



agence d'évaluation de la recherche  
et de l'enseignement supérieur

Section des Unités de recherche

Évaluation de l'AERES sur l'unité :

Physico-Chimie des Processus de Combustion et de  
l'Atmosphère

PC2A

sous tutelle des  
établissements et organismes :

Université Lille 1- Sciences et Technologies - USTL

Centre National de la Recherche Scientifique - CNRS



Novembre 2013



agence d'évaluation de la recherche  
et de l'enseignement supérieur

Section des Unités de recherche

*Pour l'AERES, en vertu du décret du 3 novembre 2006<sup>1</sup>,*

- M. Didier HOUSSIN, président
- M. Pierre GLAUDES, directeur de la section des unités de recherche

*Au nom du comité d'experts,*

- M. Jean-Michel MOST, président du comité

---

<sup>1</sup> Le président de l'AERES « signe [...], les rapports d'évaluation, [...] contresignés pour chaque section par le directeur concerné » (Article 9, alinéa 3 du décret n°2006-1334 du 3 novembre 2006, modifié).



## Rapport d'évaluation

Nom de l'unité :	Physico-Chimie des Processus de Combustion et de l'Atmosphère
Acronyme de l'unité :	PC2A
Label demandé :	UMR
N° actuel :	UMR 8522
Nom du directeur (2013-2014) :	M. Jean-François PAUWELS
Nom du porteur de projet (2015-2019) :	M. Laurent GASNOT

## Membres du comité d'experts

Président :	M. Jean-Michel MOST, Institut Pprime, Poitiers
Experts :	M <sup>me</sup> Nabiha CHAUMEIX, ICARE, Orléans
	M. Alexis COPPALLE, CORIA Rouen (représentant du CNU)
	M. Jean-Francois DOUSSIN, LISA, Paris
	M. Frédéric GRISCH, INSA, Rouen
	M. Stéphane ZURBACH, SNECMA-SAFRAN (représentant du CoNRS)
Délégué scientifique représentant de l'AERES :	M. Hassan PEERHOSSAINI
Représentant(s) des établissements et organismes tutelles de l'unité :	M <sup>me</sup> Maryvonne PERRIN, DAS CNRS
	M. Philippe ROLLET, Université Lille 1- Sciences et Technologies

## 1 • Introduction

### Historique et localisation géographique de l'unité

Le laboratoire Physico-Chimie des Processus de Combustion et de l'Atmosphère (PC2A) est une Unité Mixte de Recherche de l'Université Lille 1 et du CNRS (associée depuis 1983) dans le domaine des sciences pour l'ingénieur. L'unité était organisée autour des deux équipes « Physico-Chimie de la combustion » et « Physico-Chimie de l'atmosphère ». Suite à l'évaluation du projet (en décembre 2008) qui prévoyait l'intégration de deux départements de l'École des Mines de Douai dans l'unité, et aux recommandations négatives de l'AERES et du CNRS, l'unité s'est restructurée en conservant son périmètre initial et en intégrant (en septembre 2009) le laboratoire de recherche commun IRSN/CNRS/Lille 1 sur la sûreté nucléaire. Ces trois équipes sont localisées dans trois bâtiments (C11, C5, CERLA) de la cité scientifique à Villeneuve d'Ascq.

### Équipe de direction

Pour le bilan : M. Jean-François PAUWELS ; pour le projet : M. Laurent GASNOT

### Nomenclature AERES

ST5 (Sciences pour l'Ingénieur, SPI)

### Effectifs de l'unité

Effectifs de l'unité	Nombre au 30/06/2013	Nombre au 01/01/2015
<b>N1</b> : Enseignants-chercheurs titulaires et assimilés	11 (10,8)	11 (10,8)
<b>N2</b> : Chercheurs des EPST ou EPIC titulaires et assimilés	12 (8,1)	12 (8,1)
<b>N3</b> : Autres personnels titulaires (n'ayant pas d'obligation de recherche)	12	13
<b>N4</b> : Autres enseignants-chercheurs (PREM, ECC, etc.)		
<b>N5</b> : Autres chercheurs des EPST ou EPIC (DREM, Post-doctorants, visiteurs etc.)	6	
<b>N6</b> : Autres personnels contractuels (n'ayant pas d'obligation de recherche)		
<b>TOTAL N1 à N6</b>	<b>41</b> <b>(36,9)</b>	<b>36</b> <b>(31,9)</b>

Effectifs de l'unité	Nombre au 30/06/2013	Nombre au 01/01/2015
Doctorants	17	
Thèses soutenues	26	
Post-doctorants ayant passé au moins 12 mois dans l'unité	10	
Nombre d'HDR soutenues	3	
Personnes habilitées à diriger des recherches ou assimilées	12	13

## 2 • Appréciation sur l'unité

### Avis global sur l'unité

PC2A est une UMR de taille moyenne qui comporte 23 enseignant-chercheurs et chercheurs dont 12 HDR, 5 ingénieurs-chercheurs IRSN, 12 BIATSS Lille 1 et ITA CNRS, quelques chercheurs invités et actuellement 17 doctorants. PC2A a pris en considération l'avis du précédent comité d'évaluation et s'est efforcé d'accroître son implication dans les projets ANR et de s'impliquer dans des partenariats régionaux (LabEx CaPPa, IRePSE), nationaux, européens ainsi que dans des partenariats avec des industriels. Grâce à une forte synergie entre les équipes, une mutualisation de ses moyens et la création d'un laboratoire commun PC2A/Université Lille 1/CNRS/IRSN, cette unité a élargi ses thématiques de recherche, accru son rayonnement pour être maintenant largement reconnue par les communautés internationales de combustion, de l'environnement et de sûreté nucléaire, ce qui lui confère un atout majeur pour la qualité de son projet. Grâce à la conception de diagnostics laser innovants, des espèces chimiques présentes au niveau de traces dans des flammes (NO<sub>x</sub>, HAP précurseurs de suies, ..), dans l'atmosphère (OH-HO<sub>2</sub>) et dans le nucléaire (chimie de l'iode) ont pu être détectées afin d'améliorer la connaissance des mécanismes de cinétique chimique.

Le comité d'experts a apprécié la structuration scientifique, la vie du laboratoire, l'importante mobilisation des personnels dans la formation et dans les actions de communication et leur implication dans la responsabilité d'institutions en appui à la recherche (IRePSE, labex CaPPa, etc).

Le comité d'experts se réjouit de ce bilan et encourage l'unité à conserver cette dynamique lors de la réalisation des orientations de son projet vers ses thématiques d'excellence de combustion, environnement et sûreté nucléaire.

### Points forts et possibilités liées au contexte

- PC2A se positionne dans des thématiques de recherche d'excellence à savoir sur la combustion (énergie et pollution) et l'environnement (qualité de l'air), auxquelles on doit ajouter la forte compétence en mesures laser pour la détection et la quantification d'espèces présentes au niveau de traces. PC2A a su se différencier au sein de la communauté scientifique en s'intéressant tout particulièrement à la détermination de schémas de cinétique et à la mesure de précurseurs de pollution tels que NO, suies, HO<sub>x</sub>, etc dans les flammes et l'environnement. L'approche basée sur une complémentarité expérience/modélisation constitue un point fort de la méthodologie déployée.



- La création en 2009 du laboratoire commun PC2A/CNRS/Lille1/IRSN a permis au laboratoire d'accroître son rayonnement régional, national et international en introduisant une troisième thématique sur la sûreté nucléaire qui s'appuie sur les compétences des deux autres équipes. La transversalité des objectifs scientifiques a permis de structurer une nouvelle équipe spécialisée sur la cinétique de réactivité des produits de fission de l'installation à l'atmosphère.

- PC2A développe des recherches d'excellente qualité et montre une bonne production scientifique. Le taux de publications dans des journaux à fort impact dans les thématiques d'excellence du PC2A est élevé (>1article/an/ETP), ce rayonnement international est complété par des conférences invitées, de nombreuses communications à tous niveaux de spécialistes, depuis les experts internationaux jusqu'aux jeunes, auprès du grand public comme auprès des instances régionales.

- PC2A présente une grande transversalité de thématiques entre ses trois équipes. Les compétences en cinétique chimique et les diagnostics laser pour la détection des molécules sous forme de traces et des suies et de ses précurseurs sont largement mutualisés, ce qui permet au PC2A d'élargir régulièrement ses domaines scientifiques tout en assurant une grande cohérence de ses programmes de recherche.

- L'interactivité en recherche et en formation avec les laboratoires et instances locales est forte.

- Le comité d'experts a souligné le dynamisme de toutes les catégories de personnel, catalysé par la forte implication du directeur actuel dans le laboratoire, l'université et la Région. L'unité PC2A est très bien soutenue par l'ensemble de ses tutelles et de la région.

- La cohérence dans le programme scientifique et la synergie de la nouvelle structuration du PC2A ont contribué à la mutualisation des moyens financiers, humains et matériels et au rayonnement du laboratoire.

- L'ouverture vers de nouveaux problèmes est constante, tout en restant dans les thématiques d'excellence de physico-chimie et de caractérisation d'espèces au niveau de traces.

- Le rayonnement est fort et se traduit par une implication dans des projets académiques régionaux, nationaux et européens.

- L'implication des membres de PC2A dans des instances décisionnelles est forte (Vice-Président Recherche à l'Université Lille 1, coordinateur et responsables de Projets, ..).

- Il en est de même pour l'implication dans la formation par la recherche et l'organisation d'Écoles d'été (Ecole de Combustion 2012).

- Dans le présent contrat, PC2A a accru son capital humain par le recrutement de 2 enseignants-chercheurs, 2 CR CNRS dont une mutation, 1 IR CNRS, 1 IE CNRS, 1T CNRS.

- L'attractivité du PC2A pour des chercheurs et invités est bonne, malgré des conditions matérielles d'accueil difficiles.

- La bonne santé financière du PC2A est à souligner avec la participation à de nombreux projets d'excellence, régionaux, nationaux, européens.

- Il existe une forte sensibilisation du personnel aux problèmes d'Hygiène et Sécurité.

- L'équipe de direction (actuelle et future) jouit du soutien de toutes les catégories de personnel.

- Des actions de communication ont été engagées (site web, organisation de séminaire pour public varié).

### Points faibles et risques liés au contexte

- Les locaux sont exigus et nécessiteraient une rénovation ainsi que des extensions pour faciliter le développement de nouvelles thématiques et favoriser l'accueil des visiteurs et invités (post-docs, chercheurs, professeurs,..), ainsi que des doctorants.

- Il existe des risques de dispersion thématique, limités certes, mais qui pourraient détourner, du fait d'opportunités financières souvent régionales, des chercheurs ou enseignants-chercheurs des thématiques d'excellence qu'ils maîtrisent parfaitement.

- L'attractivité pourrait être améliorée et le vivier pour le recrutement local de doctorants est faible.

- Le recrutement et l'accueil de post-doctorants et ATER restent difficiles.

- On constate un désengagement progressif des industriels dans des collaborations contractuelles bilatérales. C'est un phénomène certes rencontré dans la plupart des laboratoires de recherche, qui peut être attribué au changement des modes de financement de la recherche (ANR).

- La participation à des projets européens est à améliorer.

- On détecte quelques faiblesses pour certains thèmes, ne parvenant pas à acquérir une envergure internationale.

- On constate l'absence de promotions des ITA et localement des BIATSS.

### Recommandations

Pour conclure, PC2A a su prendre en considération les avis formulés par la précédente évaluation AERES. Il a mesuré l'importance d'un affichage clair de la stratégie scientifique du laboratoire, renforcé les liens humains dans le cadre de sa restructuration en favorisant les échanges entre les différentes catégories de personnel, réussi la mutualisation de ses moyens, attiré de nouveaux entrants permanents, augmenté sa production scientifique et accru ses ressources financières.

La stratégie à cinq ans est claire et s'appuie principalement sur les thématiques fortes et reconnues du laboratoire : la Physico-Chimie de la Combustion et de l'Atmosphère ainsi que la Sûreté Nucléaire. PC2A doit clairement entretenir son image de laboratoire associé à des domaines d'excellence, et conserver les niches actuelles qu'il a su identifier. L'excellence des recherches développées incite le comité d'experts à recommander à l'unité d'éviter de se disperser vers de nouveaux champs thématiques issus d'opportunités financières souvent locales afin de ne pas dégrader son image de marque et de rester à l'entière disposition des attentes internationales. La communauté scientifique attend du PC2A des résultats innovants et des méthodologies spécifiques pour améliorer les connaissances de base dans les domaines abordés. La grande incertitude exprimée par PC2A sur l'après-CPER ne semble pas justifiée étant donné le dynamisme de l'unité à se repositionner.

Le comité d'experts conseille à l'équipe de direction de veiller à renforcer les équipes et thématiques d'excellence et à demander la reconversion des sous-équipes ne disposant actuellement pas de moyens pour atteindre le niveau international. Le comité d'experts a été favorablement impressionné par le bilan de cette unité lors du précédent contrat, bilan que l'on peut qualifier de mature et d'excellent sur tous les critères retenus.

### 3 • Appréciations détaillées

Située au cœur du campus de l'Université Lille 1, l'unité PC2A est une UMR de taille moyenne qui compte 23 enseignants-chercheurs et chercheurs dont 12 HDR, 5 Ingénieurs-chercheurs IRSN, 12 BIATSS Lille 1 et ITA CNRS. Actuellement 17 doctorants et quelques chercheurs invités sont accueillis au sein des équipes. PC2A est rattaché aux Etablissements de l'Université Lille 1 « Sciences et Technologies », au CNRS, INSIS, section 10 « Milieux fluides et Réactifs » et Ministère de l'enseignement Supérieur et de la Recherche « Sciences pour l'Ingénieur (discipline principale) », « Chimie (secondaire) » ; CNU section 31 « Chimie physique, théorique et analytique » et l'IRSN (Institut de Radioprotection et Sécurité Nucléaire).

