36 (2013).
78. **E1-2013-9** First-principles intensity calculations for the methane rovibrational spectra in the infrared up to 9300 cm^{-1} .
Rey M.; Nikitin, A. V., Tyuterev Vl. G.,
Phys. Chem. Chem. Phys., **15**, 10049-10061 (2013).
79. **E1-2013-10** Predictions for methane spectra from potential energy and dipole moment surfaces: isotopic shifts and comparative study of $^{13}\text{CH}_4$ and $^{12}\text{CH}_4$
Rey M.; Nikitin, A. V.; Tyuterev, Vl. G
J.Mol.Spectroscopy, **291**, 85-97 (2013).
80. **E1-2013-11** Accurate spectroscopic models for methane polyads derived from a potential energy surface using high-order Contact Transformations
Vl.G. Tyuterev, S.A. Tashkun, M. Rey, R.V. Kochanov, A.V. Nikitin. , T.Delahaye
J. Phys. Chem. A., **117**, 13779-13805 (2013).
81. **E1-E2-2013-12-4** New assignments in the 2 μm transparency window of the $^{12}\text{CH}_4$ Octad band system.
L. Daumont, A.V. Nikitin, X. Thomas, L. Régalia, P. Von der Heyden, V. Tyuterev, M. Rey, V. Boudon, C. Wenger, M. Loëte, L.R. Brown.
Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer **116**, pp 101-109 (2013).
<http://dx.doi.org/10.1016/j.jqsrt.2012.08.025>
82. **E1-E2-2013-13-5** Methane line parameters in the HITRAN2012 database.
L.R. Brown, K. Sung, D.C. Benner, V.M. Devi, V. Boudon, T. Gabard, C. Wenger, A. Campargue, O. Leshchishina, S. Kassi, D. Mondelain, L. Wang, L. Daumont, L. Régalia, M. Rey, X. Thomas, V.G. Tyuterev, O.M. Lyulin, A.V. Nikitin, H.M. Niederer, S. Albert, S. Bauerecker, M. Quack, J.J. O'Brien, I.E. Gordon, L.S. Rothman, H. Sasada, A. Coustenis, M.A.H. Smith, T. Carrington, X.G. Wang, A.W. Mantz, P.T. Spickler.
Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer **130**, pp 201-219 (2013).
<http://dx.doi.org/10.1016/j.jqsrt.2013.06.020>
83. **E1-2013-14** Preliminary modeling of CH_3D from 4000 to 4550 cm^{-1}
A.V. Nikitin, L.R. Brown, K. Sung, M. Rey, Vl.G. Tyuterev, M.A.H. Smith, A.W. Mantz,
J.Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer, **114**, 1-12 (2013).
84. **E1-E6-2013-1-15** Titan's surface and atmosphere from Cassini/VIMS data with updated methane opacity,
Hirtzig, M., Bézard, B., Lellouch, E., Coustenis, A., de Bergh, C., Drossart, P., Campargue, A., Boudon, V., Tyuterev, V., Rannou, P., Cours, T., Kassi, S., Nikitin, A., Mondelain, D., Rodriguez, S., and Le Mouélic, S.
Icarus, Volume 226, 470-486, (2013)

85. **E1-E2-2013-16-6 The HITRAN2012 molecular spectroscopic database.**
L.S. Rothman, I.E. Gordon, Y. Babikov, A. Barbe, D. Chris Benner, P.F. Bernath, M. Birk, L. Bizzocchi, V. Boudon, L.R. Brown, A. Campargue, K. Chance, E.A. Cohen, L.H. Coudert, V.M. Devi, B.J. Drouin, A. Fayt, J.-M. Flaud, R.R. Gamache, J.J. Harrison, J.-M. Hartmann, C. Hill, J.T. Hodges, D. Jacquemart, A. Jolly, J. Lamouroux, R.J. Le Roy, G. Li, D.A. Long, O.M. Lyulin, C.J. Mackie, S.T. Massie, S. Mikhailenko, H.S.P. Müller, O.V. Naumenko, A.V. Nikitin, J. Orphal, V. Perevalov, A. Perrin, E.R. Polovtseva, C. Richard, M.A.H. Smith, E. Starikova, K. Sung, S. Tashkun, J. Tennyson, G.C. Toon, V. Tyuterev, Wagner, G.
Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer **130**, pp 4-50 (2013).
<http://dx.doi.org/10.1016/j.jqsrt.2013.07.002>
86. **E1-E2-2013-7 MeCaSDa and ECaSDa: Methane and ethene calculated spectroscopic databases for the virtual atomic and molecular data centre.**
Y.A. Ba, C. Wenger, R. Surleau, V. Boudon, M. Rotger, L. Daumont, D.A. Bonhommeau, V.G. Tyuterev, M.L. Dubernet
Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer **130**, pp 62-68 (2013).
<http://dx.doi.org/10.1016/j.jqsrt.2013.05.001>
87. **E1-2013-18 MCMC2: A Monte Carlo code for multiply charged clusters**
D. A. Bonhommeau and M.-P. Gaigeot,
Comput. Phys. Commun. **184**, 873-884 (2013).
88. **E2-2013-8 High-resolution stimulated Raman spectroscopy and analysis of the ν_1/ν_5 (C-H) stretching dyad of C₂H₄**
H. Aouididi, M. Rotger, D. Bermejo, R.Z. Martínez, V. Boudon
Journal of Raman Spectroscopy **44**, pp 590-596 (2013).
<http://dx.doi.org/10.1002/jrs.4224>
89. **E2-2013-9 High-resolution stimulated Raman spectroscopy and analysis of the ν_2 and ν_3 bands of C₂H₄.**
A. Ballandras, M. Cirtog, M.A. Loroño, M.T. Bourgeois, M. Rotger, D. Bermejo, R.Z. Martínez, J.L. Doménech, V. Boudon
Journal of Raman Spectroscopy **44**, pp 1033-1038 (2013).
<http://dx.doi.org/10.1002/jrs.4328>
90. **E2-E1-2013-10 Ozone spectroscopy in the electronic ground state: High-resolution spectra analyses and update of line parameters since 2003.**
A. Barbe, S. Mikhailenko, E. Starikova, M.R. De Backer, V. Tyuterev, D. Mondelain, S. Kassi, A. Campargue, C. Janssen, S. Tashkun, R. Kochanov, R. Gamache, J. Orphal.
Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer **130**, pp 172-190 (2013).
<http://dx.doi.org/10.1016/j.jqsrt.2013.06.007>
91. **E2-2013-11 IUPAC critical evaluation of the rotational-vibrational spectra of water vapor, Part III: Energy levels and transition wavenumbers for H₂¹⁶O.**
J. Tennyson, P.F. Bernath, L.R. Brown, A. Campargue, A.G. Császár, L. Daumont, R.R. Gamache, J.T. Hodges, O.V. Naumenko, O.L. Polyansky, L.S. Rothman, A.C. Vandaele, N.F. Zobov, A.R. Al Derzi, C. Fábri, A.Z. Fazliev, T. Furtenbacher, I.E. Gordon, L. Lodi, I.I. Mizus.
Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer **117**, pp 29-58 (2013).
<http://dx.doi.org/10.1016/j.jqsrt.2012.10.002>
92. **E2-2013-12 Preface to the HITRAN 2012 special issue.**
I.E. Gordon, M. Rotger, J. Tennyson.
Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer **130**, pp 1-3 (2013).
<http://dx.doi.org/10.1016/j.jqsrt.2013.07.007>
93. **E3-2013-1 Quantitative simulation of photoacoustic signals using finite element modelling software**
B. Parvitte, C. Risser, R. Vallon, V. Zéninari
Applied Physics B, **111**, 3, pp. 383-389 (2013)
<http://dx.doi.org/10.1007/s00340-013-5344-2>
94. **E3-E6-2013-2-10 Photoacoustic gas sensing with a commercial external-cavity quantum cascade laser at 10.5 μ m**

