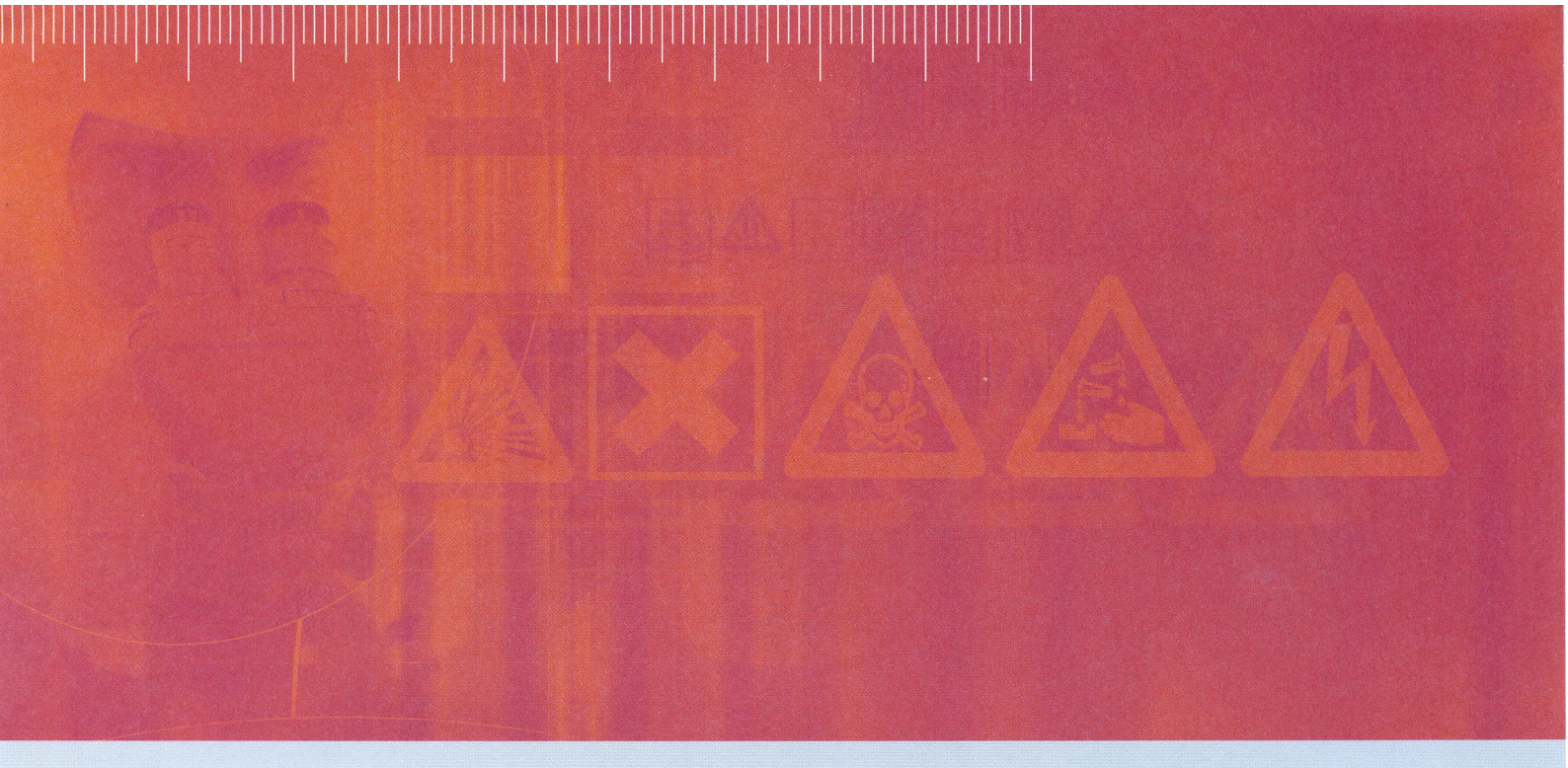

RAPPORT D'ÉTUDE 25/06/2015
INERIS-DRC-15-149181-04282A

Paramètres physico-chimiques des substances prédéfinies dans le logiciel MODUL'ERS

INERIS
maîtriser le risque
pour un développement durable

Paramètres physico-chimiques des substances prédéfinies dans le logiciel MODUL'ERS

Rapport rédigé pour le Ministère de l'Ecologie du Développement Durable et de l'Energie

PRÉAMBULE

Le présent rapport a été établi sur la base des informations fournies à l'INERIS, des données (scientifiques ou techniques) disponibles et objectives et de la réglementation en vigueur.

La responsabilité de l'INERIS ne pourra être engagée si les informations qui lui ont été communiquées sont incomplètes ou erronées.

Les avis, recommandations, préconisations ou équivalent qui seraient portés par l'INERIS dans le cadre des prestations qui lui sont confiées, peuvent aider à la prise de décision. Etant donné la mission qui incombe à l'INERIS de par son décret de création, l'INERIS n'intervient pas dans la prise de décision proprement dite. La responsabilité de l'INERIS ne peut donc se substituer à celle du décideur.

Le destinataire utilisera les résultats inclus dans le présent rapport intégralement ou sinon de manière objective. Son utilisation sous forme d'extraits ou de notes de synthèse sera faite sous la seule et entière responsabilité du destinataire. Il en est de même pour toute modification qui y serait apportée.

L'INERIS dégage toute responsabilité pour chaque utilisation du rapport en dehors de la destination de la prestation.

	Rédaction	Vérification	Approbation
NOM	Roseline BONNARD	Vincent Grammont	Martine RAMEL
Qualité	Ingénieur Unité Impact sanitaire et expositions	Ingénieur Unité Impact sanitaire et expositions	Responsable du pôle Risques et technologies durables
Visa			

TABLE DES MATIÈRES

1. PARAMETRES ET SUBSTANCES TRAITEES 6

2. SOURCES DOCUMENTAIRES UTILISEES 7

3. DONNEES COLLECTEES ET VALEURS RETENUES POUR LES DIFFERENTS PARAMETRES 11

3.1 Principes généraux de définition des valeurs 11
3.2 Masse molaire 11
3.3 Température de fusion 13
3.4 Solubilité 16
3.5 Pression de vapeur 24
3.6 Constante de Henry 32
3.7 Coefficient de partage octanol-eau 41
3.8 Coefficient de partage carbone organique-eau 49
3.9 Coefficients de partage entre les particules du sol et l'eau du sol, et entre les particules en suspension et les eaux superficielles 56
3.9.1 Sources de données consultées pour les métaux et le méthylmercure 57
3.9.2 Approche retenue pour définir les valeurs utilisées pour les métaux et le méthylmercure dans MODUL'ERS 60
3.10 Coefficient de diffusion dans l'air et dans l'eau 65
3.10.1 Coefficient de diffusion dans l'air 65
3.10.2 Coefficient de diffusion dans l'eau 70

4. REFERENCES BIBLIOGRAPHIQUES 74

LISTE DES TABLEAUX

Tableau 1 : Masse molaire des substances – **M (g.mol^{-1})**..... 12
Tableau 2 : Température de fusion - **Tm (K)** 15
Tableau 3 : Solubilité – **S (mg.m^{-3})**..... 18
Tableau 4 : Pression de vapeur – **P_{vap} (Pa)**..... 26
Tableau 5 : Constante de Henry – **H (Pa.m^3.mol^{-1})**..... 35
Tableau 6 : Constante de partage octanol-eau – **log Kow (-)** 43
Tableau 7 : Constante de partage carbone organique-eau – **log Koc (l.kg^{-1})**..... 51
Tableau 8 : Distributions du coefficient de partage entre les particules du sol et l'eau du sol – **log Kd (l.kg^{-1})**..... 62
Tableau 9 : Distributions du coefficient de partage entre les particules en suspension et les eaux superficielles - **log Kd_{MES} (l.kg^{-1})** 63
Tableau 10 : Coefficient de diffusion des substances dans l'air – **Da (m^2.s^{-1})**..... 69
Tableau 11 : Coefficient de diffusion des substances dans l'eau – **De (m^2.s^{-1})**.... 72

RESUME

L'INERIS met à disposition un outil de modélisation et de simulation pour estimer les concentrations, les expositions et les risques sanitaires liés à un sol contaminé ou une installation classée pour l'environnement (ICPE).

Pour faciliter l'utilisation de cet outil, des rapports ou des notes sont également fournis sur les données d'entrée des différents modules contenus dans cet outil.

Le présent rapport réunit les informations collectées et retenues pour renseigner les paramètres physico-chimiques utilisés dans l'outil, pour les substances les plus souvent traitées dans les études d'évaluation des risques sanitaires liés à des sites contaminés ou des ICPE.

Plusieurs recueils ou banques de données ont été consultés. Les sources qui ont été sélectionnées reposent sur une analyse des données collectées et présentent des éléments d'information contextuelle sur celles-ci. La confrontation de ces différentes sources a contribué à mettre en évidence la présence d'éventuelles erreurs dans les données présentées par chacune.

Une valeur ponctuelle et un intervalle de valeurs définies à 20 ou 25°C ont été proposés pour chacun des paramètres. Lorsque les données nécessaires étaient disponibles, la valeur ponctuelle a également été ajustée à la température de l'environnement. La démarche adoptée pour définir les valeurs intégrées dans MODUL'ERS est détaillée pour chaque paramètre.

D'une manière générale, il convient de rappeler que l'utilisateur du logiciel doit vérifier la pertinence des valeurs proposées pour son cas d'étude et utiliser des valeurs plus adaptées si nécessaires, en justifiant ces modifications dans le rapport d'étude.

1. PARAMETRES ET SUBSTANCES TRAITEES

L'INERIS met à disposition l'outil de modélisation et de simulation MODUL'ERS pour estimer les concentrations, les expositions et les risques sanitaires liés à un sol contaminé ou une Installation Classée Pour l'Environnement (ICPE).

Des valeurs, des intervalles de valeurs ou/et distributions de valeurs ont été prédéfinis et sont fournis par défaut dans le logiciel pour renseigner les données d'entrée.

Les documents relatifs à ces données d'entrée, disponibles dans le répertoire « Mes documents\MODULERS\Documents\Deliverables\Donnees_entrees ont deux objectifs :

- présenter la manière dont les valeurs proposées pour les renseigner ont été définies (sources de données consultées, hypothèses et choix effectués) ;
- permettre aux utilisateurs de savoir si ces valeurs sont adaptées à leur cas étude, et sinon les aider à compléter le travail de définition des données d'entrée, en repartant de la recherche et de l'analyse bibliographiques déjà effectuées.

Le présent rapport s'intéresse aux paramètres physico-chimiques des substances. Selon les options de calcul sélectionnées par l'utilisateur de MODUL'ERS, ces données d'entrée peuvent être utilisées dans différents modules de calcul relatifs aux milieux. Les paramètres pouvant être utilisés de manière commune par plusieurs modules ont également été regroupés dans des modules de données d'entrée. Il s'agit des modules *Par_Subst, Par_Sol* (pour les paramètres qui servent uniquement à caractériser les sols, comme le coefficient de partage particule du sol-eau du sol : *Kd_E*) *ou Par_Emission* (pour les paramètres qui servent uniquement dans les modules dédiés aux émissions de polluant du sol vers l'air, comme le coefficient de partage particule du sol-eau du sol pour la couche contenant la source sol : *Kd_source_sol_E* ou la pression de vapeur dans l'air intérieur *Pvap_Ta_int*).

Les paramètres traités dans ce rapport sont les suivants : la masse molaire, la température de fusion, la solubilité, la pression de vapeur, la constante de Henry, le coefficient de partage octanol-eau, le coefficient de partage carbone organique-eau, le coefficient de partage particules du sol-eau du sol, le coefficient de partage particules en suspension-eaux superficielles, le coefficient de diffusion dans l'air et le coefficient de diffusion dans l'eau.

Certains paramètres utilisés pour calculer les concentrations dans des milieux à des températures différentes sont représentés par plusieurs données d'entrée, dans le logiciel. Par exemple, pour la pression de vapeur, on trouve dans MODUL'ERS *Pvap_Ta* pour la pression de vapeur à température ambiante, *Pvap_Ts* pour la pression de vapeur à température du sol et *Pvap_Ta_int* pour la pression de vapeur à la température ambiante des bâtiments. Ces trois données d'entrée permettent à l'utilisateur de différentier les valeurs du paramètre en fonction des conditions du milieu traité. Le présent document donne les valeurs des paramètres à 20°C ou 25°C (comme indiqué dans les tableaux de valeur) et une atmosphère, ainsi que des valeurs ajustées en fonction de la température du milieu, lorsque les données thermodynamiques nécessaires à ces ajustements sont disponibles dans les sources d'information consultées. Toutefois, dans MODUL'ERS, la valeur reportée dans la case « Value » de chaque paramètre, et utilisée lors des simulations ponctuelles, est la valeur définie à 20 ou 25°C. Les données ajustées à la température définie par défaut pour le milieu considéré sont reportées à titre d'informations dans la case « Comment ». L'utilisateur peut remplacer la valeur de la case « Value » par ces valeurs ajustées, mais ces dernières présentent une incertitude supplémentaire liée à la méthode et aux données servant à effectuer l'ajustement.

Les paramètres ont été définis pour 49 substances : les dioxines et furannes (17 congénères), les polychlorobiphényles dioxines-like (12 congénères), les polychlorobiphényles indicateurs (5 congénères), les hydrocarbures aromatiques polycycliques (naphtalène, fluoranthène, benzo(a)pyrène), les composés organiques volatils (benzène, chlorure de vinyle, trichloroéthylène, tétrachloroéthylène), les substances inorganiques (arsenic, cadmium, chrome, mercure, nickel, plomb, sélénium, vanadium). Pour le mercure, la colonne « Value » des paramètres de MODUL'ERS contient les valeurs relatives au mercure inorganique. Celles relatives aux méthylmercure sont ajoutées dans la colonne « Comment ».

2. SOURCES DOCUMENTAIRES UTILISEES

Il existe de nombreuses sources documentaires fournissant des valeurs pour les paramètres physico-chimiques des substances chimiques : articles originaux publiés dans des revues à comité de lecture, rapports institutionnels, ouvrages de références, logiciels, banques ou bases de données.

Les sources privilégiées sont celles :

- où les données collectées ont fait l'objet d'une étape de vérification ou validation,
- fournissant les références des données collectées,
- indiquant s'il s'agit de valeurs mesurées ou estimées,
- donnant si possible des informations contextuelles sur la valeur proposée (mode et conditions de mesure).

Les principales sources d'informations utilisées sont la base CHEMFATE, le logiciel EPI SUITE, le portail substances chimiques de l'INERIS, la partie 1 du rapport de 2004 de l'US EPA (US Environmental Protection Agency) sur l'évaluation des expositions et des risques liés aux dioxines et le manuel « Handbook of physical-chemical properties and environmental fate for organic chemicals » rédigé par Mackay et al. (2006). Lorsque les données de ces sources étaient insuffisantes, la revue bibliographique « Intermedia Transfer Factors for Fifteen Toxic Pollutants Released to Air Basins in California » (LLNL, 1993) et la base HSDB (Hazardous Substances Databank, US National Library of Medecine) ont été consultées. Ces sources sont décrites brièvement ci-dessous. En cas de doute sur les valeurs reportées dans ces sources, les articles listés en référence ont été consultés.

Pour les coefficients de partage particules-eau du sol et particules en suspension–eaux des métaux, des rapports d'étude spécifiques ont été utilisés. Ils sont présentés dans la section se rapportant à ces paramètres.

Pour les coefficients de diffusion dans l'air et dans l'eau, les valeurs ont été estimées, pour la plupart des substances, à partir des relations empiriques sélectionnées par Lyman et al. (1990) (cf. section 3.10).

