

Evaluation du fractionnement isotopique entre vapeur d'eau et glace à très basse température et applications au paléothermomètre isotopique

Les isotopes de l'eau dans carottes de glace en Antarctique sont un proxy privilégié des changements de température passés. L'analyse des isotopes de l'eau dans les carottes de glace a permis de reconstruire les changements de température au cours des 800 000 dernières années (EPICA, 2004) grâce aux conditions extrêmement froides ainsi qu'aux faibles quantités de précipitation qui ont permis à des glaces très vieilles de s'accumuler.

L'interprétation des isotopes de l'eau comme un signal de température du passé se base sur le fractionnement isotopique, c'est-à-dire le ratio entre isotopes lourds et léger dans la phase condensée par rapport à la phase gazeuse, à chaque changement de phase dans le cycle de l'eau. En effet, les isotopes lourds restent de manière privilégiée dans la phase condensée. Ce déséquilibre est accentué à basse température. Quand les masses d'air voyagent vers les régions polaires et que la température décroît, de plus en plus d'humidité dans les nuages se condensent, jusqu'à obtenir une composition isotopique des précipitations très faibles, et corrélées avec la température.

Pour le moment, le lien entre composition isotopique dans les carottes de glace et température du passé reste empirique, en partie parce que les déterminations du fractionnement isotopique à des températures inférieures à -30°C divergent. La modélisation physique du fractionnement isotopique requiert d'estimer la fonction de partition avec des approches de physique statistique quantique (Landau and Lifshitz, 1958). Les résultats à partir de calculs ab-initio ne convergent pas vers des solutions satisfaisantes dû à la complexité du système (nombre de molécules élevé) (Pinilla et al., 2014). De nouvelles évaluations des coefficients du fractionnement isotopique à basse température sont nécessaires afin de contraindre les modèles climatiques qui peuvent simuler les isotopes de l'eau, en particulier les paramétrisations du fractionnement isotopique lors de la sublimation et de la condensation solide.

L'objectif du stage est de fournir des contraintes sur les coefficients du fractionnement liés à la sublimation et à la condensation solide avec des expériences de laboratoire et des simulations numériques. Un nouveau spectromètre infrarouge pourra être utilisé afin de mesurer directement le fractionnement lié à la sublimation et à la condensation jusqu'à des températures allant à -90°C . Ces estimations pourront être comparées aux précédentes estimations ainsi qu'à un développement limité de la fonction de partition.

Le stage pourra être suivi par une thèse pendant laquelle mes paramétrisations obtenues pourront être implémentées dans les versions avec isotopes des modèles de climat (typiquement LMDZ iso). Ces simulations seront comparées avec des échantillons de neige et de carottes de glace d'Antarctique.

La stratégie proposée repose sur l'utilisation d'un nouveau spectromètre infrarouge qui peut mesurer les isotopes de l'eau à très basse température. L'étudiant(e) ne doit pas nécessairement avoir des connaissances préalables en spectroscopie infrarouge, mais des connaissances solides en physique et/ou en sciences de la vie et de la terre seront utiles, en particulier afin de comparer les résultats expérimentaux avec des évaluations théoriques du fractionnement isotopique. Un intérêt pour l'étude du climat est un ajout, ainsi que des bases de programmations (matlab/R/python). Il/elle bénéficiera de soutien technique et instrumental pour les différentes expériences et analyses.

Pour toutes questions, contactez Mathieu Casado : mathieu.casado@lsce.ipsl.fr

EPICA: Eight glacial cycles from an Antarctic ice core, *Nature*, 429(6992), 623–628 [online]
Available from: <http://dx.doi.org/10.1038/nature02599>, 2004.

Landau, L. D. and Lifshitz, E. M.: *Statistical physics*, Pergamon Press ; Addison-Wesley Pub. Co., London; Reading, Mass., 1958.

Pinilla, C., Blanchard, M., Balan, E., Ferlat, G., Vuilleumier, R. and Mauri, F.: Equilibrium fractionation of H and O isotopes in water from path integral molecular dynamics, *Geochim. Cosmochim. Acta*, 135, 203–216, 2014.