- D. Mammez, C. Stoeffler, J. Cousin, R. Vallon, M.-H. Mammez, L. Joly, B. Parvitte, V. Zéninari
Infrared Physics and Technology, **61**, pp. 14-19 (2013)
<http://dx.doi.org/10.1016/j.infrared.2013.07.002>
95. **E3-2013-3 A coupled model for the simulation of miniaturised and integrated photoacoustic gas detector**,
A.Glière, J. Rouxel, B. Parvitte, S. Boutami, V. Zéninari
International Journal of Thermophysics, **34**, 11, pp. 2119-2135 (2013)
<http://dx.doi.org/10.1007/s10765-013-1534-8>
96. **E4-E6-2013-1-2 Kinetic study of the reaction of chlorine atoms with hydroxyacetone in gas-phase**.
Clara Stoeffler, Lilian Joly, Georges Durry, Julien Cousin, Nicolas Dumelié, Aurélien Bruyant, Estelle Roth, Abdelkhaleq Chakir. Chemical Physics Letters 590 (2013) 221-226.
97. **E4-2013-2 Antifungal Activity and Anti-Corrosion Inhibition of *Origanum Compactum* Extracts**.
F. Fadel1, D. Ben Hmamou, R. Salghi, B. Chebli1, O. Benali, A. Zarrouk, E. E. Ebenso, A. Chakir, B. Hammouti. Int. J. Electrochem. Sci., Vol. 8, (2013) 11019-11032
98. **E4-2013-3 Gas-phase rate coefficients for reaction of 3-hydroxy-2-butanone and 4-hydroxy-2-butanone with OH and Cl**.
Messaadia, L.; El Dib, G.; Lendar, M.; Cazaunau, M.; Roth, E.; Ferhati, A.; Mellouki, A.; Chakir, A.
Atmospheric Environment 77 (2013) 951 -958
99. **E4-2013-4 Heterogeneous ozonolysis of folpet and dimethomorph : A kinetic study**.
M. El Rachidi, A. Chakir, E. Roth. J. phys. Chem. A 2013, 117, 2908–2915
100. **E4-2013-5 Electrochemical Oxidation of 2-Nitrobenzaldehyde on Boron-Doped Diamond Anodes**.
H. Bouya, M. Errami, R. Salghi, Eno E. Ebenso, A. Zarrouk, A. Chakir, B. Hammouti. Int. J. Electrochem. Sci., 8 (2013).
101. **E4-2013-6 First absolute experimental determination using vapour pressure measurements of 4H2B in the range 254 - 323 K**.
G. El Dib, C. Sleiman, A. Canosa, D. Travers, T. Sawaya, I. Mokbel, A. Chakir J. Phys Chem A 2013, 117 (1), pp 117-125.
102. **E4-E6-2013-7-14 QCLAS, a quantum quantum cascade laser absorption spectrometer devoted to**
Mappé, L. Joly, G. Durry, X. Thomas, T. Decarpenterie, J. Cousin, N. Dumelié, E. Roth, A. Chakir, and P. G. Grillon Review of Scientific Instruments, Review of Scientific Instruments, **84**, 023103, 2013, doi: 10.1063/1.4790376.
103. **E4-2013-8 Electrochemical degradation of buprofezin insecticide in aqueous solutions by anodic oxidation at boron-doped diamond electrode**.
Mohamed Errami, Rachid Salghi, Mohammed Zougagh, Abdelkader Zarrouk, El Houcine Bazzi, Abdelkhaleq Chakir, Hassan Zarrouk, Belkheir Hammouti, Lahcen Bazzi. Res Chem Intermed (2013) 39:505-516 DOI 10.1007/s11164-012-0574-1
104. **E4-2013-9 Pesticide Residue Levels in Peppers cultivated in Souss Massa Valley (Morocco) after Multiple Applications of Azoxystrobin and Chlorothalonil**.
O. Id El Mouden, R. Salghi, M. Zougagh, A. Chakir, M. El Rachidi, Lh. Bazzi, A. Hormatallah. International Journal of Environmental Analytical Chemistry. 93(5) (2013) 499-510.
105. **E5-2013-1 Champagne cork popping revisited through high-speed infrared imaging: The role temperature**, Liger-Belair G, Bourget M, Cilindre C, Pron H, Polidori G (2013) J. Food Engineering 116, 78-85.
106. **E5-2013-2 Unraveling the release of gaseous CO₂ during champagne serving through high-speed infrared imaging**, Bourget M, Liger-Belair G, Pron H, Polidori G (2013) J. of Visualization, 16, 47-52.
107. **E5-2013-3 Temperature dependence of ascending bubble-driven flow patterns found in champagne glasses, as determined through numerical modelling**, Beaumont F, Popa C, Liger-Belair G, Polidori G (2013) Advances in Mechanical Engineering, ID 156430.

108. **E5-2013-4 Enzymatic hydrolysis of thermo-sensitive grape proteins by a yeast protease as revealed by a proteomic approach**, Younes B, Cilindre C, Jeandet P, Vasserot Y (2013) Food Res. Int., 54, 1298-1301.
109. **E5-2013-5 Monitoring the losses of dissolved carbon dioxide from laser-etched champagne glasses**, Liger-Belair G, Conreux A, Villaume S, Cilindre C (2013) Food Res. Int., 54, 516-522.
110. **E6-2013-3 On the thermal electron balance in Titan's sunlit upper atmosphere**, Vigren, E.S., Galand, M., Yelle, R.V., Cui, J., Wahlund, J.E., Agren, K., Lavvas, P., Mueller-Wodarg, I.C.F., Strobel, D.F., Icarus, 223, 234-251, (2013)
111. **E6-2013-4 The escape of heavy atoms from the ionosphere of HD209458b. I. A photochemical-dynamical model of the thermosphere**, Koskinen, T. T., Harris, M. J., Yelle, R. V., Lavvas, P., Icarus, doi/10.1016/j.icarus.2012.09.027, (2013)
112. **E6-2013-5 The escape of heavy atoms from the ionosphere of HD209458b. II. Interpretation of the observations**, Koskinen, T. T., Yelle, R. V., Harris, M. J., Lavvas, P., Icarus, doi/10.1016/j.icarus.2012.09.026 (2013)
113. **E6-2013-6 Aerosol growth in Titan's ionosphere**, Lavvas, P., Yelle, R.V., Koskinen, T., Bazin, A., Vuitton, V., Vigren, E., Galand, M., Wellbrock, A., Coates, A.J., Wahlund, J.-E., Cray, F.J., Snowden, D., PNAS, doi/10.1073/pnas.1217059110, (2013)
114. **E6-2013-7 Auroral electron precipitation and flux tube erosion in Titan's upper atmosphere**, Snowden, D., Yelle, R. V., Galand, M., Coates, A. J., Wellbrock, A., Jones, G. H., Lavvas, P., Icarus, 226, 186-204, (2013).
115. **E6-2013-8 Evolution of the stratospheric temperature and chemical composition over one Titanian year**, Coustenis, A., Bambasidis, G., Achtenberg, R.K., Lavvas, P., Jennings, D.E., Nixon, C.A., Teanby, N.A., Vinatier, S., Flasar, F.M., Carlson, R.C., Orton, G., Romani, P.N., Guandique, E.A., Stamogiorgos, S., . Ap.J, 79, 177, 9. (2013).
116. **E6-2013-9 Characterization of the stray light in a space borne atmospheric AOTF spectrometer**, O. Korablev, A. Fedorova, E. Villard, L. Joly, A. Kiselev, D. Belyaev, and J.-L. Bertaux, Optics Express, Vol. 21, Issue 15, pp. 18354-18360, 2013.
117. **E6-2013-11 A complete climatology of the aerosol vertical distribution on Mars from MEx/SPICAM UV solar occultations**, A. Maattanen, C. Listowski, F. Montmessin, L. Maltagliati, A. Reberac, L. Joly, J.-L. Bertaux, Icarus, Vol. 223, pp. 892-941, 2013.
118. **E6-2013-13 Balloon-borne observations of mid-latitude stratospheric water vapour at two launching sites: comparisons with HALOE and MLS satellite data**, G. Berthet, J-B. Renard, M. Ghysels, G. Durry, B. Gaubicher, N. Amarouche, Journal of Atmospheric Chemistry, 70, pp.197-219, 2013.
119. **E6-2013-15 Pressure-broadening and narrowing coefficients and temperature dependence measurements of CO₂ at 2.68 micron by laser diode absorption spectroscopy for atmospheric applications**, M. Ghysels, G. Durry, N. Amarouche, Spectrochimica Acta Part A, 107, pp. 55-61, 2013.
120. **E6, A theoretical study of H- and I-abstraction reactions from CH₃I molecule by I (2P_{3/2}) atom and IO radical"**, Th. Cours, S. Canneaux, C. Hammaeher et M. Ribaucour, Computational and Theoretical Chemistry 1012, pp 72-83, 2013.

121. **E1-2014-1 Renner-Teller effects observed in the emission spectra of H₂S, and in related photoelectron and photofragment spectra**
G. Duxbury, Ch. Jungen, A. Alijah, J. Maier and D. Klapstein,
Molec. Phys., 112, 3072-3084 (2014).
122. **E1-2014-2 Approximate quantum electrodynamics potential energy surface correction for H₃⁺**
L. Lodi, O. L. Polyansky, J. Tennyson, A. Alijah and N. F. Zobov,
Phys. Rev. A 89, 032505 (2014).
123. **E1-E2-2014-3-1 Analyses of FT spectra of C_{2v} ozone isotopologues in the 4500-5700 cm⁻¹ region: ¹⁶O¹⁸O¹⁶O, ¹⁸O¹⁶O¹⁸O and ¹⁸O₃.**, A. Barbe, M.R. De Backer, E. Starikova, X. Thomas, V. Tyuterev.
Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer 149, pp 51-63 (2014).
<http://dx.doi.org/10.1016/j.jqsrt.2014.07.018>
124. **E1-E2-2014-4-2 Three new bands of ¹⁸O¹⁶O¹⁸O by CW-CRDS between 6340 and 6800 cm⁻¹.**
E. Starikova, A. Barbe, M.R. De Backer, V.G. Tyuterev, D. Mondelain, S. Kassi, A. Campargue.
Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer 149, pp 211-218 (2014).
<http://dx.doi.org/10.1016/j.jqsrt.2014.08.011>
125. **E1-E2-2014-5-3 S&MPO - An information system for ozone spectroscopy on the WEB.**
Y.L. Babikov, S.N. Mikhailenko, A. Barbe, V.G. Tyuterev.
Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer 145, pp 169-196 (2014).
<http://dx.doi.org/10.1016/j.jqsrt.2014.04.024>
126. **E1-E2-2014-6-4 Does the "reef structure" at the ozone transition state towards the dissociation exist? New insight from calculations and ultrasensitive spectroscopy experiments.**
V.G. Tyuterev, R. Kochanov, A. Campargue, S. Kassi, D. Mondelain, A. Barbe, E. Starikova, M.R. De Backer, P.G. Szalay, S. Tashkun.
Physical Review Letters 113 (14), pp 143002 (2014).
<http://dx.doi.org/10.1103/PhysRevLett.113.143002>
127. **E1-2014-7 High order dipole moment surfaces of PH₃ and ab initio intensity predictions in the Octad range**
A.V. Nikitin, M. Rey and Vl. G. Tyuterev,
J. Mol. Spectroscopy, 305, 40-47 (2014).
128. **E1-2014-8 A new accurate ground-state potential energy surface of ethylene and predictions for rotational and vibrational energy levels**
T. Delahaye, A. Nikitin, M. Rey, P. G. Szalay and Vl.G. Tyuterev,
J. Chem. Phys., 141, 104301 (2014).
129. **E1-2014-9 Accurate First-principles calculations for 12CH₃D infrared spectra from isotopic and symmetry transformations.**
M. Rey, A.V. Nikitin and Vl. G. Tyuterev,
J. Chem. Phys., 141 (2014) 044306.
130. **E1-2014-10 Theoretical hot methane line list up to 2000 K,**
M. Rey, A.V. Nikitin and Vl. G. Tyuterev,
Astrophysical Journal, 789 (2014) 2.
131. **E1-E2-2014-11-5 Measurements and modeling of long-path ¹²CH₄ spectra in the 4800-5300 cm⁻¹ region.**
A.V. Nikitin, X. Thomas, L. Régalia, L. Daumont, M. Rey, S.A. Tashkun, V. Tyuterev, L.R. Brown.
Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer 138, pp 116-123 (2014).
<http://dx.doi.org/10.1016/j.jqsrt.2014.02.005>
132. **E1-2014-12 MDMC2: A molecular dynamics code for investigating the fragmentation dynamics of multiply charged clusters,**
D. A. Bonhommeau and M.-P. Gaigeot,
Comput. Phys. Comm. 185, 684-694 (2014).
133. **E1-2014-13 MCMC2 (version 1.1): A Monte Carlo code for multiply charged clusters,**
D. A. Bonhommeau, M. Lewerenz, and M.-P. Gaigeot,
Comput. Phys. Commun. 185, 1188-1191 (2014).