PC2A a pris en considération l'avis du précédent comité d'évaluation (2008). En particulier, le projet de fusion de PC2A avec le Département d'Energétique Industrielle (DEI) et Chimie Environnement (DCE) de l'École des Mines de Douai a été abandonné, mais les collaborations scientifiques ont été maintenues avec cet établissement. De nouvelles perspectives scientifiques se sont alors dégagées et ont conduit en septembre 2009 à la signature de l'accord de collaboration portant sur la création du laboratoire commun C3R (Cinétique Chimique, Combustion et Réactivité) avec l'IRSN (Institut de Radioprotection et Sécurité Nucléaire). Cette entité regroupe maintenant PC2A avec l'Université de Lille1, le CNRS et l'IRSN. La jeunesse de ce laboratoire (4 ans d'existence) ne permet pas de formuler un avis approfondi sur les résultats de ce partenariat fort dans chacun des critères proposés par l'AERES, un avis global très favorable sera tout de même rendu.

PC2A est structuré en trois équipes de recherche :

- Physico-Chimie de la Combustion
- Physico-Chimie de l'Atmosphère
- Sécurité Nucléaire : Cinétique Chimique, Combustion, Réactivité

D'une manière générale, le bilan de PC2A a été jugé excellent par le comité d'experts. La production scientifique est remarquable aussi bien en terme de quantité que de qualité avec des publications dans des journaux ou revues internationales à fort facteur d'impact.

L'organisation, appréciée par toutes les catégories de personnel, semble optimale pour une unité de cette taille. Elle est basée sur une large mutualisation des compétences scientifiques, des moyens techniques et du capital humain.

Le rayonnement du laboratoire est une préoccupation majeure du laboratoire. Malgré la faible attractivité de la région et un faible vivier local de doctorants et de post-doctorants, le PC2A parvient à attirer des étudiants et des chercheurs invités de renommée. Le rayonnement de PC2A s'exprime par des conférences données lors de symposium ou colloques internationaux prestigieux, des actions de formation et de transfert de connaissances (écoles, séminaires,...), de communication et de vulgarisation.

#### Appréciation sur la production et la qualité scientifiques

La production scientifique du PC2A est remarquable avec la parution de 107 articles dans des revues à comité de lecture et ouvrages scientifiques, soit un taux de publication moyen de 1,1/ETP/an sur les 5 dernières années (nombre de chercheurs/enseignants-chercheurs : 23, nombre d'ETP : 18,9). Les travaux sont publiés dans des revues scientifiques internationales renommées dans les domaines de recherche du PC2A (revues à fort facteur d'impact) telles que Combustion and Flame, Proceedings of Combustion Institute, Applied Physics A et B, Physical Chemistry, Chemical Physics, Int. J. of Energy for a clean environment, Chemosphere, Journal of Raman Spectroscopy, Atmospheric Environment, Environment Sc. and Tech. Atmospheric Measurement Techniques, etc ainsi que 25 conférences invitées, dont certaines ont été données lors de symposiums internationaux prestigieux. L'adéquation entre les thématiques développées au PC2A et les supports éditoriaux choisis pour leur publication est parfaite.

A ce taux de publication du PC2A dans les journaux, il faut ajouter les nombreuses communications orales ou par voie d'affiches dans des congrès nationaux et internationaux, des contributions dans des revues nationales, voire locales, des conférences à l'occasion de séminaires, etc. On compte ainsi un total de l'ordre de 20 événements de communication scientifique/an/ETP. Ce fort taux montre la forte implication de tous les enseignants-chercheurs et chercheurs pour accroître le rayonnement national et international de l'unité.





Les publications et communications majeures ont porté sur la diffusion de résultats des recherches phare du laboratoire. On citera quelques exemples d'avancées majeures dans la connaissance.

Equipe Physico-Chimie de la Combustion\_: des avancées majeures ont été obtenues en cinétique chimique dans les flammes laminaires avec l'amélioration de la connaissance des mécanismes de formation du NO précoce, en prenant en considération la formation d'espèces intermédiaires telles que NCN et NCO, et de la nucléation des particules de suies, en mettant en évidence le rôle essentiel des précurseurs HAP sur la production des suies. Ces résultats ont été obtenus grâce au développement de mesures spectroscopiques laser couplées (LIF et CRDS pour la cinétique du NO et LII pour la nucléation des suies). L'emploi et le couplage de ces diagnostics ont nécessité des développements importants qui ont conduit évidemment à des publications innovantes dans les domaines de l'optique et de la spectroscopie. Des avancées notables ont été publiées sur la connaissance de l'auto-inflammation de combustibles lourds et légers à basse température obtenus en Machine à Compression Rapide.

Equipe Physico-Chimie de l'Environnement\_: l'originalité des travaux sur la réactivité atmosphérique porte sur la mesure de la qualité de l'air, également liée au développement de techniques laser (FIL pour la détection de OH, Cw-CRDS et FAGE) pour les quantifications respectives de CH<sub>2</sub>O, H<sub>2</sub>O, H<sub>2</sub>O<sub>2</sub>, et de OH, HO<sub>2</sub>. L'unité PC2A est le seul laboratoire français à pouvoir réaliser de telles mesures que peu d'équipes au monde ont les moyens d'effectuer. Ces résultats permettent d'améliorer les connaissances sur la réactivité des polluants dans l'atmosphère au sein d'une communauté scientifique internationale très importante.

PC2A contribue également à l'amélioration des connaissances sur l'effet de la réactivité des aérosols dans l'atmosphère, en particulier sur leur cinétique de vieillissement lors de leur transport. Là encore, c'est l'aspect diagnostic, en laboratoire ou sur le terrain, et l'élaboration de modèles cinétiques qui apportent une reconnaissance mondiale à PC2A.

Equipe Sûreté Nucléaire : bien que plus récente, les études sur la thermodynamique et la réactivité de produits de fission nucléaire ont parfaitement leur place dans l'unité et bénéficient d'actions transverses au sein du laboratoire en impliquant le rôle du Bore avec le Césium et l'Iode dans le combustible. En effet, ces espèces sont d'un grand intérêt en sûreté nucléaire, elles jouent un rôle fondamental lors d'un accident grave lors de leur rejet vers l'extérieur ou de leur présence dans l'enclume de confinement. La réalisation d'un mécanisme réactionnel de l'iode dans l'atmosphère exige comme données d'entrée la connaissance de données météorologiques mais également de paramètres thermo-cinétiques : c'est ce que le PC2A et l'IRSN s'emploient à obtenir. L'enjeu est important étant donné la place que représente l'industrie nucléaire dans l'économie française. Plusieurs articles ont déjà été publiés dans les journaux et symposiums spécialisés en chimie physique, matériaux et énergie nucléaire.

D'autres études, parfois plus ponctuelles ou appliquées, ont donné également lieu à des articles dont la valeur n'est pas à mettre en cause (voir expertises détaillées par équipe).

Au travers de ces publications, on notera la forte complémentarité des recherches entre combustion (source de pollution), environnement (impact des polluants sur la qualité de l'air) et chimie des produits de fission (sûreté nucléaire) qui donne des atouts fondamentaux au PC2A pour rayonner au sein des communautés scientifiques internationales respectives. L'organisation du laboratoire par son directeur et la mutualisation des techniques de spectroscopie laser sont autant de catalyseurs propres à assurer la qualité scientifique des recherches développées au PC2A.

Les ressources financières du PC2A, qui ont fortement augmenté lors des deux précédentes périodes, permettent à l'unité de s'équiper et de développer des recherches de qualité. Le PC2A bénéficie à parts quasi-égales d'un soutien de base de l'université et du CNRS et d'un fort investissement de l'IRSN (apport financier à l'équipe, 6 bourses de thèses, stages post-doctoraux), et de ressources propres venant de projets (ANR, Labex, Réseaux, Europe, ..) et enfin de contrats industriels. La diminution des ressources propres venant des contrats industriels a été largement compensée par le soutien à la recherche sur des projets (ANR, Région, Labex, Europe, etc.), ce qui est conforme à la tendance actuelle de la recherche.

La qualité des recherches développées au PC2A est excellente, la majorité des études sont de classe internationale et profitent de l'environnement scientifique du PC2A et de l'IRSN pour obtenir une excellente reconnaissance. L'ouverture vers de nouveaux enjeux scientifiques, technologiques et sociétaux est exploitée par le PC2A par une communication externe allant de l'international à la diffusion locale de l'information pour sensibiliser le public aux risques environnementaux et motiver les jeunes pour ce type de Sciences.



## Appréciation sur le rayonnement et l'attractivité académiques

La création du laboratoire commun avec l'IRSN est une preuve du rayonnement et de l'attractivité de PC2A. Il s'agit là d'une forme de reconnaissance par un grand centre de recherche français travaillant dans le domaine de la pollution atmosphérique par des contaminations liées à des rejets accidentels de produits radioactifs. L'IRSN a recherché ce partenariat fort pour bénéficier des compétences du PC2A en cinétique chimique, métrologie environnementale afin de mieux comprendre les phénomènes susceptibles de se manifester lors d'un accident nucléaire majeur. Ce partenariat a renforcé la transversalité thématique des équipes.

L'unité PC2A s'efforce de s'impliquer dans la responsabilité de différents projets régionaux, nationaux et européens. On notera comme premier indice de qualité, les responsabilités de son directeur au sein de l'Université Lille 1 où il occupe actuellement la fonction de Vice-Président Recherche. Par sa présence dans les instances universitaires, en s'appuyant sur les atouts de ses chercheurs et enseignants-chercheurs, il renforce les contacts du PC2A avec la région et peut même agir directement sur la politique environnementale locale. Ainsi, l'unité assure des responsabilités importantes au sein de l'axe « Qualité de l'air » et des actions du type « Aérosols : formation, caractérisation, vieillissement et remédiation », projet-phare IRENI du CPER 2007-2013 (GIS Institut de Recherche en Environnement Industriel). Avec le Laboratoire d'Optique Atmosphérique, l'unité PC2A porte le Labex CaPPa « Chemical and Physical Properties of the Atmosphere ». En termes de recherche, formation et innovation, l'unité est impliquée dans la coordination de ce projet et assure la responsabilité de 4 des 6 groupes de tâches. Un autre développement important de PC2A concerne la plate-forme nationale de métrologie optique MÉOL en collaboration avec le Laboratoire de Mécanique de Lille dans le cadre du projet européen FP7-AFDAR. Cette plateforme, spécialisée dans l'étude d'écoulements réactifs et accompagnée par le recrutement d'un IR CNRS, a l'envergure d'un réseau national, permettant de disséminer les compétences en spectroscopie et d'organiser des ateliers thématiques sur ce thème.

L'unité PC2A s'est impliquée dans l'Institut de Recherches Pluridisciplinaires en Sciences de l'Environnement (Fed 4129 - IrePse) qui a pour vocation de structurer et promouvoir des recherches pluridisciplinaires dans le domaine des sciences de l'environnement à Lille et sa région. PC2A participe au Portail d'études de la Qualité de l'AIR (POQAIR) où il contribue à alimenter des données sur la physico-chimie de l'atmosphère. PC2A est impliqué également dans le Centre d'Etudes et de Recherche Lasers et Applications (CERLA). Il a participé à 3 GDR CNRS : le GDR ORANGES (Oxydation pour une Réduction Avancées des Nuisances et des Gaz à Effet de Serre), le GDR EMEI « Edifices Moléculaires Isolés et Environnés » et le GDR SUIES dont le projet vient d'être accepté par le CNRS.

L'implication européenne de PC2A est aussi à souligner. L'unité participe aux projets PhyCAFoR (Physico-Chimie Atmosphérique : Formation par la Recherche) AFDAR et CHIP piloté par l'IRSN.

En s'appuyant sur les compétences académiques de ses équipes et pour contribuer à accroître son rayonnement local, PC2A s'attache à développer des recherches appliquées en lien avec la région (projet PHYTENER de l'ADEME, OXYCHAR du PIE2 CNRS, SYLWATT de l'ARCir régionale, etc), ce qui démontre à nouveau l'existence d'une stratégie globale des acteurs de la recherche à occuper tout l'espace scientifique dans leurs domaines respectifs.

L'exiguïté des locaux limite réellement, mais ne rebute pas toujours, l'accueil de chercheurs et professeurs étrangers. Les conditions de travail ne sont pas en rapport avec l'excellence des recherches développées. Dans une période de restriction de postes, PC2A a pu non seulement maintenir ses effectifs, mais a su recruter 2 enseignants-chercheurs, 2 CR CNRS dont une en mutation, 1 IR CNRS, 1 IE CNRS, 1T CNRS. L'attractivité des doctorants et post-doctorants est bonne (une dizaine de post-doctorants, 7 ATER et une trentaine de doctorants) malgré un très faible vivier d'étudiants locaux issu des Masters et le soi-disant faible attrait climatique de la région Nord-Pas de Calais. Les doctorants apprécient les efforts déployés par le laboratoire pour l'obtention de bourses de thèses et de financements de post-docs (3 post-docs/an en moyenne, 6 post-docs IRSN d'une durée moyenne de 18 mois) ainsi que pour les aides financières apportées pour des séjours à l'étranger (BQR Université, région, etc). Des collaborations scientifiques sont entretenues avec 18 pays.

La renommée des chercheurs a permis qu'ils soient sollicités pour des expertises éditoriales de revues scientifiques, des évaluations de projets nationaux et européens, ou la participation au Comité National de la Recherche Scientifique, etc.

Des manifestations scientifiques, à tous niveaux, sont organisées régulièrement (journée des doctorants PC2A/École des Mines de Douai, journées thématiques portant sur les réseaux locaux, École de Combustion en 2012 soutenue par le CNRS (École Thématique), ateliers thématiques et journées), ... soit un total de 13 événements locaux, nationaux ou européens pendant les cinq dernières années.