Description des principales sources d'information utilisées

CHEMFATE est une base de données du Syracuse Research Corporation (SRC) dont le développement a été financé par l'US EPA. Elle contient des données physico-chimiques et de transfert dans l'environnement, relatives à 1728 substances.

Pour chaque substance et paramètre, une ou plusieurs valeurs mesurées et/ou estimées sont fournies avec les références bibliographiques. Une valeur est aussi souvent recommandée. Des informations sont le plus souvent fournies sur les conditions d'obtention des valeurs listées (caractéristiques du sol pour la mesure du Koc par exemple).

Les données, ont fait l'objet d'un contrôle qualité. Le SRC indique que les sources utilisées ont été évaluées avec attention. Elles ont été compulsées par des scientifiques juniors et séniors, puis revues par des séniors, qui ont vérifié de manière systématique leur bien-fondé (unité, cohérence de la valeur par rapport à la structure de la molécule,…). Enfin, 10% des données reportées de la base ont vu leur valeur contrôlée par rapport à la source originale.

Toutefois, cette base n'est plus mise à jour depuis le milieu des années 80 et depuis 2014, les fichiers par substance, contenant l'ensemble des données pouvant être extrait de la base, ne sont plus accessibles. Les données de CHEMFATE sont supposées être intégrées dans la base PHYSPROP. Malheureusement, lors de la rédaction de ce rapport, l'accès direct à cette base via internet posait problème. La version décrite ci-dessous est donc celle intégrée au logiciel EPI SUITE.

EPI (Estimation Programs Interface) SUITE est un outil regroupant différents programmes informatiques permettant d'estimer les paramètres physico-chimiques et certaines données relatives au devenir environnemental des substances. Les estimations obtenues peuvent être comparées aux données de mesure, contenues dans la version de PHYSPROP incluse dans le logiciel.

EPI SUITE a été développée par l'US EPA et le SRC. Ce logiciel est disponible gratuitement à l'adresse suivante : http://www.epa.gov/opptintr/exposure/pubs/episuite.htm.

PHYSPROP était au départ une base de données des propriétés physico-chimiques de substances évaluées par le SRC pour la Hazardous Substances Databank (HSDB). PHYSPROP contient des données relatives à plus de 41000 substances. Ces données concernent notamment la masse molaire, le point d'ébullition, le point de fusion, la pression de vapeur, la solubilité, la constante de dissociation, le coefficient de partage octanol-eau, le coefficient de partage carbone organique-eau et la constante de Henry. Ces données ont différentes origines. Elles sont soit issues de mesures, d'extrapolation ou de méthodes d'estimation. Des données expérimentales ne sont donc pas disponibles pour tous les paramètres et toutes les substances. Lorsque c'est le cas, contrairement à CHEMFATE, seule la valeur expérimentale sélectionnée est fournie.

Comme pour CHEMFATE, les données ont fait l'objet d'une revue à plusieurs niveaux. Un contrôle qualité supplémentaire, permettant de mettre en évidence d'éventuelles valeurs aberrantes, a été réalisé, en comparant ces données de mesure aux valeurs estimées.

Le Portail Substances Chimiques (http://www.ineris.fr/substances/fr/) présente le recueil des informations acquises par l'INERIS au cours de ses travaux d'études et recherches.

Ce site propose notamment pour chaque substance une fiche avec des informations sur les propriétés physico-chimiques et sur le comportement dans l'environnement. Les données utilisées sont issues de documents validés au niveau national, européen ou international. Il s'agit par exemple des dossiers d'évaluation des risques des substances existantes (Règlement 793/93/CE), des rapports d'évaluation des risques des pesticides dans le cadre de la Directive 91/414/CE ou des évaluations des substances chimiques à haut volume de production (Programme HPV). Pour chaque paramètre renseigné, la fiche contient une ou plusieurs valeurs, une référence bibliographique et parfois des informations sur le mode d'obtention de la valeur (mesure ou calcul, température de mesure). Il n'y a pas de recommandation systématique sur les valeurs à privilégier.

Le document de 2003 de l'US EPA, intitulé « Exposure and Human Health Reassessment of 2,3,7,8-Tetrachlorodibenzo-*p*-Dioxin (TCDD) and Related Compounds National Academy Sciences (NAS) Review Draft » a été utilisé pour les dioxines et les furannes. L'US EPA a effectué une recherche bibliographique et mis en place une méthode d'évaluation des données pour sélectionner les plus fiables. Les données présentées dans ce document sont ainsi assorties d'une note reflétant leur niveau d'incertitude. Cette note permet de distinguer les valeurs mesurées, des valeurs déduites d'autres grandeurs et de celles estimées à partir de relations quantitatives de type structure-activité. Elle prend également en compte le fait qu'il s'agisse de données confirmées ou non par plusieurs laboratoires et par plusieurs techniques de mesure. Elle tient compte de la sensibilité des techniques d'analyse (mesures reportées au moins dix fois supérieures à la limite de détection) et du suivi des procédures de bonnes pratiques par les laboratoires.

Le manuel de Mackay et al., nommé « Handbook of physical-chemical properties and environmental fate for organic chemicals » (version 2, 2006) compile les données physico-chimiques relatives à 1250 composés, regroupés par famille. Le document vise à aider les utilisateurs à identifier les erreurs éventuelles dans les valeurs reportées et à sélectionner les plus adaptées. Pour cela, l'état physique auquel se rapporte la valeur (solide ou liquide) et son mode d'obtention sont indiqués (valeurs mesurées ou calculées, méthodes de mesure employées). Des graphes présentent aussi l'évolution des propriétés physico-chimiques en fonction du poids moléculaire des substances au sein d'une famille. Pour certaines substances et certains paramètres, des valeurs mesurées à différentes températures sont présentées, ainsi que les valeurs sélectionnées par les auteurs du manuel.

Le rapport « Intermedia Transfer Factors for Fifteen Toxic Pollutants Released to Air Basins in California » de 1993 présente le travail de revue effectué par McKone et al pour un ensemble de polluants fréquemment rencontrés sur les sites.

Dans ces documents, plusieurs valeurs sont présentées pour chaque paramètre. Il peut s'agir à la fois de valeurs expérimentales et de valeurs calculées. Les conditions de mesure et les méthodes d'estimation utilisées sont définies.

La base HSDB (Hazardous Substances Databank) est une base de données de la National Library of Medecine, accessible en ligne à l'adresse suivante : http://toxnet.nlm.nih.gov/cgi-bin/sis/htmlgen?HSDB. Elles comportent des données sur environ 5000 substances.

Les données sont issues de rapports, d'ouvrages et de revues scientifiques. Les références bibliographiques complètes sont fournies et des informations succinctes sur les conditions de mesure sont également reportées. Le niveau de vérification de chaque donnée est indiqué. Les trois mentions possibles sont : « Peer reviewed » : données ayant fait l'objet d'une vérification par un comité d'experts, « QC reviewed » : données ayant fait l'objet d'un contrôle qualité mais n'ayant pas encore été vérifiées par un comité d'experts, « Unreviewed » : données n'ayant pas été vérifiée, issues par exemple de l'industrie. Toutefois, il faut souligner que les procédures de vérification correspondant aux deux premières mentions ne sont pas précisées. La base de données HSDB n'a pas été consultée de manière systématique car PHYSPROP en reprend normalement les données.

3. DONNEES COLLECTEES ET VALEURS RETENUES POUR LES DIFFERENTS PARAMETRES

3.1 PRINCIPES GENERAUX DE DEFINITION DES VALEURS

Au moins deux sources d'information ont été recherchées pour renseigner un paramètre, afin de pouvoir vérifier l'absence d'erreur de report dans les documents consultées.

Les données mesurées ont systématiquement été préférées aux données modélisées. Lorsque l'information sur la nature de la donnée (valeur mesurée ou valeur estimée) n'était pas fournie dans les sources consultées, la donnée n'a pas été prise en compte.

Les valeurs ponctuelles fournies dans les tableaux suivants correspondent à la moyenne calculée à partir de la valeur recommandée par chacune des sources retenues ou à partir de la moyenne des valeurs mesurées et listées par ces sources (en l'absence de valeur recommandée). Quand ces valeurs diffèrent de plus de 20% (de plus de 0,2 unité pour le log Kow et le log Koc), un intervalle de valeurs est également donné.

3.2 MASSE MOLAIRE

La masse molaire (M) est la masse d'une mole d'une substance. Elle s'exprime en grammes par mole ($g.mol^{-1}$). Ce paramètre est défini dans les modules *Par_Subst* et tous les modules de calcul des concentrations dans les milieux, sauf les modules *Conc_air_part_exterieur* et *Conc_air_part_interieur* et ceux relatifs aux animaux.

L'incertitude sur la valeur de la masse molaire d'une substance pouvant être considérée comme négligeable, seules CHEMFATE et EPISUITE ont été consultées pour ce paramètre. Les données de ces deux sources étant concordantes, les valeurs trouvées pour ce paramètre sont reportées directement dans le tableau suivant.

Tableau 1 : Masse molaire des substances – **M (g.mol^{-1})**

Substance	Valeur
Hydrocarbures Aromatiques Polycycliques	
Naphtalène	128,2
Fluoranthène	202,3
Benzo(a)pyrène	252,3
Composés Organiques Volatils	
Benzène	78,1
Chlorure de vinyle	62,5
Trichloroéthylène	131,4
Tétrachloroéthylène	165,8
Dioxines	
2378 Tétrachlorodibenzodioxine	322,0
12378 Pentachlorodibenzodioxine	356,4
123478 Hexachlorodibenzodioxine	390,9
123678 Hexachlorodibenzodioxine	390,9
123789 Hexachlorodibenzodioxine	390,9
1234678 Heptachlorodibenzodioxine	425,3
Octachlorodibenzodioxine	460,8
Furannes	
2378 Tétrachlorodibenzofuranne	306,0
12378 Pentachlorodibenzofuranne	340,4
23478 Pentachlorodibenzofuranne	340,4
123478 Hexachlorodibenzofuranne	374,9
123678 Hexachlorodibenzofuranne	374,9
123789 Hexachlorodibenzofuranne	374,9
234678 Hexachlorodibenzofuranne	374,9
1234678 Heptachlorodibenzofuranne	409,3
1234789 Heptachlorodibenzofuranne	409,3
Octachlorodibenzofuranne	444,8
Polychlorobiphényles indicateurs	
244' Trichlorobiphényle (28)	257,5
22'55'' Tétrachlorobiphényle (52)	292,0
22'455' Pentachlorobiphényle (101)	326,4
22'344'5' Hexachlorobiphényle (138)	360,9
22'44'55' Hexachlorobiphényle (153)	360,9
22'344'55' Heptachlorobiphényle (180)	395,3

*Tableau 1 (suite) : Masse molaire des substances – **M (g.mol^{-1})***

Substance	Valeur
Polychlorobiphényles dioxine-like	
33'44' Tétrachlorobiphényle (77)	292,0
344'5 Tétrachlorobiphényle (81)	292,0
233'44' Pentachlorobiphényle (105)	326,4
2344'5 Pentachlorobiphényle (114)	326,4
23'44'5 Pentachlorobiphényle (118)	326,4
3344'5 Pentachlorobiphényle (126)	326,4
233'44'5 Hexachlorobiphényle (156)	360,9
233'44'5' Hexachlorobiphényle (157)	360,9
23'44'55' Hexachlorobiphényle (167)	360,9
33'44'55' Hexachlorobiphényle (169)	360,9
233'44'55' Heptachlorobiphényle (189)	395,3
Métaux et méthylmercure	
Arsenic	74,9
Cadmium	112,4
Chrome	52,0
Mercure élémentaire (Hg°) et inorganique (Hg II)	200,6
Méthylmercure	216,0
Nickel	58,7
Plomb	207,2
Sélénium	79,0
Vanadium	50,9

3.3 TEMPERATURE DE FUSION

La température de fusion est utilisée dans MODUL'ERS pour calculer la pression de vapeur et la solubilité en phase liquide d'un composé organique à partir, respectivement de sa pression de vapeur et de sa solubilité en phase solide. Pour cela, le ratio de fugacité est calculé selon l'expression suivante (Mackay, 2006) :

$$F = P_s / P_l = S_s / S_l = \exp\left[-\Delta S_m / R \times (T_m / T - 1)\right]$$ Équation 1

Avec P_s et P_l : pressions de vapeur du composé à l'état solide et à l'état liquide,

S_s et S_l : solubilités du composé à l'état solide et à l'état liquide,

T_m et T: température de fusion et température considérée,

ΔS_m : entropie de fusion du composé,

R : constante des gaz parfaits

et $\Delta S_m / R \approx 6,79$

En effet, bien que leur température de fusion soit supérieur à la température ambiante, les composés comme les dioxines, les polychlorobiphényles ou les hydrocarbures aromatiques polycycliques, se comportent dans l'environnement selon les propriétés relatives à l'état liquide, car leurs molécules trop dispersées ne peuvent pas d'atteindre le niveau d'énergie de l'état cristallin (Mackay, 2001). Dans MODUL'ERS, la pression de vapeur et la solubilité de ces substances, définies avec des valeurs correspondant à l'état solide en donnée d'entrée, sont ensuite converties à l'état liquide, en les divisant par le ratio de fugacité.

Ainsi, la température de fusion est définie et utilisée dans le module *Par_Subst* et tous les modules de calcul des concentrations dans les milieux sauf les modules relatifs aux animaux.

D'une source de données à une autre, les valeurs mesurées varient peu. Les valeurs estimées et reportées dans EPI SUITE peuvent, en revanche, être sensiblement divergentes des données de mesure. De plus, les résultats obtenus peuvent être différents selon les méthodes d'estimation employées.

Par conséquent, seules des valeurs expérimentales ont été utilisées. Après vérification du bien-fondé des données reportées en confrontant plusieurs sources, voire en recherchant la publication originale, une valeur ponctuelle a été définie à partir de la moyenne des valeurs recueillies. En l'absence de données mesurées pour les polychlorobiphényles indicateurs dans les sources citées en section 2, la publication originale de Bolgar et al. (1995), utilisée par l'US EPA pour définir les points de fusion des polychlorobiphényles dioxine-like a été utilisée pour compléter le jeu de données.

Le tableau suivant donne, pour les substances organiques, les valeurs moyennes obtenues, exprimées en Kelvin et les sources bibliographiques correspondantes.