134. **E1-E5-2014-14-1** CO₂ diffusion in Champagne wines : A molecular dynamics study, Perret A, Bonhommeau D, Liger-Belair G, Cours T, Alijah A (2014) J. Phys. Chem. B, 118, 1839-1847.
135. **E1-E5-2014-15-6** Unveiling the interplay between diffusing CO₂ and ethanol molecules in Champagne wines by classical molecular dynamics and ¹³C-NMR spectroscopy, Bonhommeau D, Perret A, Nuzillard JM, Cilindre C, Cours T, Alijah A, Liger-Belair G (2014) J. Phys. Chem. Lett., 5, 4232-4237. *Cet article a été sélectionné par l'ACS editor's choice.* <http://pubs.acs.org/doi/pdf/10.1021/jz502025e>
136. **E2-2014-6** Water vapor line parameters from 6450 to 9400 cm⁻¹.
L. Régalia, C. Oudot, S. Mikhailenko, L. Wang, X. Thomas, A. Jenouvrier, P. Von der Heyden.
Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer **136**, pp 119-136 (2014).
<http://dx.doi.org/10.1016/j.jqsrt.2013.11.019>
137. **E2-2014-7** A database of water transitions from experiment and theory (IUPAC technical report).
J. Tennyson, P.F. Bernath, L.R. Brown, A. Campargue, A.G. Császár, L. Daumont, R.R. Gamache, J.T. Hodges, O.V. Naumenko, O.L. Polyansky, L.S. Rothman, A.C. Vandaele, N.F. Zobov.
Pure and Applied Chemistry **86**, pp 71-83 (2014).
<http://dx.doi.org/10.1515/pac-2014-5012>
138. **E2-2014-8** IUPAC critical evaluation of the rotational-vibrational spectra of water vapor. Part IV. Energy levels and transition wavenumbers for D₂¹⁶O, D₂¹⁷O, and D₂¹⁸O.
J. Tennyson, P.F. Bernath, L.R. Brown, A. Campargue, A.G. Császár, L. Daumont, R.R. Gamache, J.T. Hodges, O.V. Naumenko, O.L. Polyansky, L.S. Rothman, A.C. Vandaele, N.F. Zobov, N. Dénes, A.Z. Fazliev, T. Furtenbacher, I.E. Gordon, S.M. Hu, T. Szidarovszky, I.A. Vasilenko.
Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer **142**, pp 93-108 (2014).
<http://dx.doi.org/10.1016/j.jqsrt.2014.03.019>
139. **E2-2014-9** Recommended isolated-line profile for representing high-resolution spectroscopic transitions (IUPAC technical report).
J. Tennyson, P.F. Bernath, A. Campargue, A.G. Császár, L. Daumont, R.R. Gamache, J.T. Hodges, D. Lisak, O.V. Naumenko, L.S. Rothman, H. Tran, J.M. Hartmann, N.F. Zobov, J. Buldyreva, C.D. Boone, M.D. De Vizia, L. Gianfrani, R. McPheat, D. Weidmann, J. Murray, N.H. Ngo, O.L. Polyansky.
Pure and Applied Chemistry **86**, pp 1931-1943 (2014).
<http://dx.doi.org/10.1515/pac-2014-0208>
140. **E2-2014-10** Self-broadening coefficients and improved line intensities for the ν_7 band of ethylene near 10.5 μm , and impact on ethylene retrievals from Jungfrau-joch solar spectra.
J. Vander Auwera, A. Fayt, M. Tudorie, M. Rotger, V. Boudon, B. Franco, E. Mahieu.
Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer **148**, pp 177-185 (2014).
<http://dx.doi.org/10.1016/j.jqsrt.2014.07.003>
141. **E3-2014-1** Challenges in the Design and Fabrication of a Lab-on-a-Chip Photoacoustic Gas Sensor
A.Glière, J. Rouxel, M. Brun, B. Parvitte, V. Zéninari, S. Nicoletti
Sensors, **14**, 1, pp. 957-974 (2014)
<http://dx.doi.org/10.3390/s140100957>
142. **E3-2014-2** Development of an external-cavity quantum cascade laser spectrometer at 7.5 μm and applications to gas detection
D. Mammez, R. Vallon, B. Parvitte, M.-H. Mammez, M. Carras, V. Zéninari
Applied Physics B, **116**, 4, pp. 951-958 (2014)
<http://dx.doi.org/10.1007/s00340-014-5782-5>
143. **E4-2014-1** A mechanistic and kinetic study of the heterogeneous degradation of chlorpyrifos and chlorpyrifos oxon under the influence of atmospheric oxidants: ozone and OH-radicals.
El Masri, M. Al Rashidi, H. Laversin, A. Chakir and E. Roth. RSC Adv. 2014, 4, 24786-24795.
144. **E4-2014-2** Reactivity of 3-hydroxy-3-methyl-2-butanone: Photolysis and OH reaction kinetics
Atmospheric Environment, In Press, Accepted Manuscript, Available online 16 September 2014 H. Bouzidi, H. Laversin, A. Tomas, P. Coddeville, C. Fittschen, G. El Dib, E. Roth, A. Chakir
145. **E4-2014-3** Kinetics and Mechanism of the Tropospheric Reaction of 3-Hydroxy-3-methyl-2-butanone with Cl Atoms.