Tous ces indicateurs, implication dans plusieurs instances décisionnelles locales, coordination de projets locaux, nationaux (ANR, réseaux d'excellence, etc.) ou européens (FP7), responsabilités de contrats, initiative de création de plates-formes et réseaux, etc. attestent du fort rayonnement du PC2A qui peut se quantifier par un développement de l'unité en terme de personnels et se qualifier par une attente de ses résultats par la communauté scientifique.

### Appréciation sur l'interaction avec l'environnement social, économique et culturel

PC2A, en alliant des études sur les sources de pollution liées à la combustion (formation des NO précoces et des suies) et sur leurs impacts sur l'environnement (qualité de l'air, vieillissement des espèces polluantes) agit directement sur l'environnement économique local et national.

Malgré la forte composante académique de ses recherches, PC2A sait aussi développer, en collaboration avec l'École des Mines de Douai et l'Université de Valenciennes, une activité de recherche appliquée portant sur la combustion (ou cogénération) du charbon pulvérisé et de la biomasse (projet Oxychar, SYLWATT avec TEMPO-Valenciennes). Les compétences acquises en diagnostics spectroscopiques vont permettre d'instrumenter des chaudières semi-industrielles pour caractériser la production de suies (détection des HAP, formation des suies, etc.).

La création du laboratoire commun avec l'IRSN est une preuve supplémentaire de la forte interaction du PC2A avec l'environnement économique qui recherche une sûreté toujours plus grande des centrales nucléaires.

Enfin, PC2A dispose des moyens de diagnostics performants pour la détection et la quantification d'espèces chimiques présentes au niveau de traces dans des flammes et dans l'atmosphère (en particulier un système FAGE), ce qui permet de s'investir dans des mesures in-situ lors de campagnes de mesure hors du laboratoire.

### Appréciation sur l'organisation et la vie de l'unité

L'organisation fonctionnelle de ce laboratoire de taille moyenne en trois équipes de recherche d'importance équivalente est appréciée par le personnel et correspond à l'image que veut se donner le laboratoire. Elle permet d'identifier rapidement les thématiques de recherche et de favoriser une transversalité des actions.

La représentativité des personnels est assurée dans les instances de PC2A qui s'est doté d'une gouvernance pouvant être qualifiée de « standard » avec un conseil de laboratoire, un conseil de direction, un conseil scientifique. Les réunions sont régulières et les débats satisfont les personnels ; des Assemblées Générales sont convoquées régulièrement pour discuter de l'élargissement du périmètre du laboratoire, des locaux, etc. La petite taille de l'unité favorise des contacts directs et informels entre les différents personnels permanents et contractuels. Le règlement intérieur a été approuvé.

L'animation scientifique est importante et satisfaisante au PC2A. Des séminaires internes (avancement des travaux de recherche) et externes sont régulièrement organisés (Labex CaPPa, IRePSE, CPER IRENI, École doctorale, journées scientifiques IRENI).

L'hygiène, la sécurité, la qualité et l'éthique au PC2A sont des préoccupations majeures de la direction et approuvées par l'ensemble du personnel de ce laboratoire sensibilisé aux risques (chimiques, utilisation de lasers, etc.). Les demandes d'inscription à des formations continues sont toujours prises en considération. La qualité de l'accueil des nouveaux entrants est soulignée.

La cohérence des différentes études favorise la mutualisation des moyens financiers (soutien de base, projets ANR, ADEME, Labex, etc), matériels (réacteurs, MCR, métrologie laser) et numériques (code de calcul).

L'Université Lille 1 classe le PC2A comme prioritaire pour conduire la politique scientifique qu'il a affichée. Au travers d'opérations d'envergures telles que le Labex CaPPa et le laboratoire commun avec IRSN, etc, les thématiques scientifiques sont jugées pertinentes et cohérentes rejoignant parfaitement les objectifs régionaux. Des crédits de l'université ont été débloqués pour soutenir la plate-forme régionale MéOL, qui pourrait acquérir une destinée nationale avec un soutien du CNRS, et un BQR est souvent attribué au PC2A. L'université soutient le PC2A pour la création d'emplois (poste IR, secrétariat). Elle se réjouit de sa forte implication dans la formation avec notamment la responsabilité d'un Master qui s'appuie sur le laboratoire. La rénovation et l'extension des locaux du PC2A devraient débiter dans les prochains mois (2014-2016). Les aménagements seront conformes aux demandes de PC2A.



Du côté de la tutelle CNRS, l'INSIS considère PC2A comme un très bon laboratoire, et s'efforce à maintenir une masse salariale au même niveau que celle de l'Université Lille 1. Des relations avec l'INSU ou l'INEE pourraient être intensifiées.

Le collège des BIATSS-ITA est satisfait de l'organisation interne du laboratoire et apprécie le dialogue constant qui est établi avec l'équipe de direction, les chercheurs et enseignants-chercheurs et les doctorants. De nombreux points positifs ont été signalés, comme la création de postes (1 IE, 1 Technicien CNRS, 1 ADJ PC2A et un IR Université Lille 1). Le collège espère le remplacement d'un prochain départ à la retraite d'un AJT. La sensibilisation du laboratoire à l'Hygiène et à la Sécurité est fortement appréciée par le personnel exposé quotidiennement aux risques de chimie de la combustion, des polluants atmosphériques, de l'utilisation de lasers. Les demandes de formation du personnel sont toujours soutenues. En revanche, il est déploré une absence de promotion du personnel de l'université (aucune promotion de techniciens depuis de très nombreuses années).

Les chercheurs et enseignants-chercheurs apprécient le mode de fonctionnement de l'unité qui favorise l'implication dans les opérations de recherche. La mutualisation des moyens, la mise en commun des compétences, les prêts de matériels, l'implication des personnels techniques ainsi qu'une gestion efficace des ressources favorisent le développement de nouveaux projets et le déroulement d'études dans d'excellentes conditions. Une délégation de signature pour certains achats de consommables serait souhaitée pour éviter des délais lors de l'absence du directeur.

La communication interne de l'information pour les appels à projets, la création de postes, les achats et le fonctionnement démocratique de l'unité sont appréciés. Une grande confiance est accordée à la prochaine équipe de direction.

Le point noir du PC2A est incontestablement l'exiguïté et le vieillissement des locaux. Tout le monde attend avec impatience l'extension et la rénovation du laboratoire pour l'implantation de nouveaux dispositifs expérimentaux, l'accueil décent des chercheurs et professeurs, et l'impact sur la vie du laboratoire (salle de réunion, convivialité, etc.).

L'inquiétude sur l'évolution des carrières des enseignants-chercheurs et des chercheurs, l'alourdissement des charges administratives, le faible vivier de recrutement local de doctorants et enfin le manque d'attractivité de la région pour l'accueil de doctorants, de chercheurs invités assombrissent légèrement le tableau, en dépit de la qualité scientifique des équipes.

Les doctorants sont satisfaits de leur intégration au sein du laboratoire et des relations avec l'École Doctorale. La plupart des thèses se terminent en moins de 38 mois. Les doctorants apprécient leur formation par la recherche, le suivi de leurs travaux par leurs encadrants (rapports et séminaires périodiques, participation à des congrès internationaux), les possibilités que PC2A et l'ED leur donnent pour des échanges avec la communauté scientifique internationale, le financement de stages hors laboratoire et les incitations à effectuer des thèses en co-tutelle ou avec le label européen, l'information sur les qualifications et l'effort pour obtenir des postes d'ATER. Les étudiants sont satisfaits des prolongations de financement jusqu'à la soutenance ; les étudiants étrangers ont sensibilisé le Comité au problème de renouvellement des cartes de séjour en fin de financement.

Le site web de l'unité est synthétique et reporte les principales informations sur le laboratoire. Il est à jour et reflète les actions de recherche développées. Etant donné la production scientifique des équipes, des liens vers la liste des publications majeures seraient appréciés.

Des demandes récurrentes d'extension sont déposées depuis de très nombreuses années (environ 2000) par la direction à l'université. L'exiguïté du laboratoire a été soulignée par l'ensemble des collèges (2 chercheurs minimum par bureau, doctorants entassés à 5 dans une petite pièce, techniciens ou ingénieurs avec leur atelier ou leur bureau en sous-sol,...). Les recrutements de ces dernières années n'ont fait qu'empirer le problème. Le déblocage de crédits est attendu dans les prochains mois pour une rénovation et extension des locaux de PC2A.

### Appréciation sur l'implication dans la formation par la recherche

L'unité PC2A est rattachée à l'École Doctorale n°104 de l'Université Lille 1 « Sciences de la Matière, du Rayonnement et de l'Environnement SMRE » option : Optique et Lasers - Physico-Chimie - Atmosphère (OLPCA).



Les enseignants-chercheurs et certains chercheurs sont impliqués et exercent plusieurs responsabilités dans les unités d'enseignement (UE) et les filières (Master Chimie, Spécialités ETE et Chimie et Matériaux du Nucléaire). Ces formations, dispensées dans les DUT, Licences et Masters (chimie, informatique, HSQE, géosciences et environnement, etc.) sont généralement très liées aux thématiques de PC2A. L'unité est responsable des relations internationales de la formation continue de l'IUT A, ainsi que des parcours renforcés en licence SESI, TP (« Thermodynamique avancée, Physico-Chimie des mélanges et cinétique), formation continue, groupe pédagogique CaPPa, Parcours Nucléaire Master, etc.

L'unité a été fortement impliquée dans l'organisation de manifestations en formation pour la recherche, elle organise périodiquement l'atelier thématique MeOL CNRS (2012) sur les « Méthodes spectroscopiques pour l'analyse de milieux réactifs » (20 participants), a pris en charge l'organisation de l'« École de Combustion 2012 » (100 stagiaires), du Workshop Int. Laser Induced Incandescence 2012 (50 participants), de la Journée couplage Cinétique/Turbulence/Détonation/Plasma en 2013 (25 participants), et a été le co-organisateur du Colloquium of Diagnostics session, 33rd symposium of combustion, en 2010 à Beijing, des Journées biennales Interdisciplinaires de la Qualité de l'Air (80-100 participants), du Workshop Int. des réseaux Marie Curie TOTECAT-Lille 1 et Marie Curie BREATHE-Univ. Bristol, de l'École d'été « Chimie Atmosphérique » en 2008, des Journées de Cinétique et Photochimie en Phase gazeuse en 2011, de la Journée Interface Chimie - Spectroscopie Atmosphérique en 2011, des Journées Techniques du réseau de recherche Santé en Environnement Intérieur (RSEIN) et de l'observatoire de la qualité de l'air « Les particules dans l'air intérieur ».

Le laboratoire est très actif dans l'organisation de ces très nombreuses manifestations de transfert de connaissances, de séminaires internes et externes (réunions d'avancement des travaux de recherche, journées des doctorants et scientifiques du Labex). PC2A inscrit ses doctorants aux Écoles thématiques (en particulier l'École de Combustion, et l'École internationale « Marie Curie en Physico-Chimie de l'atmosphère »).

La formation de tous les personnels reste une priorité de PC2A. Les doctorants, chercheurs et enseignants-chercheurs, ainsi que les ITA, BIATOS sont fortement encouragés à suivre les formations collectives en sécurité laser, risques chimiques, électriques, matériels, logiciels.

Le directeur de l'École Doctorale SMRE n°104 de l'Université Lille 1 « Sciences de la Matière, du Rayonnement et de l'Environnement SMRE » a souligné le fort soutien de l'ED au PC2A : « c'est un laboratoire phare de Lille 1 qui bénéficie d'un réel appui de la Région ». Le nombre de doctorants au PC2A est satisfaisant avec un bon taux d'encadrement (12 HDR pour 23 EC-C, soit  $\approx 2$  doctorants/ETP). La durée moyenne des thèses est de 40,1 mois avec des soutenance la plupart du temps avant 38 mois. Une aide financière complémentaire est assurée aux étudiants étrangers dont le montant de la bourse serait insuffisant ; le financement est toujours assuré au-delà des 36 mois de bourse jusqu'à la soutenance. La charte des thèses est appliquée. Les bourses ne sont que très rarement non pourvues. L'intégration professionnelle des doctorants est bonne (sur 26 doctorants, 6 sont ingénieurs, 7 ont intégré l'enseignement supérieur ou le CNRS, 11 sont encore post-doctorants, seuls deux restent à la recherche d'un emploi) le bilan est donc extrêmement satisfaisant.

Pour conclure, PC2A est fortement impliqué dans des actions de formation par et pour la recherche au travers de filières liées à l'université (DUT, licences, Masters, ED 104 SMRE), grâce à des initiatives individuelles ou collectives pour l'organisation d'Écoles et de Journées thématiques, de séminaires, d'échanges de connaissances localement, nationalement ou internationalement. Le grand nombre d'événements organisés, suivi par toute une collectivité scientifique, atteste du rayonnement de PC2A.

### Appréciation sur la stratégie et le projet à cinq ans

Le projet à 5 ans de PC2A présente une continuité dans la structuration réussie du laboratoire ainsi que dans les thématiques affichées. Le programme scientifique est clair, il s'appuie sur le soutien de programmes locaux, nationaux ou européens. Du point de vue interne, la large mutualisation des connaissances et des diagnostics ainsi que l'esprit d'ouverture vers des nouveaux projets de recherche collaborative entre les équipes, les laboratoires et les partenariats, fourniront des atouts sérieux au laboratoire pour renforcer son excellence.

Equipe 1 : Physico-Chimie de la Combustion

Thème 1 (Auto-inflammation et combustion basse température)

La continuité dans l'action sur l'interaction plasma/auto-inflammation dans la Machine à Compression Rapide est à poursuivre d'autant plus qu'elle s'appuiera sur le développement de mécanismes de cinétique chimique et de diagnostics laser qui sont le cœur de la compétence du PC2A.