Tableau 2 : Température de fusion - **Tm (K)**

Substance	Valeur	Sources
Hydrocarbures Aromatiques Polycycliques		CHEMFATE, EPISUITE, Mackay
Naphtalène	353	
Fluoranthène	383	
Benzo(a)pyrène	452	
Composés Organiques Volatils		
Benzène	279	CHEMFATE, EPISUITE, Mackay
Chlorure de vinyle	119	
Trichloroéthylène	188	
Tétrachloroéthylène	251	
Dioxines		
2378 Tétrachlorodibenzodioxine	575	US EPA , EPI SUITE, Mackay
12378 Pentachlorodibenzodioxine	513	US EPA , EPI SUITE
123478 Hexachlorodibenzodioxine	547	US EPA , Mackay
123678 Hexachlorodibenzodioxine	558	US EPA , EPI SUITE, Mackay
123789 Hexachlorodibenzodioxine	516	US EPA , EPI SUITE, Mackay
1234678 Heptachlorodibenzodioxine	538	US EPA , EPI SUITE, Mackay
Octachlorodibenzodioxine	602	US EPA , EPI SUITE, Mackay
Furannes		
2378 Tétrachlorodibenzofuranne	500	US EPA , EPI SUITE, Mackay
12378 Pentachlorodibenzofuranne	499	US EPA , Mackay
23478 Pentachlorodibenzofuranne	469	US EPA , EPI SUITE, Mackay
123478 Hexachlorodibenzofuranne	499	US EPA , Mackay
123678 Hexachlorodibenzofuranne	506	US EPA , Mackay
123789 Hexachlorodibenzofuranne	521	US EPA , Mackay
234678 Hexachlorodibenzofuranne	513	US EPA , EPI SUITE, Mackay
1234678 Heptachlorodibenzofuranne	508	US EPA , EPI SUITE, Mackay
1234789 Heptachlorodibenzofuranne	495	US EPA , Mackay
Octachlorodibenzofuranne	531	US EPA , EPI SUITE, Mackay
Polychlorobiphényles indicateurs		
244' Trichlorobiphényle (28)	331	Mackay, Bolgar
22'55'' Tétrachlorobiphényle (52)	360	Mackay, Bolgar
22'455' Pentachlorobiphényle (101)	352	Mackay, Bolgar
22'344'5' Hexachlorobiphényle (138)	353	Mackay, Bolgar
22'44'55' Hexachlorobiphényle (153)	380	Mackay, Bolgar
22'344'55' Heptachlorobiphényle (180)	385	US EPA , Mackay

*Tableau 2 (suite) : Température de fusion - **Tm (K)***

Substance	Valeur	Sources
Polychlorobiphényles dioxine-like		
33'44' Tétrachlorobiphényle (77)	453	US EPA , Mackay
344'5 Tétrachlorobiphényle (81)	435	US EPA, Bolgar
233'44' Pentachlorobiphényle (105)	384	US EPA , Mackay
2344'5 Pentachlorobiphényle (114)	372	US EPA , Mackay
23'44'5 Pentachlorobiphényle (118)	383	US EPA , Mackay
3344'5 Pentachlorobiphényle (126)	434	US EPA, Bolgar
233'44'5 Hexachlorobiphényle (156)	402	US EPA , Mackay
233'44'5' Hexachlorobiphényle (157)	435	US EPA, Bolgar
23'44'55' Hexachlorobiphényle (167)	399	US EPA, Bolgar
33'44'55' Hexachlorobiphényle (169)	479	US EPA , Mackay
233'44'55' Heptachlorobiphényle (189)	439	US EPA , Mackay

3.4 SOLUBILITE

La solubilité (S) d'un composé est la concentration maximale du composé que l'on peut dissoudre dans l'eau pure, à une température donnée.

Elle a les dimensions suivantes : $M.L^{-3}$.

Ce paramètre est utilisé dans les modules relatifs aux végétaux et dans les modules *Sol, Eaux_superficielles, Eaux_souterraines, Conc_gaz_air_exterieur et Par_Subst* pour estimer la concentration maximale d'une substance dans l'eau.

La solubilité des métaux dépend de leur spéciation et des conditions du milieu (pH, potentiel rédox, composition chimique). Faute de pouvoir définir une valeur de solubilité en fonction de caractéristiques données, nous avons utilisé la solubilité la plus forte qui a été relevée parmi les composés formés par le métal en milieu aqueux. La valeur finalement présentée dans le tableau correspond à la masse de l'élément métallique dans le composé (sauf pour l'ion méthylmercure).

Le tableau suivant donne la solubilité des composés mesurée à 20 ou 25°C. Il s'agit des valeurs reportées dans les cases « Value » et éventuellement « Min » et « Max » du paramètre « Solubilité » de MODUL'ERS. En fonction des données recueillies dans la bibliographie, une valeur est également fournie pour une température de 12,5°C (température prédéfinie pour les milieux extérieurs dans MODUL'ERS), pour certaines substances. Cette valeur a été calculée par interpolation linéaire entre les valeurs reportées par un même auteur à plusieurs températures, ou bien, par calcul à partir de la valeur ponctuelle donnée à 20 ou 25°C, de l'enthalpie de solubilisation du composé et de la relation issue de l'équation de Van't Hoff (Beyer et al, 2002 ; Mackay et al., 2006) :

$$\ln(S(T_2)) = \ln(S(T_1)) + \Delta H_{sol} / R \times (1/T_1 - 1/T_2) \qquad \text{Équation 2}$$

avec $S(T_2)$: solubilité du composé à la température T_2,

$S(T_1)$: solubilité du composé à la température T_1,

ΔH_{sol} : enthalpie de solubilisation du composé,

R : constante des gaz parfaits.

Cette valeur ajustée est indiquée dans la case « Comment » du paramètre *Solubilité* de MODUL'ERS. L'utilisateur peut l'employer, s'il le souhaite dans ses simulations ponctuelles, en la reportant dans la case « Value ». Pour les substances pour lesquelles aucune valeur ajustée n'est présentée, faute de donnée relevée pour l'enthalpie de solubilisation, les utilisateurs de MODUL'ERS peuvent consulter le manuel de Mackay et al (2006), qui présente généralement pour chaque substance des relations donnant la solubilité en fonction de la température. Il convient toutefois d'être prudent quant à l'utilisation de ces relations, qui, de l'une à l'autre, peuvent donner des valeurs très différentes

Par ailleurs, pour les polluants dont la température de fusion est supérieure à la température ambiante, on distingue la pression de vapeur à l'état solide et la pression de vapeur à l'état liquide (cf. section 3.3). Dans ce document, les valeurs données sont celles correspondant à l'état solide des composés. Or, certaines des données de mesure reportées dans EPI SUITE pour les polychlorobiphényles, et affichées en tant que solubilité en phase solide, correspondent en fait à la solubilité en phase liquide. Pour d'autres données, la nature de la donnée reportée n'est pas claire. Les valeurs pour lesquelles il y a un doute n'ont pas été prises en compte.

Le tableau suivant donne les valeurs obtenues, exprimées en milligrammes par mètre-cube et les sources de données utilisées.

*Tableau 3 : Solubilité – **S (mg.m^{-3})***

Substance	Valeur à 25°C				Valeur ajustée à 12,5°C	
	Valeur ponctuelle	Intervalle de valeurs	Sources	Commentaires	Valeur	Sources - Estimation (I/C) *
Hydrocarbures Aromatiques Polycycliques						
Naphtalène	31000		CHEMFATE, EPI SUITE, Mackay		21250	Mackay - Valeur I
Fluoranthène	242	206-260	CHEMFATE, EPI SUITE, Mackay	Valeur ponctuelle égale à la moyenne des valeurs recommandées par les trois sources	120	Mackay – Valeur C
Benzo(a)pyrène	2,4	1,6-3,8	CHEMFATE, EPI SUITE, Mackay	Valeur ponctuelle égale à la moyenne des valeurs recommandées par les trois sources	$9,6.10^{-1}$	Mackay – Valeur C
Composés Organiques Volatils						
Benzène	$1,79.10^{6}$		CHEMFATE, EPI SUITE, Mackay, PSC		$1,76.10^{6}$	Mackay - Moyenne des valeurs I
Chlorure de vinyle	$5,4.10^{6}$	$1,1.10^{6}$-$8,8.10^{6}$	CHEMFATE, EPI SUITE, Mackay PSC	Valeur ponctuelle égale à la moyenne des valeurs données ou recommandées		
Trichloroéthylène	$1,2.10^{6}$	$1,1.10^{6}$-$1,5.10^{6}$	CHEMFATE, EPI SUITE, Mackay, PSC	Valeur ponctuelle égale à la moyenne des valeurs données ou recommandées	$1,4.10^{6}$	Mackay - Valeur I
Tétrachloroéthylène	$1,9.10^{5}$	$1,5.10^{5}$-$2,1.10^{5}$	CHEMFATE, EPI SUITE, Mackay	Valeur ponctuelle égale à la moyenne des valeurs recommandées par les trois sources		

* I : estimation par interpolation linéaire à partir de valeurs mesurées à plusieurs températures – C : estimation par calcul à partir de l'équation 2

*Tableau 3 (suite) : Solubilité – **S (mg.m^{-3})***

Substance	Valeurs à 20 ou 25°C				Valeur ajustée à 12,5°C	
	Valeur ponctuelle	Intervalle de valeurs	Sources	Commentaires	Valeur	Sources - Estimation (I/C)*
Dioxines						
2378 Tétrachlorodibenzodioxine	1,9.10^{-2}		US EPA, Mackay	Valeur mesurée à 25°C. Valeur ponctuelle sélectionnée car confirmée par 2 méthodes différentes	8,7.10^{-3}	Beyer – Valeur C
12378 Pentachlorodibenzodioxine	1,2.10^{-1}		US EPA	Pas de valeur mesurée. Valeur ponctuelle correspondant à la solubilité moyenne des PCDD à 20°C	7,1.10^{-2}	Mackay - Valeur C
123478 Hexachlorodibenzodioxine	5,2.10^{-3}	4,4.10^{-3} - 6,0.10^{-3}	US EPA, Mackay	Valeur ponctuelle égale à la moyenne des valeurs recommandées à 25°C	2,3.10^{-3}	Mackay - Valeur C
123678 Hexachlorodibenzodioxine	4,4.10^{-3}		US EPA	Pas de valeur mesurée. Valeur ponctuelle correspondant à la solubilité moyenne des HCDD à 25°C.		
123789 Hexachlorodibenzodioxine	4,4.10^{-3}		US EPA	Pas de valeur mesurée. Valeur ponctuelle correspondant à la solubilité moyenne des HCDD à 25°C.		
1234678 Heptachlorodibenzodioxine	2,4.10^{-3}		US EPA, EPI SUITE, Mackay	Valeur mesurée à 20°C	1,5.10^{-3}	Mackay - Valeur C
Octachlorodibenzodioxine	7,4.10^{-5}	7,4.10^{-5}- 4,0.10^{-4}	US EPA, Mackay, EPI SUITE	Valeur ponctuelle et minimale mesurée à 25°C (US EPA et Mackay et al) – Valeur maximale (EPI SUITE) mesurée à 20°C	2,0.10^{-5}	Mackay - Valeur C

* I : estimation par interpolation linéaire à partir de valeurs mesurées à plusieurs températures – C : estimation par calcul à partir de l'équation 2

*Tableau 3 (suite) : Solubilité – **S (mg.m^{-3})***

Substance	Valeurs entre 20 et 25°C				Valeur ajustée à 12,5°C	
	Valeur ponctuelle	Intervalle de valeurs	Sources	Commentaires	Valeur	Sources - Estimation (I/C)*
Furannes						
2378 Tétrachlorodibenzofuranne	$4{,}2.10^{-1}$	$4{,}2.10^{-1}$ - $6{,}9.10^{-1}$	US EPA, Mackay, EPI SUITE	Valeur ponctuelle et minimale (US EPA, Mackay et al) mesurée à 22,7°C – Valeur maximale (EPI SUITE) mesurée à 26°C		
12378 Pentachlorodibenzofuranne	$2{,}4.10^{-1}$		US EPA	Pas de valeur mesurée. Valeur ponctuelle correspondant à la solubilité moyenne des PCDF mesurée à 22,7°C.		
23478 Pentachlorodibenzofuranne	$2{,}4.10^{-1}$		US EPA, Mackay, EPI SUITE	Valeur mesurée à 22,7°C		
123478 Hexachlorodibenzofuranne	$8{,}3.10^{-3}$		US EPA, Mackay	Valeur mesurée à 22,7°C		
123678 Hexachlorodibenzofuranne	$1{,}8.10^{-2}$		US EPA	Valeur mesurée à 22,7°C		
123789 Hexachlorodibenzofuranne	$1{,}3.10^{-2}$		US EPA	Pas de valeur mesurée. Valeur ponctuelle correspondant à la solubilité moyenne des HCDF mesurée à 22,7°C.		
234678 Hexachlorodibenzofuranne	$1{,}3.10^{-2}$		US EPA	Pas de valeur mesurée. Valeur ponctuelle correspondant à la solubilité moyenne des HCDF mesurée à 22,7°C.		
1234678 Heptachlorodibenzofuranne	$1{,}4.10^{-3}$		US EPA, Mackay, EPI SUITE	Valeur mesurée à 22,7°C		
1234789 Heptachlorodibenzofuranne	$1{,}4.10^{-3}$		US EPA	Pas de valeur mesurée. Valeur ponctuelle correspondant à la solubilité moyenne des HpCDF mesurée à 22,7°C		
Octachlorodibenzofuranne	$1{,}2.10^{-3}$		US EPA, Mackay, EPI SUITE	Valeur mesurée à 25°C	$4{,}5.10^{-4}$	Mackay – Valeur C

* I : estimation par interpolation linéaire à partir de valeurs mesurées à plusieurs températures – C : estimation par calcul à partir de l'équation 2

*Tableau 3 (suite) : Solubilité – **S (mg.m^{-3})***

Substance	Valeurs entre 20 et 25°C				Valeur ajustée à 12,5°C	
	Valeur ponctuelle	Intervalle de valeurs	Sources	Commentaires	Valeur	Sources - Estimation (I/C)*
Polychlorobiphényles indicateurs						
244' Trichlorobiphényle (28)	160		Mackay	Valeur mesurée à 25°C	70	Beyer – Valeur C
22'55'' Tétrachlorobiphényle (52)	24	15 - 30	CHEMFATE EPI SUITE, Mackay	Valeur ponctuelle égale à la moyenne des valeurs recommandées à 25°C	9,9	Beyer –Valeur C
22'455' Pentachlorobiphényle (101)	12	10 – 15	CHEMFATE EPI SUITE, Mackay	Valeur ponctuelle égale à la moyenne des valeurs données ou recommandées par les trois sources. Valeur minimale de l'intervalle de variation mesurée à 24°C	6,7	Mackay –Valeur C
22'344'5' Hexachlorobiphényle (138)	1,5		EPI SUITE	Valeur mesurée à 20°C	$9{,}8.10^{-1}$	Beyer –Valeur C
22'44'55' Hexachlorobiphényle (153)	$9{,}7.10^{-1}$		CHEMFATE EPI SUITE, Mackay	Valeur ponctuelle égale à la moyenne des valeurs recommandées à 25°C	$6{,}8.10^{-1}$	Mackay –Valeur C
22'344'55' Heptachlorobiphényle (180)	$4{,}4.10^{-1}$		US EPA	Valeur mesurée à 20°C	$2{,}8.10^{-1}$	Beyer –Valeur C

* I : estimation par interpolation linéaire à partir de valeurs mesurées à plusieurs températures – C : estimation par calcul à partir de l'équation 2

*Tableau 3 (suite) : Solubilité – **S (mg.m^{-3})***

Substance	Valeurs à 20 ou 25°C				Valeur ajustée à 12,5°C	
	Valeur ponctuelle	Intervalle de valeurs	Sources	Commentaires	Valeur	Sources - Estimation (I/C)*
Polychlorobiphényles dioxine-like						
33'44' Tétrachlorobiphényle (77)	$8{,}6.10^{-1}$	$5{,}6.10^{-1}$ - 1	US EPA, EPI SUITE, Mackay	Valeur ponctuelle égale à la moyenne des valeurs recommandées à 25°C	$3{,}5.10^{-1}$	Mackay –Valeur C
344'5 Tétrachlorobiphényle (81)	3,1		Mackay	Valeur mesurée à 25°C	2,0	Mackay –Valeur I
233'44' Pentachlorobiphényle (105)	2,5	1,7 – 3,4	EPI SUITE, Mackay	Valeur mesurée à 25°C	1,3	Mackay – Valeur C
2344'5 Pentachlorobiphényle (114)	2,6		US EPA, Mackay	Valeur mesurée à 20 et 25°C	1,4	Mackay –Valeur I
23'44'5 Pentachlorobiphényle (118)	2,1		US EPA, Mackay	Valeur mesurée à 25°C	1,1	Mackay –Valeur I
3344'5 Pentachlorobiphényle (126)	$8{,}2.10^{-1}$	$3{,}1.10^{-1}$ - 1,3	Mackay	Moyenne des valeurs mesurées à 25°C	$5{,}5.10^{-1}$	Mackay – Valeur C
233'44'5 Hexachlorobiphényle (156)	$7{,}5.10^{-1}$	$4{,}0.10^{-1}$ - 1,1	US EPA, Mackay	Valeur ponctuelle égale à la moyenne des valeurs mesurées à 25°C. Minimum mesurée à 20°C, maximum mesurée à 25°C	$6{,}6.10^{-1}$	Mackay –Valeur I
233'44'5' Hexachlorobiphényle (157)	$2{,}1.10^{-1}$	$1{,}2.10^{-1}$ - $3{,}0.10^{-1}$	Mackay	Moyenne des valeurs mesurées à 25°C	$1{,}3.10^{-1}$	Mackay –Valeur I
23'44'55' Hexachlorobiphényle (167)	$8{,}0.10^{-1}$	$5{,}3.10^{-1}$ - 1,1	Mackay	Moyenne des valeurs mesurées à 25°C	$6{,}2.10^{-1}$	Mackay –Valeur I
33'44'55' Hexachlorobiphényle (169)	$1{,}3.10^{-1}$		Mackay	Valeur mesurée à 25°C	$7{,}6.10^{-2}$	Mackay –Valeur I
233'44'55' Heptachlorobiphényle (189)	$6{,}3.10^{-2}$		Mackay	Valeur mesurée à 25°C	$4{,}0.10^{-2}$	Mackay –Valeur I