- C. Sleiman,† G. El Dib, B. Ballesteros, A. Moreno, J. Albaladejo, A. Canosa, and A. Chakir *J. Phys. Chem. A*, 2014, 118 (32), pp 6163-6170.
146. **E4-E6-2014-4 Impact of raw pig slurry and pig farming practices on physico-chemical parameters and on atmospheric N₂O and CH₄ emissions from tropical soils, Uvéa Island (South Pacific)**, E. Roth, P. Gunkel-Grillon, L. Joly, X. Thomas, T. Decarpenterie, I. Mapped-Fogaing, C. Laporte-Magoni, N. Dumelie and G. Durry, *Environmental Science and Pollution Research*, Vol. 21, Issue 17, pp. 10022-10035, 2014.
147. **E4-2014-5 UV spectra and OH-oxidation kinetics of gaseous phase morpholinic compounds.**
M. Al Rashidi, A. El Masri, E. Roth, A. Chakir. *Atmospheric Environment*, Volume 88, May 2014, Pages 261-268
148. **E4-2014-6 Heterogeneous oxidation of folpet and dimethomorph by OH radicals: A kinetic and mechanistic study.**
M. Al Rashidi, A. Chakir, E. Roth, *Atmospheric Environment* 82 (2014) 164 -171
149. **E5-2014-2 How many bubbles in your glass of bubbly?**, Liger-Belair G (2014) *J. Phys. Chem. B*, 118, 3156-3163.
150. **E5-2014-3 Numerical modelling of bubble-driven flow patterns in champagne glasses**, Beaumont F, Popa C, Liger-Belair G, Polidori G (2014) *International Journal of Numerical Methods for Heat and Fluid Flow*, 24, 563-578.
151. **E5-2014-5 It's time to pop a cork on champagne's proteome!**, Cilindre C, Fasoli E, D'Amato A, Liger-Belair G, Righetti PG (2014) *J. Proteomics*, 105, 351-362.
152. **E6-2014-1 Modified lock-in detection for optimized phase-sensitive interferometry, application to near-field nanoscopy** A Al Mohtar, A Bruyant, J. Vaillant, M. Kazan, L. Joly, C. Stoeffler, J. Cousin, A. Khoury, N. Dumelié and R. Deturche. *Optics Express* Vol. 22, Issue 18, pp. 22232-22245 (2014) doi: 10.1364/OE.22.022232
153. **E6-2014-2 Temperature dependences of air-broadening, air-narrowing and line-mixing coefficients of the methane n₃ R(6) manifold lines. Application to in-situ measurements of atmospheric methane**, M. Ghysels, L. Gomez, J. Cousin, H. Tran, N. Amarouche, A. Engel, I. Levin, and G.Durry, *Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer*, Vol.133, pp. 206-216, 2014.
154. **E6-2014-3 West, R.A., A.D. Del Genio, J.M. Barbara, D. Toledo, P. Lavvas, P. Rannou, E.P. Turtle, J. Perry, "Cassini Imaging Observations of Titan's South Polar Cloud", accepté, Icarus, (2014)**
155. **E6-2014-4 Titan's emission processes during eclipse**, Lavvas, P., West, R.A., Gronoff, G. and Rannou, P., *Icarus*, 241, p. 397-408, (2014)
156. **E6-2014-5 Study of Titan annual and diurnal cycles with a description of distributions with moments**, Burgalat, J., Rannou, P. Cours T. and Rivière, E. *Icarus*, *Icarus* 231, 310-322 (2014).
157. **E6-2014-6 Increasing Positive Ion Number Densities below the Peak of Ion-Electron Pair Production in Titan's Ionosphere**, Vigren, E., Galand, M., Shebanits, O., Wahlund, J.-E., Geppert, W.D., Lavvas, P., Vuitton, V., Yelle, R.V., *Ap.J.*, 786, 69,5, (2014).
158. **E6-2014-7 Thermal escape for extrasolar giant planets**, Koskinen, T., Lavvas, P., Harris, M.J., R.V. Yelle, *Phil. Trans. R. Soc. A* 372: 20130089 (2014).
159. **E6-2014-8 Electrons densities and alkali atoms in exoplanet atmospheres**, Lavvas, P., Koskinen, T., Yelle, R.V., *Ap.J.*, 796,15 (2014)
160. **E6-2014-9 Electrodynamics on extrasolar giant planets**, Koskinen, T., Yelle, R.V., Lavvas, P., Cho, J. Y-K., *Ap.J.*,796, 16, (2014).

161. **E6-2014-10 The AquaVIT-1 intercomparison of atmospheric water vapor measurement techniques**, D. W. Fahey, R.-S. Gao, O. Möhler, H. Saathoff, C. Schiller, V. Ebert, M. Krämer, T. Peter, N. Amarouche, L. M. Avallone, R. Bauer, Z. Bozóki, L. E. Christensen, S. M. Davis, G. Durr, C. Dyroff, R. L. Herman, S. Hunsmann, S. M. Khaykin, P. Mackrodt, J. Meyer, J. B. Smith, N. Spelten, R. F. Troy, H. Vömel, S. Wagner, and F. G. Wienhold, Atmos.Meas.Tech., 7, pp.3177-3213, 2014.
162. **E6-2014-12 Long-path averaged mixing ratios of O₃ and NO₂ in the free troposphere from mountain MAX-DOAS**, L. Gomez, M. Navarro-Comas, O. Puentedura, Y. Gonzalez, E. Cuevas, and M. Gil-Ojeda, Atmos. Meas. Tech., 7, 1-14, 2014, doi:10.5194/amt-7-3373-2014

2015

163. **E1-2015-1 H₂⁺ in a weak magnetic field**
H. Medel Cobaxin, A. Alijah, J. C. Lopez-Vieyra and A. V. Turbiner,
J. Phys. B, 48, 045101 (2015).
164. **E1-2015-2 Vibrational states of the triplet electronic state of H₃⁺. The role of non-adiabatic Jahn-teller coupling**
A. Alijah and V. Kokoouline,
Chem. Phys. 460, 43-50 (2015).
165. **E1-2015-3 Connecting a new non-adiabatic vibrational mass to the bonding mechanism of LiH : a quantum superposition of ionic and covalent states**
L. G. Diniz, A. Alijah, L. Adamowicz and J. R. Mohallem,
Chem. Phys. Lett. 633, 89-94 (2015).
166. **E1-2015-4 Quantized non-adiabatic coupling terms of H₃⁺**
A. Alijah, J. Fremont and Vl. G. Tyuterev,
Phys. Rev. A, 92, 012704 (2015).
167. **E1-2015-5 Einstein coefficients for ro-vibrational transitions of the LiH molecule in the electronic ground state**
L. G. Diniz, N. Kirnosov, A. Alijah, J. R. Mohallem and L. Adamowicz,
J. Chem. Phys., submitted.
168. **E1-E2-2015-6 Detection and analysis of three highly excited vibrational bands of ¹⁶O₃ by CW-CRDS near the dissociation threshold**, A. Campargue, S. Kassi, D. Mondelain, A. Barbe, E. Starikova, M.-R. De Backer, Vl. G. Tyuterev,
J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer, 152, 84-93 (2015).
169. **E1-E2-2015-7-1 CRDS detection and modelling of vibrational bands of ¹⁸O₃ approaching the dissociation threshold (7400-7920 cm⁻¹)**.
E. Starikova, D. Mondelain, A. Barbe, V.G. Tyuterev, S. Kassi, A. Campargue.
Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer 161, pp 203-214 (2015).
<http://dx.doi.org/10.1016/j.jqsrt.2015.04.001>
170. **E1-2015-8 Accurate 12D dipole moment surfaces of ethylene**
T. Delahaye, M. Rey, A.V. Nikitin, P. G. Szalay and Vl. G. Tyuterev,
Chem. Phys. Letters, xx (2015) xx, in press.
171. **E1-2015-9 First predictions of rotationally resolved infrared spectra of Di-deuteromethane 12CH₂D₂ from potential energy and dipole moment surfaces**
M. Rey, A.V. Nikitin, Vl. G. Tyuterev,
J. Phys. Chem. A, 119, 4763-4779 (2015).
172. **E1-2015-10 Convergence of normal mode variational calculations of methane spectra: Theoretical linelist in the icosad range computed from potential energy and dipole moment surfaces**
M. Rey, A.V. Nikitin, Vl. G. Tyuterev,
Journal of Quantitative Spectroscopy & Radiative Transfer 164 (2015) 207-220.

173. **E1-2015-11 An efficient method for energy levels calculation using full symmetry and exact kinetic energy operator: tetrahedral molecules**
A.V. Nikitin, M. Rey, Vl. G. Tyuterev,
J.Chem.Physics, 142, 094118. (2015).
174. **E1-2015-12 Application of quasidegenerate perturbation theory to the calculation of rotational energy levels of methane vibrational polyads**
P. Cassam-Chenai, G. Rousseau, A. Ilmane, Y. Bouret and M. Rey,
J. Chem. Phys., 143 (2015) 034107.
175. **E1-2015-13 Strong thermal nonequilibrium in hypersonic CO and CH₄ probed by CRDS**
M. Louviot, N. Suas-David, V. Boudon, R. Georges, M. Rey and S. Kass,
J. Chem. Phys., 142 (2015) 214305.
176. **E1-2015-14 Methane high-temperature partition function from contact transformations and variational calculations**
A.V. Nikitin, B. M. Krishna, M. Rey, S. A. Tashkun, Vl. G. Tyuterev,
J.Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer, in press (2015).
177. **E1-2015-15 Hot water emission spectra: Rotational energy levels of the (000) and (010) states of HD¹⁷O**
G.Ch. Mellau, S.N. Mikhailenko, Vl. G. Tyuterev,
J.Mol.Spectroscopy, v308-309, p6-19 (2015).
178. **E1-2015-16 Dynamics and thermodynamics of decay in charged clusters**
M. A. Miller, D. A. Bonhommeau, C. P. Moerland, S. J. Gray and M.-P. Gaigeot,
Mol. Phys. 113, 2428-2434 (2015).
179. **E1-2015-17 MCMC2 (version 1.1.1): A Monte Carlo code for multiply charged clusters**
D. A. Bonhommeau
Comput. Phys. Commun. 196, 614-616 (2015).
180. **E1-2015-19 Ab initio variational predictions for understanding highly congested spectra: rovibrational assignment of 108 new methane sub-bands in the Icosad range (6280-7800 cm⁻¹),**
M. Rey, A. V. Nikitin, A. Campargue, S. Kassi, D. Mondelain and Vl. G. Tyuterev,
Phys. Chem. Chem. Phys., xx (2016) xx, accepted.
181. **E1-2015-20 Measurements and modeling of cold ¹³CH₄ spectra in the 3750 - 4700 cm⁻¹ region**
L.R. Brown, A.V. Nikitin, K. Sung, M. Rey, S.A. Tashkun, Vl.G. Tyuterev, T.J. Crawford, M.A.H. Smith and A.W. Mantz
J.Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer, accepted (2015).
182. **E1-2015-21 Analyses and modeling of the 12CH₄ spectrum at 80K between 6539 and 6800 cm⁻¹**
A.V. Nikitin, M. Rey, S. A. Tashkun, S. Kassi, D. Mondelain, A. Campargue and Vl. G. Tyuterev
JQSRT, 168 (2016) 207-216.
183. **E1-2015-22 New “TheoReTS” information system for theoretical line lists based on variational predictions from molecular potential energy and dipole moment surfaces**
M. Rey, A.V. Nikitin, Yu.Babikov and Vl. G. Tyuterev
J.Mol.Spectrosc Special Database Issue (2015), to be published.
184. **E2-2015-2 CO₂ line-mixing database and software update and its tests in the 2.1 μm and 4.3 μm regions.**
J. Lamouroux, L. Régalia, X. Thomas, J. Vander Auwera, R.R. Gamache, J.M. Hartmann.
Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer 151, pp 88-96 (2015).
<http://dx.doi.org/10.1016/j.jqsrt.2014.09.017>
185. **E3-2015-1 Optimization and complete characterization of a photoacoustic gas detector**
C. Risser, B. Parvitte, R. Vallon, V. Zéninari
Applied Physics B, 118, 2, pp. 319-326 (2015)
<http://dx.doi.org/10.1007/s00340-014-5988-6>
186. **E3-2015-2 Development of a Miniaturized Differential Photoacoustic Gas Sensor**
J. Rouxel, J.-G. Coutard, S. Gidon, O. Lartigue, S. Nicoletti, B. Parvitte, R. Vallon, V. Zéninari, A. Glière
Procedia Engineering, 120, pp. 396-399 (2015)
<http://dx.doi.org/10.1016/j.proeng.2015.08.650>