## Thème 2 (Flammes : diagnostics laser et mécanismes chimiques)

Les compétences actuelles sur le développement de diagnostics doivent être mises en valeur pour l'analyse des molécules-traces dans les flammes (formation des NOx, processus de nucléation des particules de suie). L'objectif scientifique est judicieux d'autant plus qu'il s'appuie sur une méthodologie prometteuse de couplage de diagnostics optiques / modélisation pour l'obtention de constantes physiques inconnues nécessaires pour le traitement des données expérimentales. On souligne la volonté d'ouverture vers de nouvelles thématiques. L'étude de la nucléation hétérogène des gouttelettes d'eau et des cristaux de glace à partir d'aérosols de suies, phénomène en lien étroit avec les traînées de condensation des avions dans l'atmosphère, en est un bon exemple. Les implications dans des projets déjà acquis, ou en voie de confirmation, donneront les moyens à PC2A d'atteindre les objectifs visés.

## Thème 3 (Suies et aéronautique)

L'implication de cette équipe dans plusieurs projets importants sur la formation des suies lui permettra de rester un acteur reconnu et productif dans le domaine. Il faut encourager la prise de risque réelle des recherches émergentes sur le rôle des suies comme noyaux de condensation. Ce dernier sujet, qui est extrêmement important, est actuellement peu abordé par les équipes en France et bénéficie d'un environnement favorable, grâce au Labex CaPPa et à la proximité des collègues de l'équipe Physico-Chimie de l'Atmosphère qui travaillent sur la réactivité et le vieillissement des particules dans l'atmosphère.

## Thème 4 (Valorisation en lien avec la combustion)

Malgré un caractère plus applicatif vis-à-vis des thèmes d'excellence précédents, le projet est de maintenir cette recherche pour transférer et valoriser les acquis en diagnostics laser sur des systèmes semi-industriels complexes. De plus, les relations avec les universités et écoles voisines sont des facteurs structurants appréciés.

L'équipe devra s'efforcer de rester centrée sur la caractérisation des flammes pour affirmer, dans sa communication, sa forte appartenance à la communauté combustion.

## Equipe 2 : Physico-Chimie de l'Atmosphère

Le projet en chimie en phase gazeuse s'inscrit globalement dans la continuité du bilan et est donc de très bonne qualité. L'ambition de poursuivre l'étude de la chimie du radical HO<sub>2</sub> est tout à fait pertinente ; le développement d'un réacteur polyvalent couplé à un spectromètre de masse utilisant le rayonnement synchrotron SOLEIL est une idée novatrice et ambitieuse.

En matière de chimie hétérogène, le projet visant à faire converger des méthodologies sur la détermination des propriétés optiques des aérosols est louable d'autant plus qu'il sera soutenu par le Labex CaPPa et qu'il permettra de faire le lien avec les activités « Suie » de l'équipe de Physico-Chimie de la Combustion.

En ce qui concerne la métrologie des polluants, après le succès du développement du FAGE, il serait certainement souhaitable que l'équipe se rapproche, pour valoriser ses résultats, de la communauté des géochimistes de l'atmosphère dont les besoins en matière de quantification radicalaire sont très importants.

Malgré l'intérêt indéniable des outils développés, le risque de dispersion vers des thématiques assez diverses (poêles à pétrole, capacité dépolluante des plantes etc.) est à éviter. Le développement de capteurs miniatures, autonomes, rapides au service de la mesure des micro-contaminants atmosphériques est certainement très prometteur.

La partie modélisation du projet traduit une forme de dispersion des thématiques et des outils avec des objectifs affichés parfois à la limite des compétences de l'équipe et relève parfois même de missions qui devraient incomber logiquement aux agences de surveillance de la qualité de l'air.

## Equipe 3 : Sûreté Nucléaire : Cinétique chimique, Combustion et Réactivité (C3R)

Le projet de la jeune équipe « Sûreté Nucléaire » s'articule autour des thèmes phare depuis 2009. Il se développera dans le cadre de l'ANR MIRE, du LabEx CaPPa et d'une collaboration avec l'Université de Bratislava (Slovaquie). Les objectifs fixés seront sans aucun doute atteints étant donné la forte ressource humaine mobilisée sur



cet axe (encadrants, doctorants et post-doctorants). Le couplage entre chimie théorique, mesures en conditions de laboratoires, développement de mécanismes cinétiques aussi bien pour les évolutions des espèces en condition d'accidents graves que pour leur devenir dans l'atmosphère, est sans aucun doute une démarche scientifique de haut niveau. Ce couplage sera à même d'apporter les améliorations aux codes de calculs du partenaire IRSN, pour, in fine, améliorer les prédictions des codes thermo-hydrauliques. La poursuite de la problématique incendie, quant à elle, paraît être d'un intérêt limité et son maintien semble peu justifié.

En conclusion, le projet à cinq ans se situe dans la continuité des grands axes thématiques qui ont fait l'identité et la renommée du laboratoire, bases sur lesquelles les jeunes équipes pourront pleinement s'appuyer. Le projet est cohérent, il s'attaque à des enjeux scientifiques majeurs liés à physico-chimie de la combustion, de l'environnement et de la sûreté nucléaire. Des thèmes nouveaux, ancrés sur les compétences reconnues des équipes, émergent et devraient permettre de maintenir le niveau d'excellence de la production et du rayonnement du laboratoire.

Le comité d'experts reconnaît unanimement la valeur scientifique des recherches du laboratoire, soutient le projet à 5 ans élaboré par PC2A et félicite son directeur et le porteur du projet.

## 4 • Analyse équipe par équipe

**Équipe 1 :** Physico-Chimie de la Combustion

**Nom du responsable :** M<sup>me</sup> P. DESGROUX et M. J.F. PAUWELS

**Effectifs :**

Effectifs de l'équipe	Nombre au 30/06/2013	Nombre au 01/01/2015
<b>N1</b> : Enseignants-chercheurs titulaires et assimilés	6 (4,4)	6 (4,4)
<b>N2</b> : Chercheurs des EPST ou EPIC titulaires et assimilés	3	3
<b>N3</b> : Autres personnels titulaires (n'ayant pas d'obligation de recherche)	2 (1,5)	2 (1,5)
<b>N4</b> : Autres enseignants-chercheurs (PREM, ECC, etc.)		
<b>N5</b> : Autres chercheurs des EPST ou EPIC (DREM, Post-doctorants, visiteurs etc.)	2	
<b>N6</b> : Autres personnels contractuels (n'ayant pas d'obligation de recherche)		
<b>TOTAL N1 à N6</b>	<b>13</b> <b>(10,9)</b>	<b>11</b> <b>(8,9)</b>

Effectifs de l'équipe	Nombre au 30/06/2013	Nombre au 01/01/2015
Doctorants	6 (5,5)	
Thèses soutenues	10	
Post-doctorants ayant passé au moins 12 mois dans l'unité	2	
Nombre d'HDR soutenues	1	
Personnes habilitées à diriger des recherches ou assimilées	6	7





## • Appréciations détaillées

### Appréciation sur la production et la qualité scientifiques

L'équipe « Physico-Chimie de la Combustion » développe ses recherches autour de 4 thématiques :

- L'auto-inflammation et la combustion à basse température ;
- Les flammes : Diagnostics laser et mécanismes chimiques ;
- Suies et aéronautique ;
- Valorisations en lien avec la combustion.

#### Thème 1 : Auto-inflammation et Combustion Basse Température

L'équipe de « Physico-Chimie de la Combustion » développe depuis de nombreuses années des études, majoritairement expérimentales, sur l'auto-inflammation et la combustion des hydrocarbures à basse température. Le dispositif utilisé est la Machine à Compression Rapide (MCR) que l'équipe a couplé à des diagnostics analytiques permettant de doser les principales espèces et les polluants émis lors de la combustion d'hydrocarbures lourds (carburants diesel). Cette activité est réalisée dans le cadre de collaborations avec deux laboratoires CNRS et deux industriels français (PSA-Peugeot-Citroën et TOTAL).

Cette méthodologie est également appliquée à l'étude de l'auto-inflammation du gaz naturel dans les conditions représentatives des moteurs en partenariat avec GDF-Suez. Deux articles ont été publiés.

Une nouvelle étude porte sur l'impact d'une décharge plasma sur l'initiation de mélanges combustibles pauvres dans le cadre du programme ANR, PlasmaFlame (2012-2015) en collaboration avec EM2C, P', LPP et IFPEN. Une thèse en co-tutelle avec le LPP est en cours.

Les résultats de ces travaux sont de grande valeur scientifique, ils s'appuient sur de nombreuses collaborations avec des laboratoires et la participation à des projets ; ils ont fait l'objet de 5 publications dans des journaux internationaux à fort facteur d'impact. Deux thèses ont été soutenues en 2008, dont une en collaboration avec un laboratoire CNRS.

Les recherches sur les méthodes de chimie théorique visent à déterminer des paramètres thermocinétiques de systèmes chimiques d'intérêt pour la combustion. Des constantes de vitesses de réaction de radicaux peroxydes-aromatiques et des données thermodynamiques ont été déterminées pour plusieurs types d'aromatiques. Bien que la qualité des résultats soit indéniable (4 articles sur la période 2008-2012), la faible cohérence avec les autres études de PC2A et l'absence d'implication dans des projets financés doivent être signalées.

#### Thème 2 : Flammes : diagnostics laser et mécanismes chimiques

L'objectif ici est la détermination des mécanismes réactionnels responsables de l'émission des polluants gazeux et particulaires. Ces travaux s'appuient largement sur le développement et l'application de techniques laser et spectroscopiques avancées. Les diagnostics optiques, développés au sein de cette équipe, représentent un des points d'excellence de PC2A ; ils peuvent se scinder en deux groupes.

La première famille de diagnostics se situe dans la continuité des activités de recherche du précédent contrat, elle concerne :

- *Cavity Ring Down Spectroscopy* (CRDS);
- *Laser-Induced Incandescence* (LII) ;
- Fluorescence Induite par Laser (FIL) ;
- Spectrométrie de masse.

La seconde famille s'appuie sur des innovations technologiques plus récentes centrées sur :

- le couplage de la collection de gaz chauds par sonde de prélèvements avec la détection des HAP par Fluorescence Induite par Laser LIF en jet froid ;
- la *Laser Induced Incandescence* LII à deux couleurs ;
- le couplage de techniques de mesures pour déterminer simultanément plusieurs grandeurs physiques au sein d'un écoulement ;



- le développement d'installations expérimentales originales facilitant l'analyse de processus physiques élémentaires. Citons comme exemple la flamme « TARGET ».

Les recherches entreprises pendant le contrat quinquennal ont permis d'obtenir des résultats scientifiques marquants et inédits sur les mécanismes réactionnels gouvernant la formation des polluants gazeux et des particules. Citons en particulier :

- le dosage des molécules traces de NCN, NCO, et dans une moindre mesure, de HCN. Ces travaux remarquables et uniques ont permis d'améliorer et de quantifier plus précisément les mécanismes réactionnels de formation du NO précoce. Notons que ces travaux s'appuient sur le développement d'outils puissants de simulation qui ont permis de fournir des données spectroscopiques encore inaccessibles à ce jour comme par exemple les sections efficaces d'absorption de ces espèces chimiques à haute température ;
- la détection sélective et quantitative des molécules de HAP (1-3 cycles benzéniques) dans des flammes de méthane ;
- le rôle de ces HAP sur les mécanismes de formation des particules de suies ;
- l'impact de la composition chimique des carburants oxygénés sur la formation des suies ;
- la détermination expérimentale des propriétés physiques des suies indispensables à la simulation des signaux de mesures de LII.

Ces études, d'un haut niveau scientifique, ont débouché sur une production scientifique remarquable se traduisant notamment par un nombre élevé d'articles dans des revues à comité de lecture possédant un fort facteur d'impact. La qualité de ces études, en termes de résultats et de publications, positionne cette équipe de recherche parmi les meilleures au monde. Cette reconnaissance internationale, et bien évidemment nationale, repose également sur de nombreuses coopérations scientifiques locales, nationales et internationales mettant en exergue le dynamisme et l'excellence scientifique de cette équipe.

Parallèlement à ces activités, l'équipe met en place des thèmes transversaux en complète synergie avec les autres équipes de PC2A de manière à apporter ses compétences sur le développement de diagnostics de pointe et son savoir-faire sur la modélisation cinétique sur des thématiques centrées sur l'environnement et sur le nucléaire.

#### Thème 3 : Suies et Aéronautique

L'équipe s'est également impliquée depuis plusieurs années dans la thématique sur la 'formation des suies', elle est depuis mondialement reconnue pour ses travaux sur la métrologie optique des particules et de ses précurseurs. Il faut citer les études sur les molécules HAP, avec une collaboration réussie avec le laboratoire PhLam (Lille 1). Grâce à ses compétences, une partie des efforts s'oriente maintenant vers l'impact des suies aéronautiques sur la formation des noyaux de condensation dans l'atmosphère. Cette thématique est récente mais bien affirmée, en témoigne le recrutement d'un chargé de recherche sur ce sujet et la participation de PC2A au programme CORAC MERMOSE. L'absence actuelle de valorisation en terme de production scientifique est à attribuer uniquement à la récente identification de cette thématique.

