



## Ecole Doctorale - 104

Sciences de la Matière, du Rayonnement  
et de l'Environnement

**ETABLISSEMENT** : Université de Lille

**Laboratoire(s) de Rattachement** : PC2A

**Domaine scientifique, Spécialité** : *la spécialité doit être l'une de celles de la (co)-direction de thèse*

- DS2 | Milieux denses, matériaux et composants
- DS2 | Milieux dilués et optique fondamentale
- DS3 | Sciences de la terre et de l'univers
- DS3 | Terre, enveloppes fluides
- DS4 | Chimie théorique, physique, analytique
- DS4 | Chimie organique, minérale, industrielle
- DS4 | Chimie des matériaux
- DS5 | Aspects moléculaires et cellulaires de la biologie
- DS8 | Energétique, thermique, combustion
- DS8 | Mécanique des solides, des matériaux, des structures et des surfaces
- DS10 | Biotechnologies agroalimentaires, sciences de l'aliment, physiologie
- DS10 | Biologie de l'environnement, des organismes, des populations, écologie
- DS10 | Sciences agronomiques

**Direction de thèse** : LOUIS Florent, Maître de Conférences HDR, [florent.louis@univ-lille.fr](mailto:florent.louis@univ-lille.fr)

**Co-direction** : HERCKES Pierre, Professor, [pierre.herckes@asu.edu](mailto:pierre.herckes@asu.edu)

**Co-encadrement (personnel non HDR)** : TAAMALLI Sonia, Research Engineer, [sonia.taamalli@univ-lille.fr](mailto:sonia.taamalli@univ-lille.fr)

**Programme(s) de Rattachement** : CPER ECRIN/Labex CaPPA-CDP AREA

**(Co)-financement(s) envisagé(s) (mention : en cours/obtenu)** : thèse labellisée ULille (obtenu), région Hauts-de-France (en cours) or Labex CaPPA-CDP AREA (en cours)

<b>Titre de la thèse : Évaluation du devenir des contaminants émergents dans l'environnement</b>
--

### SUJET DE THESE (environ 1/2 page)

#### Contexte

La présence de contaminants émergents résulte soit d'émissions directes, soit d'émissions diffuses ou de réémissions provenant de sols ou de plans d'eau contaminés. Ce phénomène concerne une grande diversité de molécules, qui proviennent d'utilisations ou d'activités humaines libérant des composés organiques semi-volatils tels que les additifs d'usure des pneus ou les composés perfluoroalkylés (PFAS). D'une part, les particules d'usure des pneus sont une nouvelle forme de microplastiques environnementaux, leur rôle dans la pollution de l'air devant augmenter à mesure que les émissions d'échappement diminuent. D'autre part, d'importantes recherches se concentrent actuellement sur les PFAS en raison de la prise de conscience croissante de leur toxicité et des



## Ecole Doctorale - 104

Sciences de la Matière, du Rayonnement  
et de l'Environnement

réglementations émergentes qui fixent souvent leurs concentrations admissibles à des niveaux extrêmement bas (quelques parties par trillion, ppt). Malgré cela, de nombreuses lacunes subsistent quant au devenir et au transport dans l'environnement de ces composés, souvent appelés « produits chimiques éternels » en raison de leur persistance dans l'environnement. Compte tenu de la réactivité limitée des PFAS, un élément essentiel est leur comportement de répartition dans les milieux environnementaux. Un aspect particulièrement important est l'interaction entre les PFAS et les microplastiques, car ces composés sont fréquemment trouvés ensemble en raison de leurs origines anthropiques.

### Objectifs

L'objectif principal de cette thèse de doctorat est d'étudier, à l'aide de la cinétique computationnelle, les processus de dégradation atmosphérique des contaminants émergents au niveau moléculaire, en démêlant leurs voies les plus favorables, leur devenir atmosphérique et leur impact sur l'environnement ainsi que leur écotoxicité envers les espèces aquatiques. L'objectif est d'éclairer les expérimentations sur les produits recommandés à rechercher, et vice-versa, pour appuyer les faits expérimentaux et les produits déjà identifiés.

Ce projet s'inscrit également dans le cadre d'un programme de recherche plus large (CPER Ecrin ; Labex CaPPA, et CDP AREA). Ce travail sera mené en étroite collaboration avec un groupe expérimental situé aux USA (Arizona State University).

**Date de recrutement envisagée : 26/04/2025**

**Contact (adresse e-mail) :** [florent.louis@univ-lille.fr](mailto:florent.louis@univ-lille.fr) [celine.toubin@univ-lille.fr](mailto:celine.toubin@univ-lille.fr) [sonia.taamalli@univ-lille.fr](mailto:sonia.taamalli@univ-lille.fr)

### Remarques/commentaires supplémentaires :

Profil du candidat : Master ou diplôme d'ingénieur en chimie de l'environnement ou physico-chimie. Une expérience dans le domaine de la chimie atmosphérique, des simulations moléculaires (chimie quantique, dynamique moléculaire) et de la cinétique chimique sera appréciée. Un bon niveau d'anglais (écrit/parlé) sera indispensable (au moins B2). Une mobilité entre l'Université de Lille et Arizona State University est demandée. Les travaux de recherche se dérouleront au laboratoire PC2A de l'Université de Lille.