187. **E4-2015-1 An experimental and theoretical study of the kinetics of the reaction between 3-hydroxy-3-methyl-2-butanone and OH radicals.**
A.Mano Priya, G. El Dib, L. Senthilkumar, C. Sleiman, A. Tomas, A. Canosa and A. Chakir. RSC Adv., 2015, 5, 26559-2656.
188. **E4-2015-2 Effects of long term raw pig slurry inputs on nutrient and metal contamination of tropical volcanogenic soils, Uvéa Island (South Pacific),** Gunkel-Grillon P., Roth E., Laporte-Magoni C., LeMestre M., , Science of the Total Environment 533, 2015, 339-346.
189. **E4-2015-3 Kinetics of the heterogeneous photo oxidation of the pesticide bupirimate by OH-radicals and ozone under atmospheric conditions.**
H. Bouya, M. Errami, A. Chakir, E. Roth. Chemosphere, Volume 134, September 2015, Pages 301-306
190. **E4-2015-4 UV-visible spectra and gas-phase rate coefficients for the reaction of 2,3-pentanedione and 2,4-pentanedione with OH radicals.**
L. Messaadia, G. El Dib, A. Ferhati, A. Chakir. Chemical Physics Letters, Volume 626, 17 April 2015, Pages 73-79
191. **E4-2015-5 Degradation of Enrofloxacin Antibiotic under Combined Ionizing Radiation and Biological Removal Technologies.**
S. Ben Salem, M. Mezni, M. Errami, K.M.Amine, R. Salghi, H. Ali. Ismat, A. Chakir, B. Hammouti , M. Messali, S. Fattouch Int. J. Electrochem. Sci., 10 (2015) 3613 - 3622.
192. **E5-2015-1 Does shaking increase the pressure inside a bottle of champagne?,** Vreme A, Pouligny B, Nadal F, Liger-Belair G (2015) J. Colloid Interface Sci., 439, 42-53. *Cet article a été repris dans la section « News » du site internet du JCIS. <http://www.journals.elsevier.com/journal-of-colloid-and-interface-science/news/>*
193. **E5-2015-2 The Science of Bubbly,** Liger-Belair G (2015) Sci. Am. (Special Issue: The Science of Food), 16-21.
194. **E5-2015-3 Chemical messages in 170-year-old champagne bottles from the Baltic Sea: Revealing tastes from the past,** Jeandet P, Heinzmann S, Roullier-Gall C, Cilindre C, Aron A, Deville MA, Moritz F, Karbowiak T, Demarville D, Brun C, Moreau F, Michalke B, Liger-Belair G, Witting M, Lucio M, Steyer D, Gougeon RD, Schmitt-Kopplin P (2015) Proc. Natl. Acad. Sci. USA, 112, 5893-5898.
195. **E5-2015-4 Bubble dynamics in various commercial sparkling bottled waters,** Liger-Belair G, Sternenberg F, Brunner S, Robillard B, Cilindre C (2015) J. Food Engineering, 163, 60-70.
196. **E5-2015-5 Flow analysis from PIV in engraved champagne tasting glasses: flute versus coupe,** Beaumont F, Liger-Belair G, Polidori G (2015) Exp. Fluids, 56, 170.
197. **E5-2015-6 Six secrets of champagne,** Liger-Belair G (2015) Phys. World, sous presse.
198. **E5-2015-7 Gravitational instability due to the dissolution of carbon dioxide in a Hele-Shaw cell,** Vreme A, Nadal F, Pouligny B, Jeandet P, Liger-Belair G, Meunier P. (2015) J. Fluid Mech., sous presse.
199. **E6-2015-1 Influence of local ionization on ionospheric densities in Titan's upper atmosphere,** Sagnieres, LBM, Galand, M., Cui,J., Lavvas, P., Vigren, E., Vuitton, V., Yelle, RV, Wellbrock, A., Coates, A., JGR, 120, 5899, (2015).
200. **E6-2015-2 N2 state population in Titan's atmosphere,** Lavvas, P., Yelle, RV, Heays, A.N., Campbell, L., Brunger, MJ, Galand, M., Vuitton, V., Icarus, 260, 29-59, (2015).
201. **E6-2015-3 Moistened Titan surface at the Huygens Landing Site and around Shangri-la,** Rannou, P., D. Toledo-Carrasco, P. Lavvas, E. D'Aversa, M. L. Moriconi, A Adriani, S. Le Mouélic, C. Sotin and R. Brown, In Press, Icarus, (2015).
202. **E6-2015-4 Measurement of aerosol optical depth and sub-visual cloud detection using the optical depth sensor (ODS),** Toledo, D., Rannou, P., Pommereau, J-P., Sarkissian, A., and Foujols, T., Atmospheric Measurement Techniques, In Press, (2015)

203. **E4-E6-2015-5** Kinetic study of the reaction of nitrate radicals with ethylperoxy radicals between 277 and 358 K, A.Chakir, H. Laversin, L. Joly, J. Cousin, E. Roth, G.Durry, Chemical Physics, Letters, in press, 2015.
204. **E6-2015-6** Ionization balance in Titan's night side ionosphere, Vigren, E., Galand, M, Yelle, RV, Wellbrock, A., Coates, AJ, Snowden, D., Cui, J, Lavvas, P., Edberg, NJT, Sebanits, O., Wahlund, J-E, Vuitton, V., Mandt, K, Icarus, 248, 539, (2015).
205. **E6-2015-7** On the Possibility of Significant Electron Depletion due to Nanograin Charging in the Coma of Comet 67p/churyumov-gerasimenko near Perihelion, Vigren, E., Galand, M., Lavvas, P., Eriksson, A.I., Wahlund, J-E, Ap.J., 798, 130, (2015)
206. **E6-2015-8** Technical note: Dimensioning IRGA gas sampling system: laboratory and field experiments, M. Aubinet, L. Joly, D. Loustau, A. De Ligne, H. Chopin, J. Cousin, N. Chauvin, T. Decarpenterie, and P. Gross Atmos. Meas. Tech. Discuss., 8, 10735-10754, doi:10.5194/amtd-8-10735-2015, 2015
207. **E6-2015-9** NO₂ seasonal evolution in the north subtropical free troposphere. M. Gil-Ojeda , M. Navarro-Comas, L. Gómez-Martín, J. A. Adame, A. Saiz-Lopez, C. A. Cuevas, Y. González, O. Puentedura, E. Cuevas, J.-F. Lamarque, D. Kinnison, and S. Tilmes. Atmos. Chem. Phys., 15, 10567-10579, 2015. doi:10.5194/acp-15-10567-2015.
<http://www.atmos-chem-phys.net/15/10567/2015/acp-15-10567-2015.html>

2016 (...- 30 juin)

208. **E1-2016-1** "Assignment and modelling of the absorption spectrum of ¹³CH₄ at 80 K in the region of the 2ν₃ band (5853-6201 cm⁻¹)", E. N. Starikova, A.V. Nikitin, M. Rey, S.A. Tashkun, D. Mondelain, S. Kassi, A. Campargue, V.I.G. Tyuterev, JQSRT (2016) accepted
209. **E1-2016-2** "The ¹³CH₄ absorption spectrum in the Icosad range (6600-7692 cm⁻¹) at 80K and 296 K: empirical line lists and temperature dependence", A. Campargue, S. Béguier, Y. Zbiri, D. Mondelain, S. Kassi, E. V. Karlovets, A.V. Nikitin, M. Rey, E.N. Starikova, V.I.G. Tyuterev, J. Mol. Spectrosc. (2016) accepted
210. **E1-2016-3** "Accurate dipole moment curve and non-adiabatic effects on the high resolution spectroscopic properties of the LiH molecule", L. G. Diniz, N. Kirnosov, A. Alijah, J. R. Mohallem, L. Adamowicz, Journal of Molecular Spectroscopy, 322, 2016, 22–28, doi:10.1016/j.jms.2016.03.001
211. **E1-2016-4** "MCMC² (version 1.1.2): A Monte Carlo code for multiply charged clusters", D. A. Bonhommeau, Comput. Phys. Commun. sous presse (2016).
212. **E1-2016-5** "First theoretical global line lists of ethylene (12C₂H₄) spectra at various temperatures in the far-infrared range for quantification of absorption/emission in planetary atmospheres", M. Rey, T. Delahaye, A. Nikitin, V. Tyuterev, A&A, (2016) accepted
213. **E2-2016-1** "Inventory of data included in HITRAN2012 edition for water vapor between 6450 and 9400 cm⁻¹". S. Mikhailenko and L. Régalia, Journal of Molecular spectroscopy (2016) , accepted.
214. **E2-2016-2** "Frequency and Intensity Analysis of the 10µm Region of the Ethylene Spectrum Using the D_2h Top Data System", A. Alkadrou, M.-T. Bourgeois, M. Rotger, M. Tudorie, J. Vander Auwera et V. Boudon, Acceptée à JQSRT