#### Thème 4 : Projets de recherche et valorisation en lien avec la combustion

Ces recherches sont à caractère plus applicatifs. PC2A s'applique à partager des collaborations avec ses partenaires régionaux. Plusieurs projets nationaux sont achevés, en cours ou programmés. On citera :

- le projet national PHYTENER (2009-2013), soutenu par l'ADEME implique les Universités Lille 1, Lille 2, ULCO et de Franche Comté. Il porte sur le développement de la phyto-stabilisation des sols contaminés par des métaux à des fins énergétiques. Pour PC2A, il s'agissait de tester la combustion de la biomasse polluée par des éléments-traces métalliques (ETM) et de tester la teneur des gaz brûlés en polluants issus des ETM (Zn, Pb et Cd), l'objectif étant l'exploitation d'une chaudière pilote située dans une zone polluée (Site Metaleurop, Pas-de-Calais) ;

- le projet OXYCHAR vise, en collaboration avec le département Energétique Industrielle de l'École des Mines de Douai, à étudier l'oxy-combustion du charbon pulvérisé avec ou sans ajout de biomasse. Le banc d'essais développé permet d'étudier le comportement des mélanges (dévolatilisation, cinétique de combustion, caractérisation des semi-cokes..) dans des conditions d'oxy-combustion. Ce projet bénéficie du soutien du CNRS (PIE, 2010-2013) et d'une allocation de thèse Mines Douai/Région ;



- le projet "SYLWATT", ARCir régional (2011-2014), porte sur la mise en place de la co-génération bois (production de chaleur et d'énergie électrique par une machine à air chaud). Il fait l'objet d'une collaboration avec le laboratoire TEMPO-EA4542 de l'Université de Valenciennes (UVHC) et la société Enerbiom. PC2A est chargé de mesurer en temps réel les fractions volumiques de suies à l'échappement de la chaudière par la technique LII. Une post-doctorante est affectée à ce projet. Bien que la production scientifique de cette dernière thématique soit moindre, l'intérêt de ce partenariat régional et son impact économique sont à soutenir.

La production scientifique est remarquable avec 70 publications (43 ACL, 4 OS, 2 ACLN, 21 ASCL), 87 communications (29 ACTI, 20 ACTN, 30 AFFI, 8 AFFN), 10 conférences invitées, 1 HDR, 10 thèses soutenues, et 20 actions de valorisation (7 VF, 13 VI), soit 1,16 ACL/ETP/an ou 4,24 publications et communications/ETP/an.

### Appréciation sur le rayonnement et l'attractivité académique

Bien que peu favorisée par un vivier universitaire local faible en nombre, l'attractivité de l'équipe est très correcte. Elle a permis d'attirer sur le quinquennal 16 doctorants, 9 post-doctorants et ATER et a bénéficié de la présence de 3 chercheurs invités de renommée (USA, Suède et Royaume-Uni).

La notoriété de ses chercheurs a permis à l'équipe d'exercer des responsabilités dans des projets (Co-direction du Labex CaPPA, responsabilité du Work Package 5 (2012-2019)), et de participer à des actions d'évaluation :

- participation au Comité National du CNRS (2008-2012) ;
- participation au Conseil Scientifique et au Conseil d'Administration de l'Université Lille 1 ;
- sollicitations pour des évaluations de projets nationaux et internationaux ;
- invitations à des revues éditoriales et expertises de journaux scientifiques.

L'excellence de l'équipe l'a conduit à participer à l'évaluation internationale des études menées en machine à compression rapide et à la mise en place d'une base de données partagée par la communauté internationale.

Grâce à ses collaborations académiques, l'équipe a organisé plusieurs manifestations scientifiques de renommée internationale. On citera :

- l'École Nationale de Combustion du Groupement Français de Combustion et du CNRS 2012 qui a réuni la communauté française de combustion pour la formation des futurs chercheurs en herbe (Ambleteuse, 8-15 Juin 2012);
- le workshop international sur la mesure de particules de suie par Laser Induced Incandescence (LII), (Le Touquet, 9-11 Mai 2012) ;
- la journée (nationale) couplage Cinétique/Turbulence/Détonation/Plasma (Villeneuve d'Ascq, 2013) ;
- la journée scientifique (régionale) IRENI (Villeneuve d'Ascq, 2011) ;
- et surtout, la session « Diagnostics » du 33th Symposium International of Combustion qui s'est tenue à Beijing (Chine) en 2010 et qui est considéré comme un événement incontournable dans le domaine de la combustion.

Les partenariats académiques sont nombreux ; l'équipe entretient des relations fortes avec 13 partenaires locaux. Les collaborations nationales sont également nombreuses (9), on citera le CETHIL-Lyon (UMR 5008), CINaM-Marseille (UMR 7325), ISA-Lille, CORIA-Rouen (UMR 6614), LPP-Palaiseau (UMR 7648), EM2C-Paris (UPR 288), ICARE-Orléans (UPR 3021), Institut Fresnel-Marseille (UMR 6133), Institut Pprime-Poitiers (UPR 3346). A l'international, les relations sont entretenues avec 10 universités : Cambridge and Bristol Universities (Royaume Uni), University of Strathclyde (Ecosse), University of Galway (Irlande), University of Lund (Suède), University of Duisburg/Essen (Allemagne), Politecnico di Milano (Italie), NRC Ottawa (Canada), Lawrence Livermore National Laboratory (USA), Argonne National Laboratory (USA).

Le rayonnement se traduit également par la participation à des projets d'envergure (projets ANR, CPER, industriels, développement d'une plateforme, co-direction d'un Labex, etc).



## Appréciation sur l'interaction avec l'environnement social, économique et culturel

L'équipe interagit avec l'environnement économique par sa participation :

- à des réseaux dans lesquels elle est très active et leader (plateformes MéOL et CERLA, ETTs Gaz de France - Ministère, GDR CNRS (Oranges, EMIE)) ;
- à des programmes régionaux (CPER IRENI (2007-2013), Axe "Qualité de l'air", Actions "Formation, caractérisation, vieillissement des particules d'aérosols" et "Pollution atmosphérique, remédiation"; Action de Recherche Concertée d'initiative régionale (ARCir) ; Région NPDC SYLWATT (2011-2014) ;
- à des programmes nationaux (Labex CaPPA (WP 1, 5, 6 ; PIA 2012-2019) ; ADEME PHYTENER (2009-2013)) ;
- à des programmes de recherche avec les organismes et EPIC (CNRS OXYCHAR (2010-2013) ; ONERA PEA IMOTEP (2010) ; CORAC MERMOSE (2012-2015) ; IRSN "Formation du méthane dans le circuit primaire" (2008-2009) ; IRSN "Pré-étude sur la réactivité de produits de fission dans des flammes HI/H<sub>2</sub>/H<sub>2</sub>O/O<sub>2</sub>/Ar" (2008-2009) ;
- à des projets de l'Agence Nationale de la Recherche (ANR BLANC SOOT (2008-2010) ; ANR BLANC NO-Mecha (2009-2013) ; ANR BLANC PLASMAFLAME (2012-2015) ; ANR Thématique TDM "Transport Durable et Mobilité" ASMAPE (2014-2017) ;
- à des programmes européens (FP7-TOTECAT, (2006-2010) ; FP7-AFDAR (2010-2013) ; Programme COST CM0901 (2011-2013) KINCOM "Kinetics of combustion" ;
- au programme Hubert Curien (Alliance (Strathclyde, 2009) ; Alliance (Cambridge, 2009) ;
- à des partenariats industriels (ENERBIOM (dans projet SYLWATT), GDF SUEZ, SNECMA Moteurs (MERMOSE et ANR ASMAPE), PCA (ANR ASMAPE).

Le projet national PHYTENER (2009-2013), soutenu par l'ADEME implique les Universités Lille 1, Lille 2, ULCO et de Franche Comté. Le projet OXYCHAR vise, en collaboration avec le département Energétique Industrielle de l'Ecole des Mines de Douai, à étudier l'oxy-combustion du charbon pulvérisé avec ou sans ajout de biomasse. Le projet "SYLWATT", ARCir régionale (2011-2014), porte sur la mise en place de la co-génération bois (production de chaleur et d'énergie électrique par une machine à air chaud).

## Appréciation sur l'organisation et la vie de l'équipe

La grande synergie entre les équipes, renforcée par une large mutualisation des compétences, des moyens techniques et du capital humain rend difficile d'apporter une appréciation différenciée par équipe. Aussi, on se référera à l'avis général donné sur le laboratoire.

## Appréciation sur l'implication dans la formation par la recherche

L'implication de l'équipe dans la formation par la recherche est à souligner. On rappellera que sur la période 2008-2013, 10 thèses ont été soutenues et que 7 post-doctorants ont été accueillis. Plusieurs manifestations à caractère éducatif ont été organisées, en particulier l'atelier thématique CNRS MeOL (2008, 2011) et l'Ecole de Combustion CNRS 2012.

Au sein de l'université, l'équipe a la responsabilité du master de chimie (2008-2012), elle assure la responsabilité de l'axe "Qualité de l'air" et de l'action "Remédiation" du CPER (2007-2013).

En interne, des séminaires périodiques étudiants/permanents viennent compléter la forte implication de l'équipe dans le renforcement de la formation des étudiants.

## Appréciation sur la stratégie et le projet à cinq ans

### Thème 1 : Auto-inflammation et Combustion Basse Température

Le thème portant sur la « Combustion Basse Température » propose la poursuite des études sur :

– l'interaction plasma-auto-inflammation dans la machine à compression rapide (programme ANR PlasmaFlame et participation au réseau international de benchmark). Des outils de diagnostics appropriés devront alors être développés afin de relier l'impact de la présence de la décharge sur le mécanisme cinétique chimique de cette auto-inflammation. Ce développement représente un réel défi au vu du temps restant à consacrer à cette étude.

- la thématique chimie théorique concerne l'étude des radicaux ester-peroxy en relation avec l'auto-inflammation de biodiesel. Cette activité semble isolée au sein de l'équipe n'apparaissant pas intégrée dans des projets, n'impliquant pas de doctorants (auto-inflammation basse température des hydrocarbures, de type biodiesel). Un rapprochement avec les collègues serait souhaitable.

Le comité d'experts estime que les efforts portant sur les activités autour de la machine à compression rapide sont à privilégier.

### Thème 2 : Flamme : diagnostics laser et mécanismes chimiques

Le projet à cinq ans se place dans la continuité des développements d'outils expérimentaux et de simulation pour l'analyse des molécules traces dans les flammes (formation des NO<sub>x</sub>, processus de nucléation des particules de suie). L'extension de la technique de détection des HAP par LIF en jet froid aux molécules lourdes comportant 5-7 cycles benzéniques est ambitieuse et prometteuse. Cet objectif permettra de renforcer les coopérations avec notamment le prestigieux laboratoire NRC (Canada) spécialiste dans l'analyse des particules de suies et l'Université de Lund.

Sur ce même thème, le couplage de diagnostics optiques est très prometteur ; il permettra d'approfondir la compréhension des mécanismes de nucléation de particules de suies, processus physique toujours mal élucidé à ce jour. La démarche consistant à mettre en place des couplages systématiques expérience/modélisation doit être soulignée et soutenue. Les compétences académiques acquises ont la vocation à être utilisées à des finalités plus applicatives (ANR ASMAPE associant des industriels tels que Peugeot et Safran) avec pour but final la simulation de la formation des suies dans les moteurs automobiles et aéronautiques fonctionnant avec des carburants de compositions chimiques différentes. Les recherches sur la formation des NO<sub>x</sub>, qui doivent se poursuivre par de nouvelles coopérations internationales (Université de Kiel) en associant expérience/simulation pour le dosage de molécules traces pour déterminer leurs rôles dans les mécanismes réactionnels impliqués, sont également à encourager fortement.

L'expertise de cette équipe constitue un élément vecteur pour la mise en place d'actions transversales inscrites dans le prochain programme quinquennal. En commun avec l'équipe « Physico-Chimie de l'atmosphère », un projet, soutenu par le CORAC et le Labex CaPPa, porte notamment sur l'étude de la nucléation hétérogène des gouttelettes d'eau et des cristaux de glace à partir d'aérosols de suie, phénomène en lien étroit avec la formation par les avions des traînées de condensation dans l'atmosphère. Avec l'équipe « Sûreté nucléaire », il est prévu la détection d'espèces chimiques d'intérêt nucléaire.

La volonté d'ouverture vers de nouvelles thématiques représente indéniablement une opportunité qui ne peut que renforcer l'excellence de cette équipe de recherche. Le laboratoire doit veiller à ne pas affaiblir les recherches essentielles portant sur la thématique historique de la Physico-Chimie de la Combustion (études des phénomènes dans des flammes), thématique d'importance fondamentale pour la communauté scientifique française et internationale en combustion.

### Thème 3 : Suies et Aéronautique

L'implication de l'équipe dans plusieurs projets importants portant sur la formation des suies (ANR, Labex, Région,...) lui permettra de rester un acteur reconnu et productif dans le domaine. Le démarrage d'études sur le rôle des suies comme noyaux de condensation constitue une prise de risque réelle mais étant donné l'importance du sujet et le faible nombre d'équipes impliquées en France sur cette thématique, cette initiative doit être fortement encouragée. Il faut souligner que cet investissement bénéficiera d'un environnement favorable, grâce au Labex CaPPa et surtout de la proximité des collègues de l'équipe de « Physico-Chimie de l'Atmosphère » qui possède de fortes compétences sur la réactivité et le vieillissement des particules dans l'atmosphère.



#### Thème 4 : Projets de recherche et valorisation en lien avec la combustion

Les études développées sur ce thème avec l'École des Mines de Douai et l'Université de Valenciennes (UVHC) présentent un caractère plus applicatif et industriel. Bien que moins productifs en termes de production scientifique, mais favorisant la synergie existant avec les laboratoires régionaux, ces travaux doivent être poursuivis afin de valoriser et appliquer les diagnostics laser maîtrisés en laboratoire à des systèmes énergétiques complexes et industriels.

#### Conclusion

##### ▪ **Points forts et possibilités liées au contexte**

La recherche développée par l'équipe de « Physico-Chimie de la Combustion » reste parfaitement structurée autour d'un objectif commun : l'étude des mécanismes réactionnels de production de polluants gazeux et particulaires. La cohérence vient en partie d'une combinaison judicieuse des diagnostics laser pertinents avec leurs applications sur des installations expérimentales propres à maîtriser et à isoler les mécanismes chimiques réactionnels de formation de polluants et avec le traitement des mesures, le plus souvent spectroscopiques, par le biais d'outils de simulation spécifiquement adaptés. Ce travail est rendu possible grâce à la forte interaction et la complémentarité des compétences des chercheurs qui permettent la mise en place de structures transversales capables de proposer des approches expérimentales innovantes pour la détection de nouvelles espèces moléculaires (HAP par exemple).