* I : estimation par interpolation linéaire à partir de valeurs mesurées à plusieurs températures – C : estimation par calcul à partir de l'équation 2

*Tableau 3 (suite) : Solubilité – **S (mg.m^{-3})***

Substance	Valeur ponctuelle	Sources	Commentaires
Métaux et méthylmercure			
Arsenic	1,5.10^{9}	McKone et al	Calculé à partir la solubilité de H_3AsO_4 à 12,5°C
Cadmium	1,0.10^{9}	McKone et al	Calculé à partir la solubilité de $CdCl_2$ à 20°C
Chrome	9,4.10^{8}	INERIS (2005) dans PSC	Calculé à partir la solubilité de $Na_2Cr_20_7$ à 20°C
Mercure inorganique	5,1. 10^{7}	HSDB	Calculé à partir la solubilité de Hg Cl_2 à 20°C
Mercure élémentaire	56,7	INERIS (2010) dans PSC	Mesuré à 20°C
Méthylmercure[$]	5,2. 10^{6}	INERIS (2010) dans PSC	Calculé à partir la solubilité du chlorure de méthylmercure à 25°C
Nickel	1,1.10^{8}	McKone et al	Calculé à partir la solubilité de CH_3Hg Cl à 25°C
Plomb	2,9.10^{4}	McKone et al	Calculé à partir la solubilité de $PbSO_4$ à 25°C
Sélénium	4,1.10^{8}	HSDB	Calculé à partir la solubilité de Na_2SeO_3 à 25°C
Vanadium	8,8.10^{7}	INERIS (2012) dans PSC	Calculé à partir la solubilité de $NaVO_3$ à 25°C

[$] : Solubilité de l'ion méthylmercure, c'est-à-dire masse maximale d'ion méthylmercure en solution dans l'eau

3.5 PRESSION DE VAPEUR

La pression de vapeur (P_{vap}) est la pression exercée par la phase gazeuse d'un corps en équilibre avec la phase liquide ou la phase solide (c'est-à-dire lorsque les proportions relatives de gaz et de liquide ou de gaz et de solide ne varient pas). On l'appelle aussi pression de vapeur saturante.

Elle a les dimensions suivantes : $M.L^{-1}.T^{-2}$. La pression de vapeur s'exprime couramment en pascals (Pa), en millimètres de mercure (mm Hg) ou en atmosphère (atm) : 1 atm = 760 mm Hg = $1{,}013.10^5$ Pa.

La température a un effet sensible sur la pression de vapeur d'une substance.

Ce paramètre est utilisé dans les modules relatifs aux végétaux, dans les modules relatifs aux émissions de polluants du sol ou de la nappe vers l'air, ainsi que dans *Par_Subst* et *Par_Emission,* pour calculer la fraction de polluant dans l'air sous forme gazeuse. Il est aussi utilisé dans les modules *Conc_gaz_air_exterieur, Conc_gaz_air_interieur_J_E, Conc_gaz_air_interieur_Volasoil* et *Par_Sol* pour calculer la concentration maximale de polluant dans l'air du sol. Selon les modules, les paramètres employés sont la pression de vapeur à température du sol (P_{vap_Ts}), la pression de vapeur à température ambiante (P_{vap_Ta}) ou la pression de vapeur à la température de l'air intérieur ($P_{vap_Ta_int}$).

Pour les polluants dont la température de fusion est supérieure à la température ambiante, on distingue la pression de vapeur à l'état solide et la pression de vapeur à l'état liquide (cf. section 3.3). Dans ce document, les valeurs données sont celles correspondant à l'état solide des composés. Lorsque les valeurs relevées dans la littérature correspondent à l'état liquide, elles sont converties en les multipliant par le ratio de fugacité calculé à la température de mesure ou d'estimation.

Comme pour la solubilité, il est apparu que certaines des données de mesure affichées dans EPI SUITE, en tant que pression de vapeur en phase solide, correspondent en fait à la pression de vapeur des composés en phase liquide. Pour d'autres substances, la nature de la donnée reportée n'est pas claire. Les données pour lesquelles il y a un doute sur l'état de la substance auquel elles se rapportent n'ont pas été prises en compte.

La mesure de la pression de vapeur des substances faiblement volatiles peut être délicate et les valeurs obtenues incertaines. Pour certains polychlorobiphényles, aucune valeur issue de mesure directe n'a été trouvée. Les données reportées sont alors issues de valeurs calculées, à partir d'une relation de corrélation basée sur le temps de rétention en chromatographie en phase gazeuse. Dans le tableau 4, ces valeurs sont dites estimées. En revanche, les relations de type QSAR (Quantitative Structure Activity Relationships), basées sur des descripteurs moléculaires, n'ont pas été utilisées.

Le tableau donne les pressions de vapeur des composés mesurées à 20 ou 25°C. En fonction des données disponibles dans la bibliographie consultée, des valeurs sont également calculées pour une température de 12,5°C (température prédéfinie pour les milieux extérieurs dans MODUL'ERS) et une température de 20°C (température prédéfinie pour l'air intérieur dans MODUL'ERS). Toutefois, dans les cases « Value », « Min » et « Max » des paramètres P_{vap_Ts}, P_{vap_Ta} *et* $P_{vap_Ta_int}$, seules les valeurs avant ajustement sont reportées. Les valeurs ajustées en

fonction de la température sont données à titre d'information dans la case « Comment » des paramètres concernés.

Ces valeurs ajustées ont été calculées par interpolation linéaire entre les valeurs reportées par un même auteur à plusieurs températures, ou bien, par calcul à partir de la valeur ponctuelle donnée entre 20 et 25°C, de l'enthalpie de sublimation ou d'évaporation (selon que les valeurs d'enthalpie relevées se rapportent à l'état solide ou liquide[1] du composé) et de la relation adaptée de l'équation de Van't Hoff (Beyer et al, 2002 ; Mackay et al, 2006) :

$$\ln(P(T_2)) = \ln(P(T_1)) + \Delta H_{sub/evap} / R \times (1/T_1 - 1/T_2)$$ Équation 3

ou $$\ln(\frac{P(T_2)}{R \times T_2}) = \ln(\frac{P(T_1)}{R \times T_1}) + \Delta U_{sub/evap} / R \times (1/T_1 - 1/T_2)$$ Équation 4

avec $P(T_2)$: pression de vapeur du composé à la température T_2,

$P(T_1)$: pression de vapeur du composé à la température T_1,

$\Delta H_{sub/évap}$: enthalpie de sublimation/évaporation du composé,

$\Delta U_{sub/évap}$: variation d'énergie interne lors du changement de phase,

R : constante des gaz parfaits.

Pour les substances pour lesquelles aucune valeur ajustée n'est présentée, faute de donnée relevée pour l'enthalpie de sublimation ou d'évaporation, les utilisateurs de MODUL'ERS peuvent consulter le manuel de Mackay et al (2006), qui présente généralement pour chaque substance des relations donnant la pression de vapeur en fonction de la température. Il convient toutefois d'être prudent quant à l'utilisation de ces relations, qui, de l'une à l'autre, peuvent donner des valeurs très différentes.

Pour les métaux, la pression de vapeur est considérée comme nulle, sauf pour le mercure et ses composés.

Le tableau suivant donne les valeurs obtenues, exprimées en pascals et les sources de données utilisées.

[1] Dans ce dernier cas, l'équation 3 a été appliquée à la pression de vapeur à l'état liquide, calculée par le rapport de la pression de vapeur donnée à l'état solide et le ratio de fugacité à 20 ou 25°C. La pression de vapeur à l'état solide, ajustée à la température d'intérêt a ensuite été recalculée en utilisant le ratio de fugacité à la même température.

Tableau 4 : Pression de vapeur – **P_{vap} (Pa)**

Substance	Valeurs à 25°C				Valeurs ajustées		
	Valeur ponctuelle	Intervalle de valeurs	Sources	Commentaires	Valeur à 12,5°C	Valeur à 20°C	Sources - Estimation (I/C) *
Hydrocarbures Aromatiques Polycycliques							
Naphtalène	11,0		CHEMFATE, EPI SUITE, Mackay, PSC	Valeur ponctuelle égale à la moyenne des valeurs mesurées et recommandées par les trois sources	3,1	7,6	Mackay - Valeurs I et C à 12, 5°C. Valeur I à 20°C
Fluoranthène	$1,2.10^{-3}$		EPI SUITE, Mackay	Valeur mesurée	$3,4.10^{-4}$	$7,3.10^{-4}$	Mackay – Valeurs I
Benzo(a)pyrène	$7,2.10^{-7}$		CHEMFATE, EPI SUITE, Mackay	Valeur ponctuelle égale à la moyenne des valeurs mesurées et recommandées par les trois sources	$8,2.10^{-8}$	$3,0.10^{-7}$	Beyer – Valeur C
Composés Organiques Volatils							
Benzène	$1,26.10^{4}$		CHEMFATE, EPI SUITE, Mackay	Valeur mesurée	$7,0.10^{3}$	$1,0.10^{4}$	Mackay - Moyenne des valeurs I
Chlorure de vinyle	$3,8.10^{5}$		CHEMFATE, EPI SUITE, Mackay	Valeur ponctuelle égale à la moyenne des valeurs mesurées et recommandées par les trois sources	$2,8.10^{5}$	$3,4.10^{5}$	Mackay – Valeur C
Trichloroéthylène	$9,4.10^{3}$		CHEMFATE, EPI SUITE, Mackay	Valeur ponctuelle égale à la moyenne des valeurs mesurées et recommandées par les trois sources	$5,2.10^{3}$	$7,3.10^{3}$	Mackay - Valeur C à 12,5°C, valeur I à 20°C
Tétrachloroéthylène	$2,45.10^{3}$		CHEMFATE, EPI SUITE, Mackay	Valeur ponctuelle égale à la moyenne des valeurs mesurées et recommandées par les trois sources	$1,2.10^{3}$	$1,9.10^{3}$	Mackay - Valeurs C et I

* I : estimation par interpolation linéaire à partir de valeurs mesurées à plusieurs températures – C : estimation par calcul à partir des équations 3 ou 4

Tableau 4 (suite) : Pression de vapeur – P_{vap} (Pa)

Substance	Valeur à 25°C				Valeurs ajustées		
	Valeur ponctuelle	Intervalle de valeurs	Sources	Commentaires	Valeur à 12,5°C	Valeur à 20°C	Sources - Estimation (I/C) *
Dioxines							
2378 Tétrachlorodibenzodioxine	$2,0.10^{-7}$		US EPA, EPI SUITE, Mackay	Valeur mesurée	$2,2.10^{-8}$	$8,5.10^{-8}$	Mackay - Valeurs C
12378 Pentachlorodibenzodioxine	$5,8.10^{-8}$		US EPA, EPI SUITE, Mackay	Valeur estimée	$5,1.10^{-9}$	$2,2.10^{-8}$	Mackay – Valeurs C
123478 Hexachlorodibenzodioxine	$5,1.10^{-9}$		US EPA, Mackay	Valeur estimée	$4,2.10^{-10}$	$1,9.10^{-9}$	Mackay – Valeur C
123678 Hexachlorodibenzodioxine	$4,8.10^{-9}$		US EPA, EPI SUITE	Valeur estimée	$4,1.10^{-10}$	$1,8.10^{-9}$	Mackay – Valeur C
123789 Hexachlorodibenzodioxine	$6,5.10^{-9}$		US EPA, Mackay	Valeur estimée	$5,2.10^{-10}$	$2,4.10^{-9}$	Mackay – Valeur C
1234678 Heptachlorodibenzodioxine	$7,5.10^{-10}$		US EPA, EPI SUITE, Mackay	Valeur estimée	$5,3.10^{-11}$	$2,7.10^{-10}$	Mackay – Valeur C
Octachlorodibenzodioxine	$1,1.10^{-10}$		US EPA, EPI SUITE, Mackay	Valeur mesurée	$7,6.10^{-12}$	$3,9.10^{-11}$	Mackay – Valeur C

* I : estimation par interpolation linéaire à partir de valeurs mesurées à plusieurs températures – C : estimation par calcul à partir des équations 3 ou 4

Tableau 4 (suite) : Pression de vapeur – P_{vap} (Pa)

Substance	Valeur à 25°C				Valeurs ajustées		
	Valeur ponctuelle	Intervalle de valeurs	Sources	Commentaires	Valeur à 12,5°C	Valeur à 20°C	Sources - Estimation (I/C) *
Furannes							
2378 Tétrachlorodibenzofuranne	$2,0.10^{-6}$		US EPA, Mackay	Valeur estimée	$2,4.10^{-7}$	$8,8.10^{-7}$	Mackay - Valeurs C
12378 Pentachlorodibenzofuranne	$2,3.10^{-7}$		US EPA, EPI SUITE, Mackay	Valeur estimée	$2,3.10^{-8}$	$9,4.10^{-8}$	Mackay – Valeurs C
23478 Pentachlorodibenzofuranne	$3,5.10^{-7}$		US EPA, EPI SUITE, Mackay	Valeur estimée	$3,5.10^{-8}$	$1,4.10^{-7}$	Mackay – Valeur C
123478 Hexachlorodibenzofuranne	$3,2.10^{-8}$		US EPA, Mackay	Valeur estimée	$2,8.10^{-9}$	$1,2.10^{-8}$	Mackay – Valeur C
123678 Hexachlorodibenzofuranne	$2,9.10^{-8}$		US EPA, Mackay	Valeur estimée	$2,6.10^{-9}$	$1,1.10^{-8}$	Mackay – Valeur C
123789 Hexachlorodibenzofuranne	$3,7.10^{-8}$		US EPA	Pas de valeur – Moyenne des valeurs estimées pour les autres HCDF			
234678 Hexachlorodibenzofuranne	$2,7.10^{-8}$		US EPA, Mackay	Valeur estimée	$2,4.10^{-9}$	$1,0.10^{-8}$	Mackay – Valeur C
1234678 Heptachlorodibenzofuranne	$4,7.10^{-9}$		US EPA, EPI SUITE, Mackay	Valeur estimée	$3,7.10^{-10}$	$1,7.10^{-9}$	Mackay – Valeur C
1234789 Heptachlorodibenzofuranne	$1,4.10^{-8}$		US EPA	Valeur estimée	$1,1.10^{-9}$	$5,3.10^{-9}$	Mackay – Valeur C
Octachlorodibenzofuranne	$5,0.10^{-10}$		US EPA, EPI SUITE, Mackay	Valeur mesurée	$3,6.10^{-11}$	$1,8.10^{-10}$	Mackay – Valeur C