215. **E2-2016-3** "High-Resolution Stimulated Raman Spectroscopy and Analysis of the ν_2 and ν_3 Bands of $^{13}\text{C}_2\text{H}_4$ ", A. Alkadrou, M. Rotger, D. Bermejo, J.L. Doménech et V. Boudon, J. of Raman Spectrosc., DOI 10.1002/jrs.4907 (2016).
216. **E2-2016-4** "Line position analysis of the ν_2 band of SO_2F_2 using the C_{2v} Top Data System", F. Hmida, B. Grouiez, M. Rotger, M. Faye, L. Manceron, V. Boudon et H. Aroui, Acceptée au JMS.
217. **E3-2016-1** "External cavity coherent quantum cascade laser array", R. Vallon, B. Parvitte, L. Bizet, G.M. De Naurois, B. Simozrag, G. Maisons, M. Carras, V. Zéninari, Infrared Physics and Technology, 76, pp. 415-420 (2016), <http://dx.doi.org/10.1016/j.infrared.2016.03.013> external link
218. **E3-2016-2** "Photoacoustic detection of methane in large concentrations with a Helmholtz sensor: Simulation and experimentation", V. Zéninari, R. Vallon, C. Risser, B. Parvitte, International Journal of Thermophysics, 37, 1, pp. 1-11 (2016), <http://dx.doi.org/10.1007/s10765-015-2018-9> external link
219. **E3-2016-3**, "Miniaturized differential Helmholtz resonators for photoacoustic trace gas detection", J. Rouxel, J.-G. Coutard, S. Gidon, O. Lartigue, S. Nicoletti, B. Parvitte, R. Vallon, V. Zéninari, A. Glière, Acceptée pour publication à Sensors & Actuators B (2016)
220. **E4-2016-1** "Kinetic of the gas-phase reactions of OH radicals and Cl atoms with diethyl ethylphosphonate and triethyl phosphate", H. Laversin, A. El Masri, M. Al Rashidi, E. Roth, A. Chakir, Atmospheric Environment, 126, 2016, 250-257.
221. **E5-2016-1** "Evaporation of droplets in a Champagne wine aerosol", E. Ghabache, G. Liger-Belair, A. Antkowiak, T. Séon, Scientific Reports, vol 6, 25148, 2016.
222. **E5-2016-2** "Modeling the losses of dissolved carbon dioxide from laser-etched champagne glasses under standard tasting conditions", G. Liger-Belair, J. Phys. Chem. B, vol 120, 3724-3734, 2016.
223. **E5-2016-3** "A synchronized particle image velocimetry and infrared thermography technique applied to convective mass transfer in champagne glasses", F. Beaumont, G. Liger-Belair, Y. Bailly, G. Polidori, Exp. Fluids, vol 57, 85, 2016.
224. **E5-2016-4** "Unveiling self-organized two-dimensional (2D) convective cells in champagne glasses", F. Beaumont, G. Liger-Belair, G. Polidori, J. Food Engineering, vol 188, 58-65, 2016.
225. **E6-2016-1** "Dust photophoretic transport around a T Tauri star: Implications for comets composition", D. Cordier, P.G. Prada Moroni, E. Tognelli, Icarus, (2016)
226. **E6-2016-2** "Structure of Titan's evaporites", D. Cordier, T. Cornet, J.W. Barnes, S.M. MacKenzie, T. Le Bahers, D. Nna-Mvondo, P. Rannou, A.G. Ferreira, Icarus, (2016)
227. **E6-2016-3** "The atmosphere of Pluto as observed by New Horizons", G. Randall Gladstone, S. Alan Stern, Kimberly Ennico, Catherine B. Olkin, Harold A. Weaver, Leslie A. Young, Michael E. Summers, Darrell F. Strobel, David P. Hinson, Joshua A. Kammer, Alex H. Parker, Andrew J. Steffl, Ivan R. Linscott, Joel Wm. Parker, Andrew F. Cheng, David C. Slater, Maarten H. Versteeg, Thomas K. Greathouse, Kurt D. Retherford, Henry Throop, Nathaniel J. Cunningham, William W. Woods, Kelsi N. Singer, Constantine C. C. Tsang, Eric Schindhelm, Carey M. Lisse, Michael L. Wong, Yuk L. Yung, Xun Zhu, Werner Curdt, Panayotis Lavvas, Eliot F. Young, G. Leonard Tyler, the New Horizons Science Team., Science, Vol. 351, Issue 6279, 2016, DOI: 10.1126/science.aad8866

- 228.**E6-2016-4** “Intercomparison of in situ water vapor balloon-borne measurements from Pico-SDLA H₂O and FLASH-B in the tropical UTLS”, M. Ghysels, E. D. Riviere, S. Khaykin, C. Stoeffler, N. Amarouche, J-P. Pommereau, G. Held, and G. Durry, Atmos. Meas. Tech., 9, 1207-1219, 2016, DOI :10.5194/amt-9-1207-2016
- 229.**E6-2016-5** . “How speed of sound measurements could bring constraints on the composition of Titan’s seas”, D. Cordier, MNRAS 000, 1–7 (2016), DOI :10.1093/mnras/stw732
- 230.**E6-2016-6** "The optical depth sensor (ODS) for column dust opacity measurements and cloud detection on martian atmosphere”, D. Toledo, P. Rannou, J.-P. Pommereau and T. Foujols, Exp. Astron. DOI 10.1007/s10686-016-9500-7 (2016)

Liste des brevets avec extensions :

	2011	2012	2013	2014	2015	2016	TOTAL
Brevets		8	11	1	1		21

FAMILLE SONDE (4) : Optical probe for measuring physical and chemical characteristics of a medium during flow, A.K. Mohamed, R. Vallon, [WO12080639A1](#), [CN103339494A,B](#), [US130258344A1,B2](#), [EP2652484A1,B1](#)

FAMILLE MULTIGAZ (4) : Procédé et dispositif de détection de traces de gaz multiples / Method and device for detecting trace amounts of many gases, V. Zéninari, B. Parvitte, L. Joly, G. Durry, R. Le Loarer, J. C. Garcia, R. Hamelin, [FR2963102 \(A1\)](#), [WO12010806 \(A1\)](#), [EP2596331 \(A1\)](#), [US130205871 \(A1\)](#)

FAMILLE BOITIER (4) : Procédé et dispositif d’émission d’un faisceau laser dans un boîtier / Method and device for emitting a laser beam in a housing, B. Parvitte, L. Joly, V. Lecocq, G. Durry, V. Zéninari, R. Hamelin, R. Le Loarer, [FR 2969315 \(A1\), \(B1\)](#), [WO12080652 \(A1\)](#), [EP2652 845 \(A1\)](#), [US130287053 \(A1\)](#)

FAMILLE THERMALISATION (2) : Dispositif de détection de trace de gaz / Device for detecting trace gases, V. Zéninari, L. Joly, B. Parvitte, T. Decarpenterie, G. Durry, R. Le Loarer, [FR2978247A1](#), [WO13010984A2,A3](#)

FAMILLE HELMHOLTZ (2) : Dispositif d’analyse de gaz basé sur un résonateur de Helmholtz, C. Risser, V. Zéninari, B. Parvitte, R. Vallon, L. Colin, J. C. Garcia, Brevet Français [FR1452333, \(2014\)](#) ; Dispositif d’analyse de gaz à très forte sensibilité, V. Zéninari, B. Parvitte, R. Vallon, C. Risser, L. Colin, J. C. Garcia, [FR3017950A1](#)

FAMILLE PA MINIATURE (3) : Détecteur de gaz PA à cellule de Helmholtz / PA gas sensor with Helmholtz cell, M. Brun, S. Nicoletti, B. Parvitte, V. Zéninari, [FR2974413A1,B1](#), [EP2515096A1,B1](#), [US12266655A1](#)

FAMILLE GUIDE D’ONDE (2) : Optical waveguide / Optical waveguide having a varying index gradient, M. Brun, S. Nicoletti, B. Parvitte, V. Zéninari, [EP2662714 \(A1\)](#), [US130315547 \(A1\)](#)

Annexe 7 : Liste des contrats

Brevets, contrats industriels, contrats sur financement privé...