Le bilan réalisé par l'équipe « Physico-Chimie de la Combustion » dans le présent contrat quinquennal est très impressionnant (forte production scientifique et implication dans plusieurs programmes de recherche nationaux et internationaux, formation de plusieurs doctorants, synergie avec des laboratoires). Le travail est réalisé grâce à l'excellence de ses membres et à leurs pluralités en termes de compétences. Le travail réalisé est très novateur et les nombreuses perspectives offertes par les récents résultats contribueront sans nul doute à accroître l'expertise de cette équipe de recherche dans le domaine de la formation des polluants gazeux et particulaires si important dans l'amélioration du fonctionnement des futurs systèmes de propulsion. Par ailleurs, l'ouverture vers des projets de recherche collaboratifs entre équipes du PC2A représente une opportunité supplémentaire d'ouverture vers d'autres thématiques.

##### ▪ **Points faibles et risques liés au contexte**

Le comité d'experts souligne toutefois que cette diversification, si elle est réalisée à périmètre constant en terme de personnel, ne doit pas disperser les activités de l'équipe, ce qui pourrait affaiblir à moyen terme certaines de ses actions majeures. La combustion doit rester une thématique forte de PC2A.

##### ▪ **Recommandations**

Le bilan déjà largement positif à l'actif de cette équipe de recherche serait bien plus encore positif si elle disposait de moyens supplémentaires en termes de ressources humaines et surtout de locaux.



**Équipe 2 :** PhysicoChimie de l'Atmosphère

**Nom du responsable :** M<sup>me</sup> C. FITTSCHEN et M. D. PETITPREZ

**Effectifs :**

Effectifs de l'équipe	Nombre au 30/06/2013	Nombre au 01/01/2015
<b>N1</b> : Enseignants-chercheurs titulaires et assimilés	4 (3,8)	4 (3,8)
<b>N2</b> : Chercheurs des EPST ou EPIC titulaires et assimilés	4	4
<b>N3</b> : Autres personnels titulaires (n'ayant pas d'obligation de recherche)	3 (2,4)	3 (2,4)
<b>N4</b> : Autres enseignants-chercheurs (PREM, ECC, etc.)		
<b>N5</b> : Autres chercheurs des EPST ou EPIC (DREM, Post-doctorants, visiteurs etc.)	3	
<b>N6</b> : Autres personnels contractuels (n'ayant pas d'obligation de recherche)		
<b>TOTAL N1 à N6</b>	<b>14</b> <b>(13,2)</b>	<b>11</b> <b>(10,2)</b>

Effectifs de l'équipe	Nombre au 30/06/2013	Nombre au 01/01/2015
Doctorants	6 (5,5)	
Thèses soutenues	15	
Post-doctorants ayant passé au moins 12 mois dans l'unité	1	
Nombre d'HDR soutenues	1	
Personnes habilitées à diriger des recherches ou assimilées	4	4



## • Appréciations détaillées

### Appréciation sur la production et la qualité scientifiques

L'équipe « Physico-Chimie de l'Atmosphère » s'appuie largement sur les compétences de cinétique chimique en phase gazeuse homogène, historiquement développées au sein du L3C (photolyse éclair, photolyse laser), puis, depuis 2005, sur la réactivité hétérogène.

L'équipe développe dans son ensemble des recherches d'excellente qualité. Elle est l'une des toutes meilleures en Europe pour la détection des radicaux atmosphériques et leur réactivité ; la partie de chimie hétérogène, qui met en œuvre des approches moins fortement ancrées dans les compétences historiques du laboratoire, est également de très bonne qualité, originale et est en voie d'une plus grande structuration.

La production scientifique de l'équipe a permis la rédaction de 43 articles et 15 thèses de doctorat sur l'ensemble du quinquennal pour un personnel chercheur/enseignant-chercheur totalisant seulement 7,8 ETP soit une moyenne de 1,10 ACL/ETP/an.

Les activités de l'équipe sont présentées en deux parties :

- réactivité atmosphérique en phase homogène et hétérogène ;
- qualité de l'air : métrologie et modélisation.

Thème 1 : Réactivité atmosphérique en phase homogène et hétérogène

Cette partie des activités de l'équipe regroupe pour l'essentiel des recherches fondamentales en cinétique chimique en phase gazeuse et aux surfaces. Elle s'appuie sur ses grandes compétences en métrologie (la technique de photolyse laser, la fluorescence induite par laser et son récent couplage avec la technique de détection laser en cavité, la spectrométrie de masse à transfert de protons ou encore de Microscopie Raman (pour les surfaces)).

Pour la partie Cinétique Chimique (~25 ACL) en phase gazeuse, l'équipe a acquis une renommée mondiale. Les constantes de vitesse de réaction et les informations sur le « comportement » radicalaire, indispensables à l'établissement de modèles de chimie atmosphérique, viennent alimenter précieusement la base de données mondiale.

Ces dix dernières années, l'équipe de Chimie Hétérogène (~4 ACL) a mis en place des méthodologies innovantes qui arrivent aujourd'hui en « front de recherche » avec des approches originales et complémentaires à celles adoptées par la communauté nationale. Cette évolution est très intéressante et doit être encouragée. Le comité d'experts conseille aux chercheurs de bien choisir des systèmes chimiques qui leur permettraient de valoriser les savoirs et le savoir-faire développés par les autres équipes de PC2A. Les projets impliquant la caractérisation des suies, leurs propriétés hygroscopiques, CCN et optiques constituent incontestablement une interface très prometteuse entre les équipes PhysicoChimie de la combustion et de l'atmosphère d'une part, et le PC2A et le LOA d'une autre part (Labex CAPPa).

La perspective de convergence de ces travaux, introduisant les protocoles de réactivité hétérogène développés ces dernières années, devrait permettre à PC2A de jouer un rôle moteur au sein de la communauté des experts travaillant sur la caractérisation des propriétés des suies dans l'atmosphère.

Thème 2 : Qualité de l'air : métrologie et modélisation

Ces activités, regroupées sous l'enseigne Métrologie, comprennent en fait :

- une partie directement issue de l'expérience acquise en cinétique chimique (~4 ACL) où les connaissances des systèmes de Fluorescence Induite par Laser (LIF) et de Photolyse Laser (PL) ont permis le développement d'un système FAGE (Fluorescence Assay Gas Expansion) ;
- une partie où l'utilisation de diode laser et de système laser à cascade quantique a permis la mesure de micro-contaminants atmosphériques (~2 ACL).





Le développement du FAGE pour la mesure des concentrations des radicaux OH et HO<sub>2</sub>, puis l'adjonction d'une cellule de photolyse laser pour la mesure de la réactivité totale d'OH, sont deux grands accomplissements qu'il faut souligner. En réalisant ce saut technologique, le PC2A rejoint le cercle très restreint des groupes mondiaux capables de sonder directement le caractère oxydant de l'atmosphère. Les questions relatives à ces cycles radicalaires restent encore très nombreuses dans tous les environnements atmosphériques (forestiers, ruraux, marins, polaires, urbains, intérieurs, etc.). Cette grande réussite confère donc à ce groupe des responsabilités vis-à-vis de la communauté nationale et même au-delà. On est donc en droit d'attendre que, dans les années à venir, l'équipe prenne une place majeure lors des grandes campagnes de mesures nationales et internationales.

Les développements instrumentaux du sous-groupe Métrologie portant sur l'utilisation de systèmes laser pour la mesure de micro-contaminants tels que NO<sub>2</sub>, HONO, HCHO... sont intéressants et mériteraient de connaître une valorisation scientifique accrue en profitant de collaborations avec la communauté de chimie de l'atmosphère (techniques de terrains, autonomes, embarquées ....). Les applications présentées semblent souvent confinées à des recherches très appliquées, principalement motivées par des opportunités de financement risquant de conduire à une certaine dispersion qu'il faudra à tout prix éviter.

Les activités de Modélisation connaissent pour leur part de vrais problèmes de production scientifique (~1 ACL sur le quinquennal). Cette activité, qui, bien qu'ancienne au laboratoire, s'est maintenue (à défaut de se développer) en dehors des interactions nationales. Compte tenu de la faiblesse des interactions avec le reste de la communauté nationale (pas d'échanges formels, pas de séminaires, etc.), on peut douter de ses compétences en termes de développement de modèles et de sa capacité à élaborer un questionnement scientifique. Pourtant, dans le domaine du développement et de la mise en œuvre des modèles de chimie de l'atmosphère, des progrès considérables ont été accomplis ces dernières années par la communauté et une véritable spécialisation des équipes a vu le jour. Ces dernières années, un véritable risque de perte de maîtrise des outils déjà mis en œuvre s'accompagne d'une certaine dispersion des actions (modélisation aérosol de pollution, projection à long terme, etc.). La question d'une équipe de taille sous-critique est clairement posée et l'on peut douter de la pertinence d'un recrutement en MCF, tel qu'il est affiché dans le dossier de l'unité.

La production scientifique est remarquable, on compte 56 Publications (43 ACL, 4 OS, 9 ACLN), 188 Communications (36 ACTI, 55 ACTN, 46 AFFI, 51 AFFN), 13 Conférences Invitées, 1 HDR, 15 Thèses soutenues, 12 Actions de Valorisation (7 VF, 5 VI) soit 1,5 ACL /ETP/an et Publications+Communications 6,3/ETP/an.

### Appréciation sur le rayonnement et l'attractivité académiques

Comme pour l'équipe Physico-Chimie de la Combustion, cette équipe, avec ses 7,8 ETP, a attiré une vingtaine de doctorants soit 3,43 thèses/ETP, a recruté 8 post-doctorants ou ATER et attiré un grand nombre de chercheurs invités (9) : Université de Florence (Italie), Postech University (Corée du Sud), Max-Planck Institut für Chemie (Allemagne), Université d'Agadir (Maroc), Universidad de Castilla (Espagne), California Institute of Technology (USA), Université de Karlsruhe (Allemagne), Academy of Sciences of the Czech Republic (République Tchèque), Technological Educational Institute (TEI) of Ionian Islands (Grèce).

Les collaborations sont également en nombre important : 15 collaborations locales et régionales, 17 collaborations nationales et 11 collaborations internationales, à chaque fois avec des universités renommées dans ces thématiques.

La synergie entre les équipes fait intervenir ce groupe dans la création et la vie de plates-formes (MÉOL, CERLA, POLYPHEMUS, POQAIR) et a fait entrer l'équipe de Physico-Chimie de l'Atmosphère dans des réseaux mesure comme SIRTA (Site Instrumental de Recherche par Télédétection Atmosphérique), SAPHIR (Simulation of Atmospheric PHotochemistry in a large Reaction chamber), HCCT (Hill Cap Cloud Thuringia), CompOH (inter comparaison de mesures radicalaires).

L'équipe participe au programme régional CPER IRENI (2007-2013), Axe "Qualité de l'air", et plusieurs manifestations scientifiques ont été à son initiative, on retiendra :

- journées (nationales) interdisciplinaires de la Qualité de l'Air (2008, 2010, 2012) ;
- le Workshop entre les réseaux européens Marie-Curie TOTECAT-Lille 1 et Marie-Curie BREATHE-Université de Bristol (2008) ;
- l'école d'été ARCUS et ECONET (Constanta, 2008) ;
- les Journées Techniques (nationales) RSEIN/OQAI (2010) ;



- la Journée (nationale) de Cinétique et Photochimie en Phase Gazeuse (2011) ;
- et enfin le Workshop (national) Interface Chimie - Spectroscopie Atmosphérique (2011).

Le rayonnement de l'équipe est important et sa renommée est à la hauteur de sa qualité.

### Appréciation sur l'interaction avec l'environnement social, économique et culturel

L'équipe s'efforce, pour maintenir le niveau d'excellence de sa recherche, de nouer des partenariats forts avec les acteurs économiques au travers de projets collaboratifs et interdisciplinaires. On notera son implication dans :

- des programmes de recherche avec les organismes et EPIC (PICS avec l'Université de Karlsruhe (2007-2010) ; DFG INSU (2008-2010) ; PEPS POLLEN (2009-2010) ; LEFE-CHAT CompOH (2011-2013) ;
- des programmes de l'Agence Nationale de la Recherche (ANR BLANC SYNCHROKIN (2013-2015)) ;
- des projets européens (INTERREG III franco-britannique AQMASI (2007-2008) ; ECONET (2007-2010) ; FP7-TOTECAT-Marie Curie Early Stage Training (2006-2010) ; FP7-PhyCAFOR-ARCUS (2006-2010)) ;
- le programme Hubert Curien ;
- des partenaires industriels (ASPA Alsace (dans projet MERMAID), HYGEOS (projet CERPA), RENAULT (projet PROPCARB), Glencore Manganèse (projet NANOINDUS), GECCO).

### Appréciation sur l'organisation et la vie de l'équipe

La grande synergie entre les équipes, renforcée par une large mutualisation des compétences, des moyens techniques et du capital humain rend difficile d'apporter une appréciation différenciée par équipe. Aussi, on se référera à l'avis général donné sur le laboratoire.

### Appréciation sur l'implication dans la formation par la recherche

L'implication de l'équipe dans la formation à et par la recherche est importante. Sur le quinquennal, 15 thèses ont été soutenues et 3 Post-doctorants ont été accueillis sur la période 2008-2013.