* I : estimation par interpolation linéaire à partir de valeurs mesurées à plusieurs températures – C : estimation par calcul à partir des équations 3 ou 4

*Tableau 4 (suite) : Pression de vapeur – **P_{vap} (Pa)***

Substance	Valeur à 20 ou 25°C				Valeurs ajustées		
	Valeur ponctuelle	Intervalle de valeurs	Sources	Commentaires	Valeur à 12,5°C	Valeur à 20°C	Sources - Estimation (I/C) *
Polychlorobiphényles indicateurs							
244' Trichlorobiphényle (28)	$1,6.10^{-2}$	$1,3.10^{-2}$ - $2,1.10^{-2}$	Mackay	Moyenne des valeurs mesurées à 25°C	$2,9.10^{-3}$	$8,3.10^{-3}$	Beyer - Valeurs C
22'55'' Tétrachlorobiphényle (52)	$4,9.10^{-3}$		Mackay	Valeur recommandée à 25°C	$8,3.10^{-4}$	$2,5.10^{-3}$	Beyer - Valeurs C
22'455' Pentachlorobiphényle (101)	$1,1.10^{-3}$		Mackay	Valeur recommandée à 25°C	$1,7.10^{-4}$	$5,3.10^{-4}$	Beyer - Valeurs C
22'344'5' Hexachlorobiphényle (138)	$6,4.10^{-5}$	$3,7.10^{-5}$ - $9,1.10^{-5}$	Mackay	Moyenne des deux valeurs mesurées à 20°C	$1,9.10^{-5}$		Mackay – Valeur C
22'44'55' Hexachlorobiphényle (153)	$1,2.10^{-4}$		Mackay	Valeur recommandée à 25°C	$1,7.10^{-5}$	$5,6.10^{-5}$	Mackay – Valeur C
22'344'55' Heptachlorobiphényle (180)	$3,6.10^{-6}$		US EPA	Valeur mesurée à 20°C	$1,0.10^{-6}$		Mackay – Valeur C

* I : estimation par interpolation linéaire à partir de valeurs mesurées à plusieurs températures – C : estimation par calcul à partir des équations 3 ou 4

Tableau 4 (suite) : Pression de vapeur – P_{vap} (Pa)

Substance	Valeur à 20 ou 25°C				Valeurs ajustées		
	Valeur ponctuelle	Intervalle de valeurs	Sources	Commentaires	Valeur à 12,5°C	Valeur à 20°C	Sources - Estimation (I/C) *
33'44' Tétrachlorobiphényle (77)	$5,9.10^{-5}$		US EPA, Mackay	Valeur ponctuelle égale à la moyenne des valeurs mesurées à 25°C et recommandées par les deux sources	$8,3.10^{-6}$	$2,8.10^{-5}$	Beyer - Valeurs C
344'5 Tétrachlorobiphényle (81)	$9,7.10^{-5}$	$7,4.10^{-5}$ - $1,1.10^{-4}$	US EPA, Mackay	Valeur ponctuelle égale à la moyenne de valeurs estimées à 25°C			
233'44' Pentachlorobiphényle (105)	$8,2.10^{-5}$		Mackay	Valeur mesurée à 20°C	$2,5.10^{-5}$		Beyer - Valeurs C
2344'5 Pentachlorobiphényle (114)	$5,6.10^{-5}$		US EPA, Mackay	Valeur mesurée à 20°C			Beyer - Valeurs C
23'44'5 Pentachlorobiphényle (118)	$4,5.10^{-5}$		Mackay	Valeur mesurée à 20°C	$1,4.10^{-5}$		Beyer - Valeurs C
3344'5 Pentachlorobiphényle (126)	$9,7.10^{-6}$		Mackay	Valeur mesurée à 20°C	$2,8.10^{-6}$		Beyer - Valeurs C
233'44'5 Hexachlorobiphényle (156)	$2,4.10^{-5}$	$1,4.10^{-5}$ - $6,9.10^{-5}$	US EPA, Mackay	Valeur ponctuelle égale à la moyenne de valeurs estimées à 25°C			
233'44'5' Hexachlorobiphényle (157)	$6,9.10^{-6}$		US EPA, Mackay	Valeur ponctuelle égale à la moyenne de valeurs estimées à 25°C			
23'44'55' Hexachlorobiphényle (167)	$2,4.10^{-5}$	$1,9.10^{-5}$ - $2,6.10^{-5}$	US EPA, Mackay	Valeur ponctuelle égale à la moyenne de valeurs estimées à 25°C			
33'44'55' Hexachlorobiphényle (169)	$3,9.10^{-6}$	$1,1.10^{-6}$ - $8,8.10^{-6}$	Mackay	Valeur ponctuelle égale à la moyenne de valeurs estimées à 25°C			
233'44'55' Heptachlorobiphényle (189)	$2,2.10^{-6}$	$1,1.10^{-6}$ - $5,8.10^{-6}$	US EPA, Mackay	Valeur ponctuelle égale à la moyenne de valeurs estimées à 25°C			

* I : estimation par interpolation linéaire à partir de valeurs mesurées à plusieurs températures – C : estimation par calcul à partir des équations 3 ou 4

*Tableau 4 (suite) : Pression de vapeur – **P_{vap} (Pa)***

Substance	Valeur ponctuelle	Sources	Commentaires
Métaux et méthylmercure			
Mercure inorganique	9,0. 10^{-3}	INERIS (2010), UE (2004)	Valeur pour le chlorure de mercure, mesurée à 20°C
Mercure élémentaire	2,6. 10^{-1}	CHEMFATE, EPI SUITE, UE (2005)	Valeur mesurée à 25°C
Méthylmercure	1,8	INERIS (2010)	Valeur pour le méthylmercure, mesurée à 25°C

3.6 CONSTANTE DE HENRY

La Loi de Henry énonce qu'à température constante et à saturation, la quantité de gaz dissous dans un liquide est proportionnelle à la pression partielle qu'exerce ce gaz sur le liquide.

D'après cette loi, on peut écrire :

$$H = \frac{P_{vap} \times M}{S}$$ Équation 5

avec H : constante de Henry ($Pa.m^3.mol^{-1}$),

P_{vap} : pression de vapeur (Pa),

M : masse molaire ($g.mol^{-1}$),

S : solubilité ($g.m^{-3}$).

Sous forme adimensionnelle, la constante de Henry correspond au ratio de la concentration d'une substance dans l'air sur la concentration de cette substance dans l'eau à l'équilibre :

$$H' = \frac{H}{R \times T} = \frac{C_{as}}{C_{es}}$$

avec H' : constante de Henry sous forme adimentionnelle (-),

R : constante des gaz parfaits (8,3143 $Pa.m^3. K^{-1}. mol^{-1}$),

M : masse molaire ($g.mol^{-1}$),

T : température ambiante (K),

C_e : concentration de polluant dans l'eau ($mg.m^{-3}$),

C_{as} : concentration de polluant dans l'air ($mg.m^{-3}$).

La constante de Henry dépend de la température, puisque cette dernière influe sur la pression de vapeur et la solubilité.

Ce paramètre est utilisé dans les modules *Sol, Eau souterraines, Eaux superficielles, Conc_gaz_air_exterieur, Conc_gaz_air_interieur_J_E, Conc_gaz_air_interieur_Volasoil* et les modules relatifs aux végétaux. Il permet d'estimer le coefficient de bioconcentration air-plante, de calculer le coefficient de transfert de masse du polluant entre les milieux « eaux superficielles » et « air » de calculer les coefficients de diffusion multiple dans les couches de sol et la concentration dans l'air et l'eau du sol. Selon les modules, les paramètres employés sont la constante de Henry à température du sol (*H_Ts*) ou la constante de Henry à température ambiante (*H_Ta*).

En présence de plusieurs valeurs mesurées cohérentes entre elles, la valeur ponctuelle à 20 ou 25°C a été définie comme la moyenne des valeurs mesurées et relevées dans ces sources. Dans le cas de valeurs mesurées très variables ou en l'absence de valeurs mesurées, la valeur ponctuelle a été définie à partir de l'équation 5 et des valeurs de masse molaire, de solubilité et de pression de vapeur fournies dans les tableaux 1,3 et 4. Les intervalles de variation présentés couvrent l'étendue des valeurs mesurées et des valeurs calculées (en l'absence de données mesurées ou en présence d'un nombre réduit de valeurs mesurées), avec les pressions de vapeur et les solubilités minimales et maximales données pour chaque substance. Lorsqu'une substance s'est vue affectée la solubilité ou la pression de vapeur des congénères du même groupe, en l'absence de valeurs spécifiques pour cette substance, l'intervalle de valeurs de la constante de Henry de cette substance intègre également les valeurs calculées, pour les congénères de ce groupe.

En fonction des données disponibles dans la bibliographie consultée, des valeurs sont également calculées pour une température de 12,5°C (température prédéfinie pour les milieux extérieurs dans MODUL'ERS). Toutefois, dans les cases « Value », « Min » et « Max » des paramètres *H_Ts* et *H_Ta*, seules les valeurs avant ajustement sont reportées. Les valeurs pour une température de 12,5°C sont données à titre d'information dans la case « Comment » des paramètres concernés.

Ces valeurs ont été calculées, soit par interpolation linéaire entre les valeurs reportées par un même auteur à plusieurs températures, soit en utilisant les valeurs de pression de vapeur et de solubilité précédemment estimées à 12,5°C, soit à partir de la relation adaptée de l'équation de Van't Hoff (Beyer et al, 2002 ; Mackay et al, 2006) :

$$\ln(H(T_2)) = \ln(H(T_1)) + \Delta H_{ae} / R \times (1/T_1 - 1/T_2)$$ Équation 6

ou $$\ln(\frac{H(T_2)}{R \times T_2}) = \ln(\frac{H(T_1)}{R \times T_1}) + \Delta U_{ae} / R \times (1/T_1 - 1/T_2)$$ Équation 7

avec $H(T_2)$: constante de Henry du composé à la température T_2,

$H(T_1)$: constante de Henry du composé à la température T_1,

ΔH_{ae} : variation d'enthalpie correspondant au passage du composé du milieu aqueux à l'atmosphère,

ΔU_{ae}: variation d'énergie interne correspondant au passage du composé du milieu aqueux à l'atmosphère,

R : constante des gaz parfaits.

En l'absence de valeur spécifique pour ΔH_{ae}, ΔH_{ae} a été estimée par : $\Delta H_{évap}$ - ΔH_{sol},

avec $\Delta H_{évap}$: enthalpie d'évaporation

et ΔH_{sol} : enthalpie de solubilisation.

Pour les substances pour lesquelles aucune valeur ajustée n'est présentée, les utilisateurs de MODUL'ERS peuvent consulter le manuel de Mackay et al (2006), qui présente généralement pour chaque substance des relations donnant la constante de Henry en fonction de la température. Toutefois, ces relations, peuvent donner de l'une à l'autre des valeurs très différentes. Une autre approche consiste à estimer la constante de Henry à 12,5°C à partir des valeurs de pressions de valeurs données à 25°C et 12,5°C dans le tableau 4 :

$$\frac{H(T_{12,5°C})}{H(T_{25°C})}) = \frac{P_{vap}(T_{12,5°C})}{P_{vap}(T_{25°C})}$$ Équation 8

Cette approximation est basée sur le fait que la solubilité de la substance (ou plus exactement son coefficient d'activité dans l'eau) varie, avec la température, de manière relativement faible par rapport à la pression de vapeur (Smith, 2007). Par rapport aux valeurs obtenues avec l'équation 6, cette approche donne des résultats le plus souvent inférieurs (valeurs de 4 fois inférieures à deux fois supérieures selon les substances). Il convient donc d'être prudent dans l'utilisation de ces valeurs.

Le tableau suivant donne les valeurs obtenues, exprimées en pascals.mètre cube par mole et les sources de données utilisées.

*Tableau 5 : Constante de Henry – **H (Pa.m^3.mol^{-1})***

Substance	Valeurs à 25°C				Valeur ajustée à 12,5°C	
	Valeur ponctuelle	Intervalle de valeurs	Sources	Commentaires	Valeur	Sources - Estimation (I/C) *
Hydrocarbures Aromatiques Polycycliques						
Naphtalène	48		CHEMFATE, EPI SUITE, Mackay	Valeur ponctuelle égale à la moyenne des valeurs mesurées : valeur proche de la valeur calculée	19	Mackay - Valeur I
Fluoranthène	1,0	$6{,}5.10^{-1}$ - 2,0	EPI SUITE, Mackay	Valeur ponctuelle égale à la moyenne des valeurs mesurées. Valeurs mesurées et calculées cohérentes	$3{,}6.10^{-1}$	Mackay – Valeur I
Benzo(a)pyrène	$5{,}3.10^{-2}$	$4{,}6.10^{-2}$ - $1{,}1.10^{-1}$	EPI SUITE, Mackay	Valeur ponctuelle égale à la moyenne des valeurs mesurées. Valeurs minimale et maximale calculées par l'Eq. 5. Valeurs mesurées et calculées cohérentes	$2{,}5.10^{-2}$	Mackay – Valeur I
Composés Organiques Volatils						
Benzène	$5{,}6.10^{2}$	$4{,}8.10^{2}$ - $6{,}4.10^{2}$	CHEMFATE, EPI SUITE, Mackay	Valeur ponctuelle égale à la moyenne des valeurs mesurées et recommandées par les trois sources	$3{,}3.10^{2}$	Mackay - Moyenne des valeurs I
Chlorure de vinyle	$2{,}8.10^{3}$		CHEMFATE, EPI SUITE, Mackay	Valeur ponctuelle égale à la moyenne des valeurs mesurées et recommandées par les trois sources	$1{,}6.10^{3}$	Mackay - Moyenne des valeurs I
Trichloroéthylène	$1{,}0.10^{3}$		CHEMFATE, EPI SUITE, Mackay	Valeur ponctuelle égale à la moyenne des valeurs mesurées et recommandées par les trois sources	$5{,}5.10^{2}$	Mackay - Moyenne des valeurs I
Tétrachloroéthylène	$1{,}8.10^{3}$		CHEMFATE, EPI SUITE, Mackay	Valeur ponctuelle égale à la moyenne des valeurs mesurées et recommandées par les trois sources	$8{,}1.10^{2}$	Mackay - Moyenne des valeurs I

* I : estimation par interpolation linéaire à partir de valeurs mesurées à plusieurs températures – C : estimation par calcul à partir de l'équation 6