Nom du projet	Dates de début et de fin	Type de contrat	Financement (Total/Unité)	Partenaires
Etude des phénomènes liés à la dissolution et à la désorption des gaz dissous dans une bouteille de champagne	01/09/2013 - 31/08/2015	Collaboration de recherche	12 000 € HT	CIVC
Etude du débouchage d'une bouteille de champagne par caméra rapide : impact de quelques paramètres de la bouteille et du bouchon	27/06/2014–26/06/2016	Collaboration de recherche	20 000 € HT	AMORIM & IRMAOS
Etude portant sur la dynamique des bulles et les pertes de CO ₂ dissous dans des échantillons commerciaux de boissons pétillantes non alcoolisées sucrées ou édulcorées	10/12/2014-09/05/2015	Collaboration de recherche	25 000 HT	COCA-COLA
Etude de l'impact de produits de levure sur l'effervescence et la tenue de mousse d'un vin effervescent	22/12/2014-21/12/2015	Collaboration de recherche	16 500 € HT	BIOLAFFORT

Contrats institutionnels sur financement public

-> les projets marqués par * sont coordonnés par le GSMA

International

Nom du projet	Dates de début et de fin	Type d'AAP	Financement (Total/Unité)	Partenaires
VAMDC	2009-2012	Contrat européen INFRA-2008-1.2.2	2900000 E/ 96000 E	Obs.Paris + 20 partenaires
SAMIA	2009-2012	GDR France-Russie-Chine	Frais de voyages 40000 E / 12000 E	Grenoble, Dijon, Paris, Tomsk, Moscou, Shangai
Ab initio	2012-2013	Balaton PHC Franco-Hongrois N° 27867WJ	Frais de voyages 5000	Budapest

			E / 2500 E	
SAMIA	2015-2018	LIA Franco-Russe	60000 E/ 13000 E par an	Grenoble, Dijon, Paris, Besançon, Acad.Sci.Russie
CONACyT	2014	Bilatéral Franco-Mexicain	Frais de voyages 3830 E / 1900 E	Mexico
"Isotopic and non- adiabatic effects »	2014-2017	Bilatéral Franco-Brésilien « Sciences sans frontières »	60000 E/ 30000 E	Brésil
Volubilis	2010-2013	PHC	24 k€	ENSA d'Agadir
PHC Maghreb	2015-2017	PHC	25 k€/an pour le GSMA	ENSA d'Agadir /ENSAT Tunis/ Université de Telemann
Projet Ministère de l'Outre Mer - ELEP	2010-2012	Ministère de l'Outre-Mer	30 k€	l'université de N ^{elle} Calédonie
Atmospheric *Molecular Growth	2011-2015	PNP/INSU/CNRS	5k€/an	IPAG LPL U.of Arizona
Aerosol properties in Titan's upper atmosphere*	2011-2015	CNES/ESA	10k€/an	IPAG LPL, U.of Arizona JPL, NASA
FERTECCOL	2013-2015	PHC Hubert Curien	??	Université de Liège, Unité de Physique des Biosystèmes
SEOM- IAS Scientific Exploitation of Operational Missions- Improved Atmospheric Spectroscopy Databases	2014-2016	ESA	440 000 / 77 000	DLR, LISA, LIPhy ...
SMAE (Spectroscopie Moléculaire *Appliquée à l'Environnement)		FEDER /PRESAGE	161 475 (/322 950)	GSMA
ACOUSTICNOSE Compact Photo- Acoustic Mid-Infrared Spectroscopy Sensor for Extended Range of Chemical Agents	1 Mars 2010 30 Août 2012	Programme EURIPIDES/Eureka n° EUR-09-710	800 k€ ≈ 150 k€ au GSMA	III-V LAB Norsk Elektro Optikk "NEO" (Norway)
MERLIN Methane Remote Lidar Mission : Spectroscopie du méthane vers 1,6 µm	1 janvier 2012 31 Décembre 2019	Mission Franco-Allemande R&T CNES TOSCA (Terre, Océan, Surfaces Continental,es, Atmosphère)	500 k€ chaque année ≈ 150 k€ au GSMA	Français pour la spectroscopie : LISA LMD

National

Nom du projet	Dates début-fin	Type d'AAP	Financement (Total/Unité)	Partenaires
CH4@Titan	2009-2012	ANR blanc	565000 E / 175000	Meudon, Dijon, Grenoble
IDEO *	2009-2014	ANR blanc	460000 E / 186 000 E	Grenoble, Paris
ozone	2009-2011	LEFE CHAT CNRS	30000 E / 15000 E	Grenoble
Methane in 2* micron window	2014	PNP CNRS	4500 E / 4000 E	Observatoire Paris
SELECTIF	2009-2011	REI DGA	450 k€ / ≈ 120 k€	III-V LAB
COCASE	2012-2014	ANR ASTRID	300 k€ / ≈ 120 k€	III-V LAB
MIRIADE (coord. SLA) *	2012-2015	ANR ECOTECH	1 M€ / ≈ 225 k€	III-V LAB, LETI, LSCE, AEROVIA
QUIGARDE (coord. SLA) *	2013-2016	ANR ASTRID	300 k€ / ≈ 85 k€	III-V LAB, LPL
Projet collaboratif LEFE/CHAT	2012-2015	INSU	45 k€ / ≈ 20 k€	Ecole des mines de douai, Institut de Physique de Rennes
AQUAL	2008-2014	CPER	200 k€	6 laboratoires URCA
NUAGES	2015-2018	CORTEA-ADEME	?? / 156k€	AgroParisTech INRA Grignon AirParif
APOGE*	2014-2015	Défi-CNRS	20 k€	CNRM LSCE
Programme ballons CNES *	2011-2015	Appel d'offre CNES - ballons	~ 100 k€	DT-INSU
TROPICO*	2010-2015	ANR blanche	600 k€/ 210 k€	LATMOS, LMD, LPC2E, CNRM, LA, IPMET-Brésil
APOSTIC*	2012-2016	ANR blanche	??/160 k€	LPGN, LAIM/CEA, , LMD, JPL (CA, USA)
EECLAT	2012 - ...	TOSCA - CNES	? / 8 k€	LMD
Mesure de profils in situ de gaz à effet de serre pour la validation de MicroCarb et Meriln*	2013-2015	TOSCA - CNES	85k€	Meteo-France LA
Lasers à cascades Quantiques *	2013-2015	R&T CNES	75k€	Thalès DT-INSU
Mesure de flux de N ₂ O avec ECoFlux sur l'Observatoire Pérenne de l'Environnement	2013-2015	SOERE-OPE\ANDRA	22k€	LSCE INRA Clermont-Ferrand CESBIO Gembloux Agro-Bio Tech
ULIS		ANR-ECO Industrie	230 850 / (127 170)	Environnement SA Ondalys CNRS (GSMA)

SO ₂ F ₂	2011-2013	LEFE-ChAt	6000/4000	GSMA/LICB
O ₃	2014-2015	LEFE-ChAt	13000/6500	GSMA/LPMAA
H ₂ O	2011-2013	LEFE-ChAt	30000/12000	GSMA, LIPHY, IPR, LISA
FRIPON	2014-2017	ANR	0	

Régional

Nom du projet	Dates de début et de fin	Type d'AAP	Financement (Total/Unité)	Partenaires
Projets (PAI)	2014-2015	URCA	13k€	/
Projet BQR *	2011	URCA	12 k€	/
EGESCA*	2013-2015	Essaimage\Région	?? / 90k€	??
Gmini	2012-2015	Emergence\Région	380k€\ ??	UTT
SMAE* (Spectroscopie Moléculaire Appliquée à l'Environnement)		Conseil Régional	79 329 (/322 950)	GSMA
Une première approche des processus physico-chimiques responsables du gerbage des vins de Champagne*	1/01/2014 au 31/12/2014	Projet Incitatif Amont 2014	12 000 €	ECA (70%), SLA (30%) Champagne Pommery, CIVC, IOC (Epernay), GRESPI (URCA)
ACOUSTICNOSE Compact Photo-Acoustic Mid-Infrared Spectroscopy Sensor for Extended Range of Chemical Agents*	1 Septembre 2010 31 Août 2012	Demande exceptionnelle Région Champagne-Ardenne pour un co-financement de l'achat de l'équipement du programme Euripides	≈ 100 k€	-

Liste prévisionnelle des personnels de l'unité au 1er janvier 2018, hors doctorants.

à classer par ordre alphabétique

 Nomenclatures à respecter, voir :
 feuille MenuSR (corps-grades)
 feuille UAI_Etab_Org (UAI établissements-organismes)