L'équipe a été à l'origine de l'organisation de réunions scientifiques à caractère éducatif :

- organisation de l'école d'été ARCUS et ECONET (Constanta, 2008) ;
- responsabilité de deux projets européens en recherche et formation Marie Curie Early Stage Training TOTECAT et ARCUS - PHYCAFOR (2006-2010) ;
- participation à l'atelier thématique CNRS MeOL (2008, 2011) et à l'Ecole de Combustion CNRS 2012 ;
- participation au Labex CaPPA et responsabilité des Work Packages 1 et 2 (2012-2019) ;
- responsabilité de l'action "Aérosols : Formation, Caractérisation, Vieillessement" du CPER (2007-2013) ;
- responsabilité du master 2 international "Atmospheric Environment" (2013-2015) ;
- participation au CEVU de Lille 1.

Les chercheurs et enseignants-chercheurs ont été maintes fois sollicités pour des évaluations de projets nationaux et internationaux ainsi que pour des activités éditoriales et d'expertise de revues scientifiques.

## Appréciation sur la stratégie et le projet à cinq ans

Les perspectives annoncées en chimie en phase gazeuse s'inscrivent globalement dans la continuité du bilan et sont donc de très bonne qualité. L'ambition de poursuivre l'investigation de la chimie du radical HO<sub>2</sub> est tout à fait pertinente tant sont nombreux les indices qui semblent indiquer un manque de connaissances portant sur les réactions fondamentales du cycle des HOx. Le développement d'un réacteur polyvalent couplé à un spectromètre de masse utilisant le rayonnement synchrotron SOLEIL est un projet novateur et certainement ambitieux qu'il faut encourager.

En matière de chimie hétérogène, la convergence des méthodologies développées par l'équipe est fondée sur la forte demande de connaissances sur les propriétés optiques des aérosols. Les résultats très prometteurs du Labex CaPPa sont attendus par les opticiens de l'atmosphère du LOA, en particulier s'ils permettent de faire le lien avec les activités « Suie » de l'équipe de Physico-Chimie de la Combustion. On est donc enclin à inciter l'équipe à privilégier les activités « suies » pour lesquelles PC2A a une expertise reconnue, plutôt que les travaux sur les « poussières » dont la génération est déjà un champ d'études en soi et où l'expertise de PC2A est actuellement plutôt limitée.

Concernant les études sur la métrologie des polluants, après le succès du développement du FAGE, il serait souhaitable que l'équipe s'intègre encore mieux à la communauté des géochimistes de l'atmosphère dont les besoins en matière de quantification radicalaire sont très importants. Dans l'avenir, le dispositif relatif à la thématique de l'air intérieur devrait faire mieux partie de l'arsenal analytique de la communauté de la chimie de l'atmosphère déployée lors des grandes campagnes de mesures. Cette sous-équipe a acquis une expertise dans la mise au point d'outils de diagnostic basés sur les techniques laser et a mis ses compétences au service d'une recherche très appliquée et parfois pilotée par des besoins locaux. Malgré l'intérêt indéniable des outils développés, il subsiste un risque de dispersion vers des thématiques assez diverses (poêles à pétrole, capacité dépolluante des plantes etc.). Un recentrement sur le développement de capteurs miniatures, autonomes, rapides au service de la mesure des micro-contaminants atmosphériques, telle qu'affichée dans le projet, serait certainement à soutenir, car plus prometteur.

Comme dans le bilan, le projet de la partie modélisation traduit une forme de dispersion des thématiques et des outils. Par ailleurs, les thématiques affichées sont parfois à la limite des compétences de l'équipe (modélisation de la dispersion de polluants, analyse climatique statistique) et relèvent parfois même de missions qui devraient incomber logiquement aux agences de surveillance de la qualité de l'air : des besoins assez locaux semblent parfois prendre le pas sur le questionnement scientifique.

La nécessité d'une insertion des résultats des travaux de PC2A dans des modèles de chimie de l'atmosphère est indéniable mais on est en droit de se poser les questions suivantes : est-il indispensable que cela se fasse en interne ? Cette stratégie a-t-elle été efficace ces dernières années ? Le laboratoire PC2A devrait chercher à accroître ses contacts avec les laboratoires leaders dans le domaine de la modélisation atmosphérique.

Enfin, une activité pollution intérieure s'est développée dans le sillage des premiers déploiements du FAGE. Elle nécessite l'adaptation des modèles existants aux conditions spécifiques de l'intérieur. Les chercheurs qui se sont actuellement investis dans l'activité « Modélisation » pourraient y trouver un champ à défricher à la fois original et novateur.

## Conclusion

### ▪ **Points forts et possibilités liées au contexte**

La recherche fondamentale développée par cette équipe est remarquable. La production scientifique est exceptionnelle (1,1 ACL/ETP/an), les thèmes abordés, liés à la cinétique chimique en phases gazeuse et hétérogène dans l'environnement, présentent un grand intérêt aux niveaux régional, national et global. Des outils de diagnostic performants ainsi que des approches originales et complémentaires ont été développés au sein du laboratoire, ce qui met à la disposition de la communauté internationale des bases de données expérimentales inédites et conséquentes en chimie atmosphérique.

L'implication dans la métrologie de la qualité de l'air a conduit, en s'appuyant sur les compétences du groupe en cinétique chimique (Fluorescence Induite par Laser et Photolyse Laser), à développer un système FAGE (Fluorescence Assay Gas Expansion). La possession d'une telle chaîne de mesure, que très peu d'équipes possèdent au monde, permet de suivre la réactivité des radicaux oxydants dans l'atmosphère. La communauté de l'atmosphère est à la recherche de telles informations pour le développement de modèles et PC2A se doit de participer aux grandes campagnes de mesures à travers le monde.



- ***Points faibles et risques liés au contexte***

La partie modélisation est face à un risque réel de dispersion thématique.

- ***Recommandations***

La valorisation de ces études pourrait être encore accrue par des interactions plus fortes avec la communauté de chimie de l'atmosphère qui est en attente de ses données.

Les thématiques développées sont donc d'un grand intérêt pour mettre à la disposition des chercheurs, une base de données cinétiques complète pour le développement de modèles atmosphériques locaux ou globaux.



**Équipe 3 :** Sûreté nucléaire : Cinétique chimique, Combustion et Réactivité (C3R)

**Nom du responsable :** M. L. CANTREL et M. L. GASNOT

**Effectifs :**

<b>Effectifs de l'équipe</b>	<b>Nombre au 30/06/2013</b>	<b>Nombre au 01/01/2015</b>
<b>N1</b> : Enseignants-chercheurs titulaires et assimilés	5 (2,6)	5 (2,6)
<b>N2</b> : Chercheurs des EPST ou EPIC titulaires et assimilés	5 (1,1)	5 (1,1)
<b>N3</b> : Autres personnels titulaires (n'ayant pas d'obligation de recherche)	0	1
<b>N4</b> : Autres enseignants-chercheurs (PREM, ECC, etc.)		
<b>N5</b> : Autres chercheurs des EPST ou EPIC (DREM, Post-doctorants, visiteurs etc.)	1	
<b>N6</b> : Autres personnels contractuels (n'ayant pas d'obligation de recherche)		
<b>TOTAL N1 à N6</b>	<b>11 (4,7)</b>	<b>11 (4,7)</b>

<b>Effectifs de l'équipe</b>	<b>Nombre au 30/06/2013</b>	<b>Nombre au 01/01/2015</b>
Doctorants	6	
Thèses soutenues	1	
Post-doctorants ayant passé au moins 12 mois dans l'unité	7	
Nombre d'HDR soutenues	1	
Personnes habilitées à diriger des recherches ou assimilées	2	2

## • Appréciations détaillées

### Appréciation sur la production et la qualité scientifiques

La collaboration entre PC2A et l'IRSN a débuté en 2006 ; elle portait sur la thermodynamique et la réactivité chimique des produits de fission. En 2009, elle s'est concrétisée par la création d'un laboratoire de recherche commun, CNRS/IRSN/Lille 1, intitulé « Cinétique Chimique, Combustion et Réactivité », C3R. Cette équipe de recherche est l'illustration d'un regroupement réussi entre un laboratoire et un organisme de recherche qui associent leurs efforts et leurs compétences pour traiter des sujets fondamentaux de sûreté nucléaire.

Cette nouvelle équipe de PC2A s'appuie sur les compétences de « Physico-Chimie de la Combustion », « Physico-Chimie de l'Atmosphère » et de l'IRSN (Cadarache). Deux thématiques principales se dégagent :

- la réactivité des produits de fission et matériaux de structure ;
- la caractérisation des produits de fission et la problématique incendie.

Les activités de l'équipe « Sûreté Nucléaire/C3R » visent à approfondir les connaissances fondamentales sur le devenir des produits de fission et leur interaction avec les matériaux. Elles s'appuient en partie sur des actions transversales avec les équipes de Physico-Chimie de la Combustion et de l'Atmosphère avec qui elle partage la logistique scientifique et les choix dans les méthodologies expérimentales et numériques à utiliser.

#### Thème 1 : Réactivité des produits de fission et matériaux de structure

L'équipe développe des outils de calculs théoriques et des schémas cinétiques afin de mieux prédire la réactivité des produits de fission (I, Cs, Mo). Ces méthodes sont appliquées à différents systèmes ou scénarios d'accidents :

- réactivité d'espèces chimiques d'intérêt nucléaire incluant la détermination des paramètres thermocinétiques des équilibres chimiques responsables de la spéciation de l'iode ainsi que les composés majeurs dont le césium. Ces données sont incorporées dans un code IRSN, ASTEC ;
- étude de la volatilité des oxydes et nitroxydes d'iode avec la mise au point d'un code de dynamique moléculaire, SPYDERS ;
- spécification des produits de fission dans le cas d'accidents de type « Rupture des Tubes et Générateur de Vapeur » avec l'étude théorique de la spéciation de l'iode, de l'effet d'entraînement par des gouttelettes d'eau ainsi que de la volatilité de l'acide hypo-iodé en utilisant le code SPYDERS ;
- interactions surfaces/produits de fission, avec une approche couplant expériences (XPS et ToF-SIMS) et modélisation (code de chimie quantique VASP). Une étude de l'évolution d'échantillons d'inox ou d'inconel soumis à des atmosphères oxydantes a été lancée;
- réactivité de l'iode dans l'atmosphère, notamment des études expérimentales (photolyse) et théoriques (calculs de chimie théorique en collaboration avec le LPC2E-Orléans) de réactions impliquant des halogéno-alcanes avec le radical OH et la réactivité, théorique, de HI avec les radicaux CH<sub>3</sub> (programme européen COST KINCOM) ;
- comportement chimique des aérosols de sodium lors d'accidents graves de Réacteurs à Neutrons Rapides refroidis au sodium. Les aérosols produits par les feux de sodium sont très réactifs et d'une grande nocivité, leur devenir est donc important et motive le développement d'une étude théorique permettant d'évaluer l'évolution des particules d'oxyde de sodium en atmosphère confinée, ainsi qu'une étude expérimentale, en partenariat avec AREVA, pour déterminer les coefficients de diffusion des gaz dans les couches surfaciques des particules.

#### Thème 2 : Caractérisation des produits de fission et problématique incendie

Deux axes de recherches sont développés sur ce thème :

- la cinétique de l'iode, dans des conditions représentatives d'une situation accidentelle, est abordée expérimentalement dans une configuration de brûleur à flamme plate associée à des systèmes analytiques (IRTF, CPG) et optiques (LIF-OH) afin de déterminer les profils d'espèces chimiques dans des flammes H<sub>2</sub>/O<sub>2</sub>/Arensemencées en HI et en H<sub>2</sub>Ovap. Les résultats expérimentaux ont permis d'identifier un mécanisme cinétique détaillé rendant compte de la réactivité de H, I et O ;



- le développement de méthodes spectroscopiques pour la mesure de composés iodés en présence d'aérosols, avec l'utilisation de la méthode optique IBB-CEAS couramment utilisée par l'équipe de Physico-Chimie de l'Atmosphère. Après des tests de qualification à PC2A, le banc de mesure a été transféré à l'IRSN Cadarache sur l'installation CHIP pour la mesure de I<sub>2</sub> en présence de différents gaz et aérosols. La sensibilité de la technique a permis de démontrer son potentiel.

Ces études ont fait, malgré la jeunesse de l'équipe, l'objet de nombreuses publications dans des journaux internationaux. L'activité de l'équipe est très récente en ce qui concerne la plupart des thématiques abordées. Le nombre important de post-doctorants et doctorants impliqués ne laisse aucun doute quant à la forte attractivité de la thématique « Sûreté Nucléaire » auprès des étudiants, et quant à une explosion rapide de la production scientifique et une croissance importante de l'implication scientifique et financière de l'IRSN dans ce laboratoire commun.

En ce qui concerne la problématique incendie, les responsables de PC2A ont clairement indiqué que celle-ci, telle qu'elle était initialement prévue, sortait maintenant de leurs priorités. Par contre, il a été rappelé que la question de la modélisation des suies dans les incendies reste essentielle, même si la résolution de ce problème ne peut pas être raisonnablement envisagée à court terme par une démarche purement « cinétique chimique ».

Les travaux de l'équipe « Sûreté Nucléaire » s'insèrent dans des programmes nationaux tels que le Labex CaPPa avec la responsabilité du Groupe de Tâches 6, le projet MIRE (2013-2019) dans le cadre du programme thématique RSNR de l'ANR portant sur le thème « Accidents graves et Radioprotection », ainsi que dans le programme européen CHIP, terminé en 2012, qui concernait la chimie de l'iode. Cette équipe affiche des collaborations nationales avec le LPC2E à Orléans et le LCE de Marseille ainsi que des collaborations internationales avec la Slovaquie (Comenius University of Bratislava) et la Suisse (Paul Scherrer Institute). Une partie de ses activités est en synergie avec les autres équipes du laboratoire, ce qui lui permet de bénéficier de compétences en termes de diagnostics optiques et de développement de mécanismes cinétiques chimiques.

Malgré la jeunesse de cette équipe, on note 17 publications (13 ACL, 1 ACLN, 3 ASCL), 46 Communications (5 ACTI, 9 ACTN, 17 AFFI, 15 AFFN), 1 HDR, 1 Thèse soutenue, 7 Actions de Valorisation (1 VF, 6 VI) soit 0,86 ACL /ETP/an ou 3,35 productions/ETP/an.