*Tableau 5 (suite) : Constante de Henry – **H (Pa.m^3.mol^{-1})***

Substance	Valeur à 20 ou 25°C			Valeur à 12,5°C	
	Valeur ponctuelle	Intervalle de valeurs	Commentaires	Valeur	Commentaires
Dioxines					
2378 Tétrachlorodibenzodioxine	3,3	3,3 – 5,1	Valeur ponctuelle calculée par l'Eq. 5 avec S et Pvap à 25°C. Valeur maximale issue d'EPI SUITE	$9{,}2.10^{-1}$	Valeur calculée par l'Eq. 7 et ΔU donnée par Beyer
12378 Pentachlorodibenzodioxine	$6{,}8.10^{-2}$	$6{,}8.10^{-2}$-$1{,}8.10^{-1}$	Valeur ponctuelle calculée par l'Eq. 5 avec Pvap ajustée à 20°C. Valeur maximale calculée avec Pvap non ajustée	$2{,}6.10^{-2}$	Valeur ponctuelle calculée par l'Eq. 5 avec S et Pvap à 12,5°C.
123478 Hexachlorodibenzodioxine	$3{,}8.10^{-1}$	$3{,}3.10^{-1}$-$4{,}5.10^{-1}$	Valeurs calculées par l'Eq. 5 avec S et Pvap à 25°C	$6{,}8.10^{-2}$	Valeur calculée par l'Eq. 6 et ΔH issue de Mackay
123678 Hexachlorodibenzodioxine	$4{,}3.10^{-1}$	$3{,}3.10^{-1}$-$4{,}5.10^{-1}$	Valeur ponctuelle calculée par l'Eq. 5 avec S et Pvap à 25°C. Valeurs minimale et maximale du groupe des HCDD		
123789 Hexachlorodibenzodioxine	$5{,}8.10^{-1}$	$3{,}3.10^{-1}$-$5{,}8.10^{-1}$	Valeur ponctuelle calculée par l'Eq. 5 avec S et Pvap à 25°C. Valeur minimale du groupe des HCDD		
1234678 Heptachlorodibenzodioxine	$4{,}7.10^{-2}$	$4{,}7.10^{-2}$-$1{,}3.10^{-1}$	Valeur ponctuelle calculée par l'Eq. 5 avec P ajustée à 20°C. Valeur maximale calculée avec Pvap non ajustée (comme dans Mackay et al, 2006)	$7{,}1.10^{-3}$	Valeur calculée par l'Eq. 6 et ΔH issue de Mackay
Octachlorodibenzodioxine	$6{,}8.10^{-1}$	$1{,}3.10^{-1}$-$6{,}8.10^{-1}$	Valeur ponctuelle calculée par l'Eq. 5 avec S et Pvap à 25°C	$1{,}8.10^{-1}$	Valeur calculée par l'Eq. 6 et ΔH issue de Mackay

*Tableau 5 (suite) : Constante de Henry – **H (Pa.m^3.mol^{-1})***

Substance	Valeur à 25°C			Valeur à 12,5°C	
	Valeur ponctuelle	Intervalle de valeurs	Commentaires	Valeur	Commentaires
Furannes					
2378 Tétrachlorodibenzofuranne	1,0	$8{,}8.10^{-1}$ – 1,7	Valeur ponctuelle calculée par l'Eq. 5 avec Pvap ajustée à 22,7°C. Valeurs minimale et maximale données à 25°C. Valeur maximale issue de Mackay et EPISUITE		
12378 Pentachlorodibenzofuranne	$2{,}2.10^{-1}$	$2{,}2.10^{-1}$ - $5{,}0.10^{-1}$	Valeur ponctuelle calculée par l'Eq. 5 avec Pvap ajustée à 22,7°C. Valeur maximale issue du groupe des PCDD		
23478 Pentachlorodibenzofuranne	$3{,}3.10^{-1}$	$3{,}3.10^{-1}$- $5{,}0.10^{-1}$	Valeur ponctuelle calculée par l'Eq. 5 avec Pvap ajustée à 22,7°C. Valeur maximale calculée avec Pvap non ajustée		
123478 Hexachlorodibenzofuranne	$9{,}4.10^{-1}$	$9{,}4.10^{-1}$- 1,5	Valeur ponctuelle calculée par l'Eq. 5 avec Pvap ajustée à 22,7°C. Valeur maximale calculée avec Pvap non ajustée		
123678 Hexachlorodibenzofuranne	$4{,}0.10^{-1}$	$4{,}0.10^{-1}$- $6{,}2.10^{-1}$	Valeur ponctuelle calculée par l'Eq. 5 avec Pvap ajustée à 22,7°C. Valeur maximale calculée avec Pvap non ajustée		
123789 Hexachlorodibenzofuranne	1,1	$4{,}0.10^{-1}$- 1,5	Valeur ponctuelle calculée par l'Eq. 5 avec S à 22,7°C et Pvap à 25°C . Valeurs minimale et maximale issues du groupe des HCDD		
234678 Hexachlorodibenzofuranne	$5{,}0.10^{-1}$	$4{,}0.10^{-1}$- 1,5	Valeur ponctuelle calculée par l'Eq. 5 avec Pvap ajustée à 22,7°C. Valeurs minimale et maximale issues du groupe des HCDD		
1234678 Heptachlorodibenzofuranne	$9{,}0.10^{-1}$	$9{,}0.10^{-1}$- 1,4	Valeur ponctuelle calculée par l'Eq. 5 avec Pvap ajustée à 22,7°C. Valeur maximale calculée avec Pvap non ajustée		
1234789 Heptachlorodibenzofuranne	2,6	$9{,}0.10^{-1}$- 4,2	Valeur ponctuelle calculée par l'Eq. 5 avec Pvap ajustée à 22,7°C. Valeur maximale calculée avec Pvap non ajustée. Valeur minimale issue du groupe des HpCDD		
Octachlorodibenzofuranne	$1{,}9.10^{-1}$		Valeur ponctuelle calculée par l'Eq. 5 avec S et Pvap à 25°C	$3{,}5.10^{-2}$	Valeur calculée par l'Eq. 6 et ΔH issue de Mackay

*Tableau 5 (suite) : Constante de Henry – **H (Pa.m^3.mol^{-1})***

Substance	Valeurs à 20 ou 25°C				Valeur à 12,5°C	
	Valeur ponctuelle	Intervalle de valeurs	Sources	Commentaires	Valeur	Sources - Estimation (I/C) *
Polychlorobiphényles indicateurs						
244' Trichlorobiphényle (28)	25	20 - 36	EPI SUITE, Mackay	Valeur ponctuelle égale à la moyenne des valeurs mesurées à 25°C.	11	Mackay - Valeur I
22'55'' Tétrachlorobiphényle (52)	27	25 - 94	EPI SUITE, Mackay	Valeur ponctuelle égale à la moyenne des valeurs mesurées à 25°C.	16	Mackay - Valeur I
22'455' Pentachlorobiphényle (101)	30	9,1 -43	EPI SUITE, Mackay	Valeur ponctuelle égale à la moyenne des valeurs mesurées à 25°C.	17	Mackay – Valeur C
22'344'5' Hexachlorobiphényle (138)	15	2,1 - 69	EPI SUITE, Mackay	Valeur ponctuelle calculée par l'Eq. 5 avec S et Pvap à 20°C. Minimum et maximum : valeurs mesurées à 25°C	5,9	Mackay – Valeur C
22'44'55' Hexachlorobiphényle (153)	44	2,3 - 54	EPI SUITE, Mackay	Valeur ponctuelle calculée par l'Eq. 5 avec S et Pvap à 25°C. Minimum et maximum : valeurs mesurées à 25°C	13	Mackay – Valeur C
22'344'55' Heptachlorobiphényle (180)	3,3	1,0 - 37	EPI SUITE, Mackay	Valeur ponctuelle calculée par l'Eq. 5 avec S et Pvap à 20°C. Minimum et maximum : valeurs mesurées à 25°C	$6{,}8.10^{-1}$	Mackay – Valeur C

* I : estimation par interpolation linéaire à partir de valeurs mesurées à plusieurs températures – C : estimation par calcul à partir de l'équation 6

*Tableau 5 (suite) : Constante de Henry – **H (Pa.m^3.mol^{-1})***

Substance	Valeurs à 20 ou 25°C				Valeur à 12,5°C	
	Valeur ponctuelle	Intervalle de valeurs	Sources	Commentaires	Valeur	Sources - Estimation (I/C) *
Polychlorobiphényles dioxine-like						
33'44' Tétrachlorobiphényle (77)	14	9,5 - 30	Mackay	Valeurs à 25 °C. Valeur ponctuelle égale à la moyenne des valeurs mesurées. Minimum : valeur mesurée, maximum : valeur calculée par l'Eq. 5 avec la valeur minimale de S.	7,8	Mackay - Valeur I
344'5 Tétrachlorobiphényle (81)	9,1	6,9 – 25,8	Mackay	Valeurs minimale et ponctuelle calculées par l'Eq. 5 avec S et Pvap à 25°C. Maximum : valeur mesurée à 11°C et corrigée à 25°C	4,8	Mackay - Valeur C
233'44' Pentachlorobiphényle (105)	34	17 - 34	Mackay	Valeurs à 25 °C. Valeur ponctuelle égale à la moyenne des valeurs mesurées. Minimum : valeur calculée par l'Eq. 5 avec la valeur maximale de S.	8,9	Mackay - Valeur I
2344'5 Pentachlorobiphényle (114)	7,0		US EPA - Mackay	Valeur ponctuelle mesurée à 20°C, égale à la valeur calculée par l'Eq. 5 avec S et Pvap à 20°C	3,7	Mackay – Valeur C
23'44'5 Pentachlorobiphényle (118)	9,1	8,6 - 36	US EPA - Mackay	Valeur ponctuelle calculée par l'Eq. 5 avec S et Pvap à 20°C. Minimum : valeur mesurée à 20°C, maximum : valeur mesurée à 25°C	5,2	Mackay – Valeur C
3344'5 Pentachlorobiphényle (126)	21	2,8 - 21	Mackay	Valeurs à 25 °C. Valeur ponctuelle égale à la moyenne des valeurs mesurées. Minimum : valeur calculée par l'Eq. 5 avec la valeur maximale de S.	3,9	Mackay - Valeur I
233'44'5 Hexachlorobiphényle (156)	88	4,5 - 88	US EPA - Mackay	Valeurs à 25 °C. Valeur ponctuelle : valeur mesurée. Minimum : valeur calculée par l'Eq. 5, à 25°C avec la valeur maximale de S.	12	Mackay – Valeur C
233'44'5' Hexachlorobiphényle (157)	59	8,4 - 59	US EPA - Mackay	Valeurs à 25 °C. Valeur ponctuelle : valeur mesurée. Minimum : valeur calculée par l'Eq. 5, avec la valeur maximale de S.	5,8	Mackay – Valeur C

*Tableau 5 (suite) : Constante de Henry – **H (Pa.m^3.mol^{-1})***

Substance	Valeurs à 20 ou 25°C				Valeur à 12,5°C	
	Valeur ponctuelle	Intervalle de valeurs	Sources	Commentaires	Valeur	Sources - Estimation (I/C) *
23'44'55' Hexachlorobiphényle (167)	11	6,4 - 39	Mackay	Valeurs à 25 °C. Valeurs minimale et ponctuelle calculées par l'Eq. 5 avec S et Pvap. Maximum : valeur mesurée à 11°C et corrigée à 25°C	1,6	Mackay – Valeur C
33'44'55' Hexachlorobiphényle (169)	11	3,1 - 24	Mackay	Valeurs à 25 °C. Valeurs minimale et ponctuelle calculées par l'Eq. 5 avec S et Pvap. Maximum : valeur mesurée à 11°C et corrigée à 25°C	5,9	Mackay – Valeur C
233'44'55' Heptachlorobiphényle (189)	14	6,8 - 36		Valeurs calculée par l'Eq. 5 avec S et Pvap à 25°C	2,7	Mackay – Valeur C

* I : estimation par interpolation linéaire à partir de valeurs mesurées à plusieurs températures – C : estimation par calcul à partir de l'équation 6

Substance	Valeur ponctuelle	Intervalle de valeurs	Sources	Commentaires
Métaux et méthylmercure				
Mercure élémentaire	$7{,}2.\ 10^{2}$	$7{,}2.\ 10^{2}$ – $7{,}8.\ 10^{2}$	INERIS (2010), US EPA (1997)	Valeur ponctuelle définie à 20°C. Minimum et maximum définis entre 20 et 25°C
Mercure inorganique (Hg II)	$5{,}4.\ 10^{-5}$	$3{,}6.\ 10^{-5}$ – $7{,}2.\ 10^{-5}$	INERIS (2010), US EPA (1997)	Valeurs pour le chlorure de mercure. Valeur ponctuelle définie à 20°C. Minimum et maximum définis entre 20 et 25°C
Méthylmercure	$5{,}7.\ 10^{-2}$	$4{,}6.\ 10^{-2}$ – $6{,}6.\ 10^{-2}$	INERIS (2010), US EPA (1997)	Valeurs pour le chlorure de méthylmercure, définies à 25°C

3.7 COEFFICIENT DE PARTAGE OCTANOL-EAU

Le coefficient de partage octanol-eau(Kow) est le rapport de la concentration dans l'octanol et de la concentration dans l'eau d'une substance à l'équilibre entre ces deux phases.

Il a les dimensions suivantes : $M.L^{-3}$ octanol. $(M.L^{-3}$ eau$)^{-1}$.

Ce paramètre est défini dans les modules relatifs aux végétaux et aux animaux terrestres de MODUL'ERS, ainsi que dans le module *Par_Subst*. En l'absence de valeurs spécifiques, il permet, pour les composés hydrophobes, d'estimer les facteurs de bioconcentration air-plante, sol-plante, eau du sol-plante et le facteur de bioconcentration dans la graisse animale.

Dans MODUL'ERS, l'utilisateur peut définir au choix le Kow ou le log Kow.

Mackay et al (2006) indiquent que des mesures précises peuvent être obtenues pour des valeurs de Kow allant jusqu'à 10^7 (log Kow = 7) et que les valeurs supérieures à 10^8 (log Kow > 8) doivent être considérées avec « extrême précaution ». De fait, les valeurs mesurées sont parfois très dispersées (allant presque jusqu'à 2 unités logarithmiques de variation).

Les valeurs ont été définies à partir des sources décrites en section 2. Dans Mackay et al (2006), les valeurs recommandées pour le log Kow ne correspondent pas toujours à une des valeurs de mesure listées. Mais la recommandation de cette source bibliographique a été prise en compte, puisqu'elle s'appuie bien sur un travail de revue critique des différentes mesures, analysées, au regard des valeurs obtenues pour les autres congénères ou substances homologues. Si cette source ne recommande pas de valeur spécifique pour un congénère, c'est l'intervalle recommandé pour l'ensemble des congénères ayant le même nombre d'atomes de chlore, qui a été relevé.

Le tableau suivant donne les valeurs des log Kow mesurés entre 20 et 25°C. Comme les paramètres précédemment traités, le coefficient de partage octanol-eau dépend de la température. Grâce à la relation modifiée de Van't Hoff (Beyer et al, 2002 ; Mackay et al, 2006) et aux données de variation d'enthalpie ou d'énergie interne accompagnant le transfert de l'octanol vers l'eau, le coefficient de partage octanol-eau peut être ajusté par calcul à 12,5°C (température prédéfinie pour les milieux extérieurs dans MODUL'ERS) :

$$\ln(Kow(T_2)) = \ln(Kow(T_1)) + \Delta H_{ow} / R \times (1/T_1 - 1/T_2) \qquad \text{Équation 9}$$

avec $Kow(T_2)$: coefficient de partage octanol-eau du composé à la température T_2,

$Kow(T_1)$: coefficient de partage octanol-eau du composé à la température T_1,

ΔH_{ow} : variation d'enthalpie correspondant au passage du composé de la phase octanol à la phase aqueuse,

R : constante des gaz parfaits.

Toutefois, les données nécessaires à ce calcul n'ont pu être collectées que pour quelques substances. Par ailleurs, à partir des valeurs calculées pour ces substances, on observe qu'une diminution de température d'une dizaine de degrés a un impact limité sur la valeur du log Kow, avec parfois une variation du log Kow du même ordre de grandeur que l'incertitude sur la valeur définie à 20 ou 25°C. Ces valeurs ajustées sont données à titre indicatif dans le tableau suivant, mais ne sont pas reportées dans MODUL'ERS.