Type d'emploi (1)	Nom	Prénom	H/F	Date de naissance (JJ/MM/AAA A)	Corps-grade (1)	Disciplines HCERES / Branches d'Activités Profession (BAP) (2)	HDR (3)	Etablissement ou organisme employeur (4)	Code UAI de l'établissement ou organisme employeur (5)	Ministère(s) de tutelle (6)	N° de l'équipe interne du prochain contrat, le cas échéant (7)	N° de l'unité d'origine, le cas échéant (8)	Signature des personnels
EC_tit	ALIJAH	Alexander	H	11/10/58	PR2	ST4 Chimie	oui	U REIMS	0511296G	MENESR	1		A. Alj
EC_tit	DE BACKER-BARILLY	Marie-Renée	F	23/01/69	PR1	ST2 Physique	oui	U REIMS	0511296G	MENESR	1		De Backer
EC_tit	DURRY	Georges	H	13/03/66	PREX	ST2 Physique	oui	U REIMS	0511296G	MENESR	2		Durry
EC_tit	LIGER-BELAIR BOCQUILLON	Gérard	H	21/10/70	PR1	SVE1 Agronomie, Biologie Végétale, Ecologie, Environnement	oui	U REIMS	0511296G	MENESR	3		Liger-Belair
EC_tit	PARVITTE	Bertrand	H	08/11/70	PR2	ST2 Physique	oui	U REIMS	0511296G	MENESR	1		Parvitte
EC_tit	RANNOU	Pascal	H	09/10/68	PR2	ST3 Sciences de la terre et de l'univers	oui	U REIMS	0511296G	MENESR	2		Rannou
EC_tit	ROTGER-LANGUEAU	Maud	F	29/12/64	PR1	ST2 Physique	oui	U REIMS	0511296G	MENESR	1		Rotger
EC_tit	TYUTEREV	Vladimir	H	07/01/50	PREX	ST2 Physique	oui	U REIMS	0511296G	MENESR	1		Tyuterev
EC_tit	ZENINARI	Virginie	F	02/04/72	PR1	ST2 Physique	oui	U REIMS	0511296G	MENESR	1		Zeninari
EC_tit	BONHOMMEAU	David	H	13/05/80	MCF	ST2 Physique	non	U REIMS	0511296G	MENESR	3		Bonhommeau
EC_tit	CHAKIR	Abdelkhalq	H	18/11/59	MCFHC	ST4 Chimie	oui	U REIMS	0511296G	MENESR	2		Chakir
EC_tit	CILINDRE	Clara	F	12/07/78	MCF	SVE1 Agronomie, Biologie Végétale, Ecologie, Environnement	non	U REIMS	0511296G	MENESR	3		Cilindre
EC_tit	COURS	Thibaud	H	06/04/69	MCF	ST2 Physique	non	U REIMS	0511296G	MENESR	2		Cours
EC_tit	DAUMONT	Ludovic	H	14/02/74	MCF	ST4 Chimie	non	U REIMS	0511296G	MENESR	1		Daumont
EC_tit	GOMEZ-MARTIN	Laura	F	04/03/78	MCF	ST2 Physique	non	U REIMS	0511296G	MENESR	1		Gomez-Martin
EC_tit	HAMDOUNI	Abdelhamid	H	11/01/60	MCF	ST2 Physique	non	U REIMS	0511296G	MENESR	2		Hamdouni
EC_tit	PETROCHIOS	Nicolas	H	10/07/70	MCF	ST5 Sciences pour l'ingénieur	non	U REIMS	0511296G	MENESR	2		Petrochios
EC_tit	REGALIA	Laurence	F	23/07/70	MCF	ST2 Physique	oui	U REIMS	0511296G	MENESR	1		Regalia
EC_tit	RIVIERE	Emmanuel	H	29/11/73	MCF	ST3 Sciences de la terre et de l'univers	oui	U REIMS	0511296G	MENESR	2		Riviere
EC_tit	ROTH	Estelle	F	02/06/72	MCFHC	ST4 Chimie	oui	U REIMS	0511296G	MENESR	2		Roth
EC_tit	VALLON	Raphaël	H	31/07/81	MCF	ST2 Physique	non	U REIMS	0511296G	MENESR	1		Vallon
Ch_tit	REY	Michaël	H	13/03/76	CR1	ST2 Physique	non	CNRS	0753639Y	MENESR	1		Rey
Ch_tit	JOLY	Lilian	H	02/07/78	CR1	ST2 Physique	non	CNRS	0753639Y	MENESR	2		Joly
Ch_tit	LAVVAS	Panayotis	H	04/02/80	CR1	ST3 Sciences de la terre et de l'univers	non	CNRS	0753639Y	MENESR	2		Lavvas
Ch_tit	CORDIER	Daniel	H	05/07/66	CR1	ST3 Sciences de la terre et de l'univers	non	CNRS	0753639Y	MENESR	2		Cordier
AP_tit	ALBORA	Grégory	H	18/05/89	TCH	C - Sciences de l'ingénieur et instrumentation scientifique (SIIS)	NON	U REIMS	0511296G	MENESR	4		Albora
AP_tit	BERTHELOT	Sophie	F	11/04/80	AJT	J - Gestion et pilotage (GP)	NON	U REIMS	0511296G	MENESR	4		Berthelot
AP_tit	BURGALAT	Jérémie	H	20/02/83	IR	E - Informatique, Statistique et Calcul Scientifique (ICS)	NON	U REIMS	0511296G	MENESR	4		Burgalat
AP_tit	CHAUVIN	Nicolas	H	30/12/83	TCH	C - Sciences de l'ingénieur et instrumentation scientifique (SIIS)	NON	U REIMS	0511296G	MENESR	4		Chauvin
AP_tit	COUSIN	Julien	H	10/11/80	IR	C - Sciences de l'ingénieur et instrumentation scientifique (SIIS)	NON	U REIMS	0511296G	MENESR	4		Cousin
AP_tit	DECARPENTERIE	Thomas	H	10/02/78	IE	C - Sciences de l'ingénieur et instrumentation scientifique (SIIS)	NON	CNRS	0753639Y	MENESR	4		Decarpenterie
AP_tit	GROUIEZ	Bruno	H	11/10/81	IR	C - Sciences de l'ingénieur et instrumentation scientifique (SIIS)	NON	U REIMS	0511296G	MENESR	4		Grouiez
AP_tit	DUMELIE	Nicolas	H	03/09/79	IR	C - Sciences de l'ingénieur et instrumentation scientifique (SIIS)	NON	U REIMS	0511296G	MENESR	4		Dumelie
AP_tit	PARPILLON	Vincent	H	21/10/62	IE	C - Sciences de l'ingénieur et instrumentation scientifique (SIIS)	NON	U REIMS	0511296G	MENESR	4		Parpillon
AP_tit	POLAK	Frédéric	H	27/03/64	AJT	C - Sciences de l'ingénieur et instrumentation scientifique (SIIS)		U REIMS	0511296G	MENESR	4		Polak
AP_tit	POTY	Barbara	F	11/01/66	AI	B - Sciences chimiques Sciences des matériaux (SCSM)		U REIMS	0511296G	MENESR	4		Poty

Insérer les lignes supplémentaires juste au dessus de la ligne rose, ne pas laisser de ligne non remplie

Annexe 9 : Liste des thèses soutenues et des contrats postdoctoraux

-----> **12 thèses en cours au 30 juin 2016, 19 thèses présentées sur la période 2011 – 30 juin 2016**

NOM Prénom du doctorant	NOM Prénom du ou des directeurs de thèse	Dates de début et de fin	Type de financement
KOCHANOV Roman	TYUTEREV / TASHKUN	2010-2013	Co-tutelle internationale
DELAHAYE Thibault	TYUTEREV / REY	2011-2014	Ministère
DINIZ Leonardo	ALIJAH	2011-2014	Brésil
LAPIERRE David	TYUTEREV	2013- en cours	Sans financement
EL RACHID Mariam	CHAKIR/ROTH	2008-2012	Région
ERRAMI Mohamed	CHAKIR/ROTH	2009-2012	PHC Volubilis
MESSAADIA Lyamin	CHAKIR	2009-2013	PROFAS
EL-MASRI Ahmad	CHAKIR/ROTH	2011-2014	CPER-AQUAL
BOUYA Houceine	CHAKIR	2012-2015	PHC Maghreb/Volubilis
KALALIAN Carmen	CHAKIR/ROTH	2015-en cours	Ministère
ROKBANI Oussama	CHAKIR/ROTH	2015-encours	PHC Maghreb
SAMIR Brahim	CHAKIR	2015-encours	PHC Maghreb
ALKADROU Abdulsammee	ROTGER/DE BACKER	2013-en cours	Région
HMIDA Fadoua	ROTGER/AROUI	2014-en cours	URCA/Tunisie
BOUGDHIRI Arwa	ROTGER/AROUI	2015-en cours	URCA/Tunisie
OUDOT Charlotte	REGALIA	10/2008 à 12/2011	Région
MAMMEZ Dominique	ZENINARI/PARVITTE	2010-2013	DGA/Région
RISSER Christophe	ZENINARI/PARVITTE	2012-2015	CIFRE AEROVIA
ROUXEL Justin	ZENINARI/PARVITTE	2012-2015	CEA
MAMMEZ Marie-Hélène	ZENINARI/PARVITTE	28/06/2016	DGA/CNRS
BIZET Laurent	ZENINARI/PARVITTE	2015- en cours	DGA/Région
MORIAUX Anne-Laure	ZENINARI/LIGER-BELAIR	2015-en cours	Ministère
PERRET Alexandre	LIGER-BELAIR/ALIJAH	2012-2014	CIFRE BULL
VREME Alexandru	LIGER-BELAIR	2012-2015	CPER VINEAL
BEAUMONT Fabien	LIGER-BELAIR	2011-2014	Autofinancement GRESPI
BEHERA Abhina	E. RIVIERE	2014- en cours	Ministere
SEIGNOVERT Benoît	P. RANNOU	2014-en cours	Ministère
MIFTAH-EL-KHAIR Zineb	DURRY/JOLY	2014-en cours	CNES/URCA
TOLEDO Daniel	P.RANNOU	2012-2015	CNES\Région
MAPPE-FOGAING Irène	G.DURRY\L.JOLY	2010-2013	Ville de Reims

GHYSELS Mélanie	G.DURRY\E.RIVIERE	2009-2012	Région
BURGALAT Jérémie	P.RANNOU	2009-2012	Région

Pour les post-doctorats :

NOM Prénom du doctorant	NOM Prénom du ou des directeurs de thèse	Dates de début et de fin	Type de financement
BA Y.A.	BONHOMMEAU/ROTGER	2011	VAMDC
LAVERSIN Hélène	L. JOLY	2015- ...	projet NUAGE
MAAMARY Rabih	L. JOLY	2014-...	projet CEGESCA
STOEFLER Clara	G.DURRY/V.ZENINARI	2011-2013	postdoc CNES
MAUGUIERE Frédéric	V.ZENINARI	2011	EUROPE/AcousticNose
DELAHAYE Thibault	TRAN/ZENINARI	2014-...	CNES/CNRS