### Appréciation sur le rayonnement et l'attractivité académique

Le rayonnement de cette équipe est fortement lié et favorisé par l'existence du laboratoire commun C3R. Les étudiants sont attirés par le développement de recherche fondamentale dans un but applicatif et industriel avec des enjeux environnementaux majeurs.

Sur le quinquennal, l'équipe a recruté 6 doctorants se répartissant géographiquement entre Villeneuve d'Ascq et Cadarache, attiré 7 post-doctorants et ATER et accueilli 1 chercheur invité.

L'équipe a collaboré localement avec 5 laboratoires universitaires, 2 laboratoires nationaux (LPC2E-Orléans (UMR 7328), LCE-Marseille (FRE 3416)) et 3 internationaux (Comenius University of Bratislava (Slovaquie), Laboratorium für Atmosphärenchemie, Paul Scherrer Institut (Suisse)), tous largement reconnus pour leurs compétences en sûreté nucléaire.

L'implication de l'équipe dans des réseaux et programmes de recherche institutionnels est à noter. Elle contribue avec les autres équipes de PC2A au fonctionnement des plates-formes MéOL et CERLA.

Le rayonnement de l'équipe se traduit également par la participation à des programmes nationaux (Labex CaPPa (WP 6 ; PIA 2012-2019)), européens (CHIP (Chimie de l'iode dans le Circuit Primaire) piloté par l'IRSN (2005-2014) et les organismes (Laboratoire de Recherche Commun IRSN/CNRS/Lille1 C3R "Cinétique Chimique, Combustion, Réactivité"). L'équipe participe à une ANR thématique (RSNR "Recherche en Sûreté Nucléaire et Radioprotection" - Thème "Accidents graves, Radioprotection" - Projet MIRE (2013-2019)) au côté des partenaires industriels AREVA et EDF.

### Appréciation sur l'implication dans la formation par la recherche

L'équipe est impliquée dans la formation à et par la recherche. Sur le quinquennal, une thèse a déjà été soutenue et 6 sont en cours avec des soutenances prévues d'ici décembre 2015, 7 post-doctorants, financés par l'IRSN, sont impliqués dans les recherches de cette équipe.



Les enseignants-chercheurs de l'équipe sont fortement impliqués dans l'action de formation des étudiants par le biais du parcours « Nucléaire » de la spécialité de Master 2 de Chimie-Energie. Ils ont participé, en tant qu'organisateur et intervenants, à l'école thématique de Combustion du CNRS (Edition 2012) ainsi qu'à l'atelier thématique CNRS MeOL (2008, 2011).

L'équipe a intégré le Labex CaPPA en prenant la responsabilité du Work Package 6 (2012-2019).

On terminera en signalant les tâches d'évaluation de projets nationaux et internationaux que l'équipe assume parallèlement à des activités éditoriales et d'expertise de revues scientifiques.

### Appréciation sur l'organisation et la vie de l'équipe

La grande synergie entre les équipes, renforcée par une large mutualisation des compétences, des moyens techniques et du capital humain rend difficile d'apporter une appréciation différenciée par équipe. Aussi, on se référera à l'avis général donné sur le laboratoire.

### Appréciation sur la stratégie et le projet à cinq ans

Cette nouvelle unité est l'expression, de la part à la fois du CNRS, de l'Université Lille 1 et de l'IRSN, de l'intérêt de la mise en commun de compétences en vue de l'amélioration des connaissances liées à l'évaluation de la sûreté nucléaire. Les données fondamentales issues de ces travaux sont intégrées dans les codes de calcul du partenaire IRSN utilisés lors des évaluations des systèmes de radioprotection. Ces recherches constituent ainsi un très bel exemple de collaboration entre un organisme de recherche et un laboratoire de recherche.

La stratégie à cinq ans de l'équipe Sûreté Nucléaire/C3R s'articule autour des thèmes de recherche développés depuis 2009. Les activités de recherche prévues se feront dans le cadre de l'ANR MIRE et du Labex CaPPa, ainsi que dans le cadre d'une collaboration avec l'Université de Bratislava en Slovaquie. L'expertise de cette équipe pourra sans aucun doute atteindre les objectifs scientifiques fixés notamment au vu des thèses qui ont déjà débuté sur les différents sujets de recherche et celles à venir. Le couplage entre chimie théorique, mesures en conditions laboratoires et développement de mécanismes cinétiques, aussi bien pour les évolutions des espèces en condition d'accidents graves, que pour leur devenir dans l'atmosphère, est sans aucun doute une démarche scientifique de haut niveau et qui sera à même d'apporter les améliorations aux codes de calcul du partenaire IRSN, pour *in fine* une meilleure amélioration des prédictions des codes thermo-hydrauliques.

On notera que les responsables de PC2A ont clairement indiqué que la problématique incendie n'était pas maintenue dans les objectifs de recherche de cette équipe.

### Conclusion

#### ▪ **Points forts et possibilités liées au contexte**

Les activités de l'équipe « Sûreté Nucléaire/C3R » sont dans l'ensemble d'un haut niveau scientifique et bien identifiées de par l'implication forte du partenaire IRSN, en témoigne également le nombre élevé de doctorants et de post-doctorants financés par cet organisme. Les différents programmes de recherche, centrés autour de la réactivité des produits de fission, ont débuté récemment, aussi faut-il donner du temps à ces recherches pour mûrir et produire les résultats escomptés.

#### ▪ **Recommandations**

Le comité d'experts recommande le retrait de la thématique « incendie » pour laquelle la compétence cinétique chimique ne semble pas suffisante. Le comité attire l'attention sur le risque induit par des recherches menées conjointement sur les deux sites de PC2A (Lille) et de l'IRSN (Cadarache) avec la possibilité de perte de cohérence en dépit de séjours périodiques des chercheurs sur les deux sites.



## 5 • Déroulement de la visite

### Dates de la visite

**Début :** 14 novembre 2013, à 8H15  
**Fin :** 15 novembre 2013, à 14H00

**Lieu de la visite :** Laboratoire PC2A  
**Institution :** Université Lille 1 Sciences et Technologies  
**Adresse :** Cité scientifique - Bâtiments C11 et C5 - Villeneuve d'Ascq 59650

**Locaux spécifiques visités :** jeudi 14 novembre de 15h00 à 17h00

Laboratoires du laboratoire du PC2A, visite des installations scientifiques : Bâtiment C11 (salles rez-de-chaussée), 2, 4, 6, 8, (salles 1er étage) 102, 104, 106, 112, (salles sous-sol 006, 010)

Présentations de posters (avancement des résultats non présentés lors de la matinée) et des salles d'essais et de mesures laser.

### Déroulement ou programme de visite

La visite du comité d'experts a eu lieu les 14 et 15 novembre 2013 sur le site de PC2A dans d'excellentes conditions. Les membres du comité d'experts ont particulièrement apprécié la qualité de l'accueil qui leur a été réservé, les francs contacts qui se sont aussitôt instaurés avec toutes les catégories de personnel du laboratoire, noté l'ambiance conviviale qui règne au sein du groupe et remarqué l'implication de tous dans l'organisation de la visite des installations. Le dossier d'évaluation est complet, clair et organisé de telle sorte que toutes les informations nécessaires à l'expertise soient accessibles et traitées rapidement.

#### Agenda de la visite

##### **Jeudi 14 novembre 2013**

##### Matin (Salle UFR de Chimie - C8)

8h	Accueil
8h15-8h45	Réunion à huis clos du comité d'experts
8h45-9h45	Présentation de l'activité de l'unité et des perspectives pour le prochain contrat (directeur actuel et futur directeur)
9h45-10h	Intervention de l'IRSN
10h-10h15	Pause
10h15-11h	Présentation des résultats et perspectives de l'équipe « Physico-Chimie de la Combustion »
11h-11h45	Présentation des résultats et perspectives de l'équipe « Physico-Chimie de l'Atmosphère »
11h45-12h30	Présentation des résultats et perspectives de l'équipe « Sécurité nucléaire : Cinétique Chimique Combustion Réactivité »

##### Après-midi (Bât C11 et C5 - PC2A)

12h30-14h	Plateaux repas (comité d'experts + Chefs d'équipe + Représentants des personnels + Direction du laboratoire)
14h-16h30	Visite du laboratoire et discussion autour de posters et expériences
16h30-16h45	Rencontre avec le directeur de l'École Doctorale SMRE



16h45-17h45	Rencontre avec les tutelles
17h45-19h	Débriefing du comité d'experts (huis clos)

**Vendredi 15 novembre 2013**

Bât C11 - PC2A

8h	Accueil
8h30-10h	Rencontre avec les personnels du laboratoire (enseignants-chercheurs, chercheurs ; ITA, BIATSS ; doctorants) en l'absence de la direction du laboratoire
10h-10h30	Pause
10h30-11h	Rencontre à huis clos avec la direction du laboratoire
11h-14h	Débriefing du comité d'experts et rédaction du rapport à huis clos (plateaux repas)



## 6 ● Observations générales des tutelles

Le Président de Lille1,  
Sciences et Technologies  
A  
M. le Président de l'AERES

Objet : réponse au rapport sur le laboratoire PC2A  
Vos références : E2015-EV-0593559Y-S2PUR150008943-005350-RT  
Nos Réf : DIRVED -2014-332

M. Le Président,

Je tiens à remercier le comité de visite de l'AERES pour le temps consacré à l'évaluation, la qualité des échanges et les recommandations pertinentes proposées. Le laboratoire PC2A s'engage à mettre en œuvre, dans les meilleurs délais, ces recommandations.

Vous trouverez ci-joint la réponse de la part du laboratoire ; elle comprend :

- Des demandes de corrections factuelles,
- des observations générales portant sur le rapport d'évaluation.

Je vous prie d'agréer, cher collègue, l'expression de toute ma considération.

Villeneuve d'Ascq, le 21 mars 2014

Le Président de Lille1,  
Sciences et Technologies



P. Rollet





## Réponse au rapport du Comité de Visite AERES des 14 et 15 novembre 2013

Le laboratoire PC2A a pris connaissance du rapport du Comité de Visite AERES, et remercie ses membres pour leur analyse pertinente des bilans et projets de l'unité. Le PC2A a apprécié les analyses positives émises sur ses activités de recherche, la cohérence des programmes menés, la qualité des personnels impliqués, et la forte synergie entre les équipes. La qualité des activités et de la production scientifique ont permis une reconnaissance internationale des thématiques clés du laboratoire. Ces spécificités de l'unité seront maintenues dans le prochain contrat quinquennal.

La qualité des travaux de recherche et l'attractivité internationale sont étroitement liées aux conditions de travail et d'accueil. Des efforts ont été initiés ces dernières années pour remédier à ce problème déjà mentionné lors de la précédente évaluation AERES. Le PC2A adhère à l'avis formulé par les membres du comité qui pointent clairement un besoin urgent de rénovation et d'extension des locaux particulièrement exigus du PC2A.

Les équipes et le Conseil Scientifique du PC2A souhaitent apporter en complément, les commentaires d'ordre général suivants :

### 1) Commentaires relatifs à l'équipe « PhysicoChimie de la Combustion »

Le comité mentionne la grande valeur scientifique des activités de recherche réalisées dans le cadre de cette thématique forte et historique du PC2A. Il recommande de veiller à ne pas affaiblir les recherches essentielles portant sur la physicochimie de la combustion et de maintenir les efforts sur les activités autour de la MCR. Ces activités de recherche seront soutenues en restant vigilant aux risques de dispersion.

Le comité soulève le caractère isolé des actions menées en chimie théorique. La mise en œuvre de ces outils constitue une activité transversale à laquelle le PC2A attache une grande importance. Le recrutement récent (janvier 2014) d'un IGR en chimie théorique, fruit du soutien de l'Université Lille1, va permettre de remédier à cette situation.

### 2) Commentaires relatifs à l'équipe « PhysicoChimie de l'Atmosphère »

Le rapport du comité souligne l'importance des compétences acquises par l'équipe en métrologie, le développement réussi du dispositif FAGE pour la détection d'espèces radicalaires d'intérêt atmosphérique, et les résultats très prometteurs obtenus en réactivité hétérogène.

De l'avis du comité, l'action concernant la mesure de micro-contaminants suscite des inquiétudes, et notamment un risque de dispersion des activités. Le PC2A comprend que la diversité des actions réalisées dans ce cadre peut conduire à cette interprétation et prend note des recommandations des membres du comité. Ainsi, un recentrage de ces activités sur la thématique « qualité de l'air intérieur » est envisagé permettant ainsi de valoriser l'arsenal analytique de l'équipe. Le développement de capteurs miniatures en collaboration avec Mines Douai sera poursuivi.



Comme mentionné justement par le comité, les activités de modélisation pâtissent de trop faibles interactions nationales, induisant un manque de reconnaissance dans la communauté. Un débat au sein de l'unité doit être initié afin d'éviter une perte de maîtrise des outils spécifiques à cette thématique.

3) Commentaires relatifs à l'équipe « Sûreté Nucléaire : Cinétique Chimique, Combustion et Réactivité (C3R) »

Les activités de cette jeune équipe s'appuient sur une collaboration entre le PC2A et l'IRSN ainsi que sur des actions transversales aux deux autres équipes de l'unité. Le comité mentionne à juste titre la complémentarité des compétences impliquées, qui a notamment permis de mettre en œuvre une démarche scientifique adaptée aux problématiques d'intérêt nucléaire avec un couplage entre chimie théorique et approche expérimentale. La recommandation du comité visant au retrait de la thématique incendie avait déjà été envisagée par l'unité.

Villeneuve d'Ascq, le mardi 18 mars 2014

Document validé par le conseil scientifique du PC2A

Laurent Gasnot, Directeur

  