*Tableau 6 : Constante de partage octanol-eau – **log Kow (-)***

Substance	Valeur à 25°C				Valeur ajustée à 12,5°C	
	Valeur ponctuelle	Intervalle de valeurs	Sources	Commentaires	Valeur	Commentaires
Hydrocarbures Aromatiques Polycycliques						
Naphtalène	3,4	3,3 – 3,7	CHEMFATE, EPI SUITE, Mackay, PSC	Valeur ponctuelle égale à la moyenne des valeurs recommandées par les quatre sources	3,5	Valeur calculée par l'Eq. 9 et ΔH donnée par Beyer
Fluoranthène	5,2		EPI SUITE, Mackay	Valeur ponctuelle égale à la moyenne des deux valeurs recommandées	5,4	Valeur calculée par l'Eq. 9 et ΔH donnée par Beyer
Benzo(a)pyrène	6,0		CHEMFATE, EPI SUITE, Mackay	Valeur ponctuelle égale à la moyenne des valeurs recommandées par les trois sources	6,2	Valeur calculée par l'Eq. 9 et ΔH donnée par Beyer
Composés Organiques Volatils						
Benzène	2,1		CHEMFATE, EPI SUITE, Mackay, PSC	Valeur ponctuelle égale à la moyenne des valeurs recommandées par les quatre sources	2,1	Valeur calculée par l'Eq. 9 et ΔH donnée par Mackay
Chlorure de vinyle	1,5	1,4 – 1,6	Mackay, PSC	Valeur ponctuelle égale à la moyenne des deux valeurs recommandées		
Trichloroéthylène	2,4	2,3 – 2,5	CHEMFATE, EPI SUITE, Mackay, PSC	Valeur ponctuelle égale à la moyenne des valeurs recommandées par les quatre sources	2,4	Valeur calculée par l'Eq. 9 et ΔH donnée par Mackay
Tétrachloroéthylène	3,1	2,5 – 3,4	CHEMFATE, EPI SUITE, Mackay, PSC	Valeur ponctuelle égale à la moyenne des valeurs recommandées par les quatre sources	3,1	Valeur calculée par l'Eq. 9 et ΔH donnée par Mackay

*Tableau 6 (suite) : Constante de partage octanol-eau – **log Kow (-)***

Substance	Valeur à 25°C				Valeur ajustée à 12,5°C	
	Valeur ponctuelle	Intervalle de valeurs	Sources	Commentaires	Valeur	Commentaires
Dioxines						
2378 Tétrachlorodibenzodioxine	6,8		EPI SUITE, Mackay, US EPA		6,9	Valeur calculée par l'Eq. 9 et ΔH donnée par Beyer
12378 Pentachlorodibenzodioxine	6,6		EPI SUITE, Mackay, US EPA			
123478 Hexachlorodibenzodioxine	7,8		EPI SUITE, Mackay, US EPA		7,6	Valeur calculée par l'Eq. 9 et ΔH donnée par Beyer
123678 Hexachlorodibenzodioxine	7,3		US EPA	Pas de valeur mesurée. Valeur ponctuelle correspondant au log Kow moyen des HCDD		
123789 Hexachlorodibenzodioxine	7,3		US EPA	Pas de valeur mesurée. Valeur ponctuelle correspondant au log Kow moyen des HCDD		
1234678 Heptachlorodibenzodioxine	8,1	8,0 – 8,2	EPI SUITE, Mackay, US EPA	Valeur ponctuelle égale à la moyenne des valeurs recommandées par les trois sources		
Octachlorodibenzodioxine	8,20		EPI SUITE, Mackay, US EPA			

*Tableau 6 (suite) : Constante de partage octanol-eau – **log Kow (-)***

Substance	Valeur à 25°C			
	Valeur ponctuelle	Intervalle de valeurs	Sources	Commentaires
Furannes				
2378 Tétrachlorodibenzofuranne	6,5		EPI SUITE, Mackay	Valeur recommandée par l'US EPA non prise en compte car correspondant à une ancienne recommandation de Mackay et al.
12378 Pentachlorodibenzofuranne	6,8		EPI SUITE, Mackay, US EPA	
23478 Pentachlorodibenzofuranne	6,6	6,5 -6,9	EPI SUITE, Mackay, US EPA	Valeur ponctuelle égale à la moyenne des valeurs recommandées par les trois sources
123478 Hexachlorodibenzofuranne	7,0		Mackay, US EPA	
123678 Hexachlorodibenzofuranne	7,0		US EPA	Pas de valeur mesurée. Valeur ponctuelle correspondant au log Kow moyen des HCDD
123789 Hexachlorodibenzofuranne	7,0		US EPA	Pas de valeur mesurée. Valeur ponctuelle correspondant au log Kow moyen des HCDD
234678 Hexachlorodibenzofuranne	7,0		US EPA	Pas de valeur mesurée. Valeur ponctuelle correspondant au log Kow moyen des HCDD
1234678 Heptachlorodibenzofuranne	7,6	7,4 – 7,9	EPI SUITE, Mackay, US EPA	Valeur ponctuelle égale à la moyenne des valeurs recommandées par les trois sources
1234789 Heptachlorodibenzofuranne	7,4		US EPA	Pas de valeur mesurée. Valeur ponctuelle correspondant au log Kow moyen des HpCDD
Octachlorodibenzofuranne	8,20	8,0 – 8,6	EPI SUITE, Mackay, US EPA	Valeur ponctuelle égale à la moyenne des valeurs recommandées par les trois sources

*Tableau 6 (suite) : Constante de partage octanol-eau – **log Kow (-)***

Substance	Valeur à 25°C				Valeur ajustée à 12,5°C	
	Valeur ponctuelle	Intervalle de valeurs	Sources	Commentaires	Valeur	Commentaires
Polychlorobiphényles indicateurs						
244' Trichlorobiphényle (28)	5,7	5,6 -5,8	EPI SUITE, Mackay CHEMFATE	Valeur ponctuelle égale à la moyenne des valeurs recommandées ou données par les trois sources	5,9	Valeur calculée par l'Eq. 9 et ΔH donnée par Beyer
22'55'' Tétrachlorobiphényle (52)	6,1		EPI SUITE, Mackay CHEMFATE	Valeur ponctuelle égale à la moyenne des valeurs recommandées ou données par les trois sources	6,4	Valeur calculée par l'Eq. 9 et ΔH donnée par Beyer
22'455' Pentachlorobiphényle (101)	6,4	6,1 – 6,8	EPI SUITE, Mackay CHEMFATE	Valeur ponctuelle égale à la moyenne des valeurs recommandées ou données par les trois sources	6,5	Valeur calculée par l'Eq. 9 et ΔH donnée par Beyer
22'344'5' Hexachlorobiphényle (138)	7,0	6,7 – 7,3	Mackay	Intervalle de valeurs recommandées pour les HCB. Valeur ponctuelle égale au milieu de l'intervalle de valeurs	7,1	Valeur calculée par l'Eq. 9 et ΔH donnée par Beyer
22'44'55' Hexachlorobiphényle (153)	7,1	6,7 – 7,8	EPI SUITE, Mackay CHEMFATE	Valeur ponctuelle égale à la moyenne des valeurs recommandées ou données par les trois sources	7,3	Valeur calculée par l'Eq. 9 et ΔH donnée par Beyer
22'344'55' Heptachlorobiphényle (180)	6,9	6,7 – 7,0	Mackay	Intervalle de valeurs recommandées pour les HpCB. Valeur ponctuelle égale au milieu de l'intervalle de valeurs	6,9	Valeur calculée par l'Eq. 9 et ΔH donnée par Beyer

*Tableau 6 (suite) : Constante de partage octanol-eau – **log Kow (-)***

Substance	Valeur à 25°C				Valeur ajustée à 12,5°C	
	Valeur ponctuelle	Intervalle de valeurs	Sources	Commentaires	Valeur	Commentaires
Polychlorobiphényles dioxine-like						
33'44' Tétrachlorobiphényle (77)	6,5		EPI SUITE, Mackay, US EPA	Valeur ponctuelle égale à la moyenne des valeurs recommandées par les trois sources	6,7	Valeur calculée par l'Eq. 9 et ΔH donnée par Beyer
344'5 Tétrachlorobiphényle (81)	6,1	5,6 -6,5	Mackay,	Intervalle de valeurs recommandées pour les TCB. Valeur ponctuelle égale au milieu de l'intervalle de valeurs		
233'44' Pentachlorobiphényle (105)	6,3	6,0 – 6,8	EPI SUITE, Mackay, US EPA	Valeur ponctuelle égale à la moyenne des valeurs recommandées par les trois sources	6,4	Valeur calculée par l'Eq. 9 et ΔH donnée par Beyer
2344'5 Pentachlorobiphényle (114)	6,4	6,2 – 6,5	Mackay	Intervalle de valeurs recommandées pour les PeCB. Valeur ponctuelle égale au milieu de l'intervalle de valeurs		
23'44'5 Pentachlorobiphényle (118)	6,7	6,2 – 7,1	EPI SUITE, Mackay, CHEMFATE	Valeur ponctuelle égale à la moyenne calculée à partir de la valeur donnée par EPI SUITE et le milieu de l'intervalle de valeurs recommandées par Mackay et al pour les PeCB. Minimum égal à la valeur inférieure de cet intervalle, maximum égale à la valeur donnée par EPI SUITE	6,9	Valeur calculée par l'Eq. 9 et ΔH donnée par Beyer
3344'5 Pentachlorobiphényle (126)	6,4	6,2 – 6,5	Mackay	Intervalle de valeurs recommandées pour les PeCB. Valeur ponctuelle égale au milieu de l'intervalle de valeurs	6,5	Valeur calculée par l'Eq. 9 et ΔH donnée par Beyer

*Tableau 6 (suite) : Constante de partage octanol-eau – **log Kow (-)***

Substance	Valeur à 25°C			
	Valeur ponctuelle	Intervalle de valeurs	Sources	Commentaires
Polychlorobiphényles dioxine-like				
233'44'5 Hexachlorobiphényle (156)	7,3	6,7 – 7,6	EPI SUITE, Mackay, US EPA	Valeur ponctuelle égale à la moyenne des valeurs données par EPI SUITE et l'US EPA et le milieu de l'intervalle de valeurs recommandées par Mackay et al pour les HCB. Minimum égal à la valeur inférieure de cet intervalle, maximum égal à la valeur donnée par EPI SUITE
233'44'5' Hexachlorobiphényle (157)	7,3	6,7 – 7,6	EPI SUITE, Mackay, US EPA	Valeur ponctuelle égale à la moyenne des valeurs données par EPI SUITE et l'US EPA et le milieu de l'intervalle de valeurs recommandées par Mackay et al pour les HCB. Minimum égal à la valeur inférieure de cet intervalle, maximum égal à la valeur donnée par EPI SUITE
23'44'55' Hexachlorobiphényle (167)	7,2	6,7 – 7,5	EPI SUITE, Mackay, US EPA	Valeur ponctuelle égale à la moyenne des valeurs données par EPI SUITE et l'US EPA et le milieu de l'intervalle de valeurs recommandées par Mackay et al pour les HCB. Minimum égal à la valeur inférieure de cet intervalle, maximum égal à la valeur donnée par EPI SUITE
33'44'55' Hexachlorobiphényle (169)	7,3	6,7 – 7,5	EPI SUITE, Mackay, US EPA	Valeur ponctuelle égale à la moyenne des valeurs données par EPI SUITE et l'US EPA et le milieu de l'intervalle de valeurs recommandées par Mackay et al pour les HCB. Minimum égal à la valeur inférieure de cet intervalle, maximum égal à la valeur donnée par l'US EPA
233'44'55' Heptachlorobiphényle (189)	6,9	6,7 – 7,0	Mackay	Intervalle de valeurs recommandées pour les HpCB. Valeur ponctuelle égale au milieu de l'intervalle de valeurs

3.8 COEFFICIENT DE PARTAGE CARBONE ORGANIQUE-EAU

Le coefficient de partage carbone organique-eau (Koc) correspond à la masse de substance adsorbée par unité de poids de carbone organique sur la concentration de substance dans l'eau, quand l'équilibre est atteint entre les deux phases.

Ce coefficient a les dimensions suivantes : $M.M^{-1}$carbone organique. $(M.L^{-3}$ eau$)^{-1,}$ soit $L^3.M^{-1}$.

Ce paramètre est défini dans les modules *Sol, Conc_gaz_air_exterieur, Conc_gaz_air_interieur_J_E, Conc_gaz_air_interieur_Volasoil Eaux_ superficielles, Eaux_souterraines*, dans les modules relatifs aux végétaux, ainsi que dans le module *Par_Subst*. Il est utilisé pour estimer le coefficient de partage entre les particules du sol et l'eau du sol (*Kd*) et le coefficient de partage entre les particules en suspension et les eaux superficielles (*Kd_MES*) pour les substances organiques.

Dans MODUL'ERS, l'utilisateur peut définir au choix le Koc ou le log Koc.

Des valeurs variant de plusieurs ordres de grandeur peuvent être trouvées dans la littérature pour une substance donnée. Ces différences de valeurs sont liées à l'existence de différentes méthodes de mesure et peuvent être dues à des erreurs de mesure. Mais le coefficient de partage carbone organique-eau est aussi affecté d'une variabilité dépendant des propriétés des sols et des sédiments.

Le tableau suivant donne les valeurs du log Koc. La température correspondant aux valeurs mesurées n'est pas toujours indiquée dans les sources consultées et aucun ajustement n'a été fait en fonction de la température du milieu pour le paramètre.

A partir des sources sélectionnées, un intervalle de valeurs a été défini couvrant l'ensemble des données mesurées sur des sols et des sédiments naturels (les données issues de sols ou sédiments traités et celles mesurées sur acides humiques ou fulviques n'ont pas été prises en compte). La valeur ponctuelle a été définie comme le milieu de l'intervalle de valeurs lorsque les données relevées étaient des plages de valeurs, ou en calculant la moyenne des valeurs relevées, lorsqu'il s'agissait de données ponctuelles. Cette moyenne a été calculée à partir de l'ensemble des valeurs relevées dans les différentes sources (pas uniquement à partir de la valeur recommandée par les sources), après élimination des doublons (données de même origine, citées par plusieurs sources).

En l'absence de données issues de la mesure (ou en présence de seulement une à deux données), la relation de Seth et al (1999) a été utilisée pour estimer le coefficient de partage carbone organique-eau. Cette relation permet de définir le log Koc en fonction du log Kow des substances organiques hydrophobes. De nombreuses relations existent pour estimer le coefficient de partage carbone organique-eau, notamment en fonction du coefficient de partage octanol-eau[2]. Celle-ci a été privilégiée car :

[2] Ainsi, la relation établie par Karickhoff et al (1979), utilisée dans la méthode HHRAP (US EPA, 2005a) et dans le rapport sur les paramètres physico-chimiques des dioxines (référencé INERIS DRC-03-45959/ERSA – n°272), n'est établie que sur dix substances, principalement des hydrocarbures aromatiques polycycliques).

- elle est établie à partir de l'étude de la corrélation de log(Koc/Kow) avec log Kow (et non de log Koc en fonction de log Kow comme dans de nombreux cas), ce qui permet de mieux prendre en compte la variabilité du coefficient de partage carbone organique-eau, comme le démontrent les auteurs ;
- pour les substances avec un coefficient de partage octanol-eau supérieur à 5,5, les valeurs de Koc utilisées pour établir la relation de corrélation ont été revues et corrigées (à partir du coefficient de partage sol-air et du coefficient de partage air-eau, pour lesquels des mesures plus précises peuvent être obtenues d'après les auteurs), pour éviter d'intégrer des valeurs sous-estimées, du fait de mesures basées sur un temps de mise en contact de la substance avec les deux phases souvent insuffisant pour l'établissement de l'équilibre ;
- un intervalle de confiance à 95% a été calculé pour la pente et la valeur à l'ordonnée de la relation établie, permettant d'encadrer les valeurs estimées par un intervalle d'incertitude.

La relation établie par Seth et al. est la suivante:

$$\log Koc = -0.48 + \log Kow$$ Équation 10

Elle a été établie à partir de 117 données, pour des substances organiques non ionisables, présentant un log Kow allant de 1,2 à 7,4. Les bornes inférieure et supérieure du coefficient de partage carbone organique-eau peuvent être estimées par les équations suivantes :

$$\log Koc = -0.86 + \log Kow$$ Équation 11

$$\log Koc = -0{,}05 + \log Kow$$ Équation 12

Remarque : Pour les substances organiques ionisables (substances comportant des groupes fonctionnels pouvant s'ioniser pour certaines plages de pH, comme les acides carboxyliques, les phénols ou les amines), ces relations ne sont pas directement utilisables. En effet la fraction ionisée et la fraction de charge neutre présentent des coefficients d'adsorption différents. Ainsi, les acides organiques, ont une fraction ionisée chargée négativement qui présente une tendance à l'adsorption plus faible, tandis que les bases organiques ont une fraction ionisée positive dont le coefficient d'adsorption peut être plus élevé que la fraction neutre.

Tableau 7 : Constante de partage carbone organique-eau – **log Koc (l.kg^{-1})**

Substance	Valeur ponctuelle	Intervalle de valeurs	Sources	Commentaires
Hydrocarbures Aromatiques Polycycliques				
Naphtalène	3,0	2,4 – 4,4	CHEMFATE, EPI SUITE, Mackay, PSC	Valeurs mesurées. Valeur ponctuelle égale à la moyenne des valeurs relevées
Fluoranthène	4,9	4,5- 6,4	CHEMFATE, EPI SUITE, Mackay,	Valeurs mesurées. Valeur ponctuelle égale à la moyenne des valeurs relevées
Benzo(a)pyrène	6,6	5,3 – 6,8	CHEMFATE, EPI SUITE, Mackay	Valeurs mesurées. Valeur ponctuelle égale à la moyenne des valeurs relevées
Composés Organiques Volatils				
Benzène	1,7	1,5 – 1,9	CHEMFATE, EPI SUITE, Mackay	Valeurs mesurées. Valeur ponctuelle égale à la moyenne des valeurs relevées
Chlorure de vinyle	1,7	1,8 – 2,9	Mackay	Valeurs mesurées. Valeur ponctuelle égale à la moyenne des valeurs relevées
Trichloroéthylène	2,0	1,5 – 2,5	CHEMFATE, EPI SUITE, Mackay	Valeurs mesurées. Valeur ponctuelle égale à la moyenne des valeurs relevées
Tétrachloroéthylène	2,4	1,8 – 2,9	CHEMFATE, EPI SUITE, Mackay	Valeurs mesurées. Valeur ponctuelle égale à la moyenne des valeurs relevées

Tableau 7 (suite) : Constante de partage carbone organique-eau – **log Koc (l.kg^{-1})**

Substance	Valeur ponctuelle	Intervalle de valeurs	Sources	Commentaires
Dioxines				
2378 Tétrachlorodibenzodioxine	6,6	5,8 – 7,6	EPI SUITE, Mackay, PSC	Valeurs mesurées. Valeur ponctuelle égale à la moyenne des valeurs relevées
12378 Pentachlorodibenzodioxine	6,2	5,8 – 6,6		Valeur calculée par la relation de Seth et al
123478 Hexachlorodibenzodioxine	7,3	6,9 – 7,7		Valeur calculée par la relation de Seth et al
123678 Hexachlorodibenzodioxine	6,8	6,4 – 7,2		Valeur calculée par la relation de Seth et al
123789 Hexachlorodibenzodioxine	6,8	6,4 – 7,2		Valeur calculée par la relation de Seth et al
1234678 Heptachlorodibenzodioxine	7,6	7,1 – 8,1		Valeur calculée par la relation de Seth et al
Octachlorodibenzodioxine	7,7	7,3 – 11,0		Valeurs ponctuelle et minimale calculées par la relation de Seth et al Borne supérieure : valeur mesurée sur des sédiments

Tableau 7 (suite) : Constante de partage carbone organique-eau – **log Koc (l.kg^{-1})**

Substance	Valeur ponctuelle	Intervalle de valeurs	Sources	Commentaires
Furannes				
2378 Tétrachlorodibenzofuranne	6,0	5,2 – 6,5		Valeurs ponctuelle et maximale calculées par la relation de Seth et al Borne inférieure : valeur mesurée sur des sédiments
12378 Pentachlorodibenzofuranne	6,3	5,9 – 6,7		Valeur calculée par la relation de Seth et al
23478 Pentachlorodibenzofuranne	6,2	5,6 - 6,9		Valeur calculée par la relation de Seth et al
123478 Hexachlorodibenzofuranne	6,5	6,1 – 8,8		Valeurs ponctuelle et minimale calculées par la relation de Seth et al Borne supérieure : valeur mesurée sur des sédiments
123678 Hexachlorodibenzofuranne	7,0	6,6 – 7,4		Valeur calculée par la relation de Seth et al
123789 Hexachlorodibenzofuranne	6,8	6,5 – 7,3		Valeur calculée par la relation de Seth et al
234678 Hexachlorodibenzofuranne	6,9	6,6 – 7,4		Valeur calculée par la relation de Seth et al
1234678 Heptachlorodibenzofuranne	7,1	6,5 – 9,1		Valeurs ponctuelle et minimale calculées par la relation de Seth et al Borne supérieure : valeur mesurée sur des sédiments
1234789 Heptachlorodibenzofuranne	6,9	6,5 – 9,8		Valeurs ponctuelle et minimale calculées par la relation de Seth et al Borne supérieure : valeur mesurée sur des sédiments
Octachlorodibenzofuranne	7,7	7,1 – 10,5		Valeurs ponctuelle et minimale calculées par la relation de Seth et al Borne supérieure : valeur mesurée sur des sédiments

Tableau 7 (suite) : Constante de partage carbone organique-eau – **log Koc (l.kg^{-1})**

Substance	Valeur ponctuelle	Intervalle de valeurs	Sources	Commentaires
Polychlorobiphényles indicateurs				
244' Trichlorobiphényle (28)	4,5	3,3 - 5,3	EPI SUITE, Mackay	Valeurs mesurées. Valeur ponctuelle égale à la moyenne des valeurs relevées
22'55'' Tétrachlorobiphényle (52)	5,1	3,8 – 6,4	EPI SUITE, Mackay, CHEMFATE	Valeurs mesurées. Valeur ponctuelle égale au milieu de l'intervalle des valeurs relevées
22'455' Pentachlorobiphényle (101)	5,5	4,0 – 7,0	EPI SUITE, Mackay	Valeurs mesurées. Valeur ponctuelle égale au milieu de l'intervalle des valeurs relevées
22'344'5' Hexachlorobiphényle (138)	6,6	5,5 – 7,6	EPI SUITE, Mackay	Valeurs mesurées. Valeur ponctuelle égale au milieu de l'intervalle des valeurs relevées
22'44'55' Hexachlorobiphényle (153)	6,5	5,3 – 7,7	EPI SUITE, Mackay, CHEMFATE	Valeurs mesurées. Valeur ponctuelle égale au milieu de l'intervalle des valeurs relevées
22'344'55' Heptachlorobiphényle (180)	6,6	5,4 – 7,8	Mackay	Valeurs mesurées. Valeur ponctuelle égale au milieu de l'intervalle des valeurs relevées

*Tableau 7 (suite) : Constante de partage carbone organique-eau – **log Koc (l.kg^{-1})***

Substance	Valeur ponctuelle	Intervalle de valeurs	Sources	Commentaires
Polychlorobiphényles dioxine-like				
33'44' Tétrachlorobiphényle (77)	6,1	5,7 – 6,5		Valeurs calculées par la relation de Seth et al
344'5 Tétrachlorobiphényle (81)	5,6	4,7 – 6,4		Valeurs calculées par la relation de Seth et al
233'44' Pentachlorobiphényle (105)	5,8	5,1 – 6,7	Mackay	Valeurs calculées par la relation de Seth et al. Valeur ponctuelle égale à l'unique donnée de mesure relevée
2344'5 Pentachlorobiphényle (114)	5,9	5,3 – 6,4		Valeurs calculées par la relation de Seth et al
23'44'5 Pentachlorobiphényle (118)	6,1	4,8 – 7,4	Mackay	Valeurs mesurées. Valeur ponctuelle égale au milieu de l'intervalle des valeurs relevées
3344'5 Pentachlorobiphényle (126)	5,9	5,3 – 6,4		Valeurs calculées par la relation de Seth et al
233'44'5 Hexachlorobiphényle (156)	6,8	5,8 – 7,5		Valeurs calculées par la relation de Seth et al
233'44'5' Hexachlorobiphényle (157)	6,8	5,8 – 7,5		Valeurs calculées par la relation de Seth et al
23'44'55' Hexachlorobiphényle (167)	6,7	5,8 – 7,4		Valeurs calculées par la relation de Seth et al
33'44'55' Hexachlorobiphényle (169)	6,8	5,8 – 7,4		Valeurs calculées par la relation de Seth et al
233'44'55' Heptachlorobiphényle (189)	6,4	5,8 – 6,9		Valeurs calculées par la relation de Seth et al

3.9 COEFFICIENTS DE PARTAGE ENTRE LES PARTICULES DU SOL ET L'EAU DU SOL, ET ENTRE LES PARTICULES EN SUSPENSION ET LES EAUX SUPERFICIELLES

Ces coefficients de partage permettent de décrire l'adsorption des substances sur un matériau comme le sol ou les particules sédimentaires d'une part et l'eau du sol ou les eaux superficielles d'autre part.

Ce coefficient a les dimensions suivantes : $M.M^{-1}$ particules. $(M.L^{-3}$ eau$)^{-1}$, soit $L^3.M^{-1}$.

Le coefficient entre les particules du sol et l'eau du sol est défini dans les modules *Sol , Eaux_superficielles, Eaux_souterraines*, *Conc_gaz_air_exterieur, Conc_gaz_air_interieur_J_E, Conc_gaz_air_interieur_Volasoil,* dans les modules relatifs aux végétaux et dans le module *Par_Sol*. Selon le module et la zone considérée (zone insaturée ou zone saturée du sol), il est désigné par les symboles *Kd* ou Kd_{aq}.

Le coefficient entre les particules en suspension et les eaux superficielles est défini dans les modules *Eaux_superficielles, et Par_Envir.* Il est désigné par le symbole Kd_{MES}.

Pour les substances organiques neutres, les coefficients de partage particules du sol-eau du sol (*Kd*) et particules en suspension-eaux superficielles (Kd_{MES}) sont calculés à partir du coefficient de partage carbone organique-eau (*Koc*) et de la teneur en carbone organique du sol (foc) ou des particules en suspension (foc_{MES}), car le carbone organique est considéré, pour ces substances, comme le principal adsorbant. Les relations suivantes sont donc utilisées.

$$Kd = Koc * foc \qquad \text{Équation 13}$$

et $$K_{d_MES} = Koc * foc_{MES} \qquad \text{Équation 14}$$

Pour les substances organiques présentant une fraction ionisée et une fraction neutre en fonction du pH, les coefficients de partage entre les particules du sol et l'eau du sol d'une part, et entre les particules en suspension et les eaux superficielles d'autre part, dépendent du pourcentage de la fraction ionisée dans le milieu et du coefficient d'adsorption de chacune des formes (cf. US EPA, 1996).

Pour les substances inorganiques, les équations 13 et 14 ne s'appliquent pas. Les coefficients de partage dépendent de la forme chimique de la substance et de nombreuses caractéristiques du milieu, comme le pH, le potentiel rédox, la capacité d'échange cationique, la concentration des sites d'adsorption, la composition chimique du milieu (teneur en oxydes de fer, ions majoritaires, ….).

Les coefficients de partage *Kd* et Kd_{MES} peuvent donc présenter une grande variabilité, allant classiquement de deux à trois ordres de grandeur. L'US EPA (1999) fait même mention de valeurs distantes de six ordres de grandeur pour un même contaminant. L'existence de différentes méthodes de mesure, présentant chacune des limites, contribue aussi à la variabilité des valeurs mesurées.

Il n'est donc pas possible de définir une valeur ponctuelle pour ces paramètres. En revanche, il est important de collecter des données correspondant à un ensemble de situations différentes pour pouvoir tenir compte de la variabilité, y compris sur un même site.

3.9.1 SOURCES DE DONNEES CONSULTEES POUR LES METAUX ET LE METHYLMERCURE

Pour définir ces paramètres, un document du RIVM et quatre documents de l'US EPA ont été consultés.

- Dans un rapport de 1992, le RIVM présente des coefficients de partage pour les sols et les particules en suspension dans l'eau pour différents métaux, afin de définir des objectifs de qualité dans les sols et les sédiments à partir de concentrations maximales sans impact dans les eaux. Pour les sols, les moyennes et les écarts types issues de deux publications (Buchter et al, 1989 ; King, 1988) sont fournis. Les conditions expérimentales sont décrites (expérimentation en batch, temps d'équilibration, étendue du pH et des teneurs en argile des sols, concentration initiale de la solution). Selon les métaux, ces données correspondent à des mesures effectuées sur un nombre de sols allant de 1 à 26. Néanmoins, les valeurs issues de la publication de King donne des valeurs (beaucoup plus élevées que celle de Buchter et al.) qui semblent peu appropriées, car mesurées pour des concentrations dans la solution à l'équilibre généralement beaucoup plus élevées que les concentrations environnementales.

  Pour les particules en suspension, les données sont plus limitées. Des valeurs calculées à partir de concentrations moyennes dans l'eau et les sédiments sont fournies à partir de cinq publications.

- Dans le document intitulé Soil Screening Guidance (1996), l'US EPA propose des valeurs de Kd pour les sols pour plusieurs substances inorganiques et plusieurs pH. Ces valeurs ont été estimées à partir de relations empiriques dépendant du pH (As III, Cr VI, Se) ou d'isothermes d'adsorption calculés à partir du modèle de géochimie MINTEQA2 (Cr III, Cd et Ni). Les valeurs proposées dans ce document de l'US EPA n'ont pas été utilisées car :
  - le mode de définition des relations empiriques présentées n'est pas décrit ;
  - les résultats de modélisation reposent sur une compréhension de la géochimie et des données thermodynamiques incomplètes (paramètres non pris en compte comme le potentiel rédox, adsorption basée uniquement sur les oxydes de fer et la matière organique) et donc une représentation partielle de la réalité. En l'absence de données, les choix de modélisation effectués tendent à majorer le potentiel de lixiviation et donc à minorer les valeurs de Kd estimés. De tels choix conduisent toutefois à sous-estimer les concentrations résiduelles dans les sols ;
  - les simulations réalisées, en prenant en compte une valeur fixe pour un certain nombre de caractéristiques de sol ne sont pas représentatives de toutes les situations d'intérêt (par exemple, composition de l'eau du sol définie à partir de la concentration médiane de treize composés chimiques, teneur en carbone organique fixée à 0,2% : valeur faible pour un sol de surface). Au final, les valeurs présentées dans le document correspondent à une concentration d'oxydes de fer dans le sol unique (correspond à la concentration moyenne mesurée dans six échantillons d'aquifères américains).

Les trois autres documents de l'US EPA reposent sur une recherche étendue et une compilation de données de mesure issues de la littérature scientifique.

- L'Office of Air and Radiation (OAR) de l'US EPA (1999) a collecté des valeurs de coefficients de partage particules du sol-eau du sol pour le cadmium, le plomb et le chrome VI, avec les informations disponibles sur les caractéristiques du sol correspondant. Les auteurs ont cherché à identifier des relations pouvant exister entre le Kd et les paramètres du sol. Pour ces trois composés, ils ont défini des matrices donnant un intervalle de variation du Kd en fonction de 1 ou plusieurs de ces paramètres.

  Pour le cadmium, 174 valeurs correspondant à des sols naturels (mesurées avec une solution ayant une faible force ionique, pour des concentrations de cadmium inférieures à 10^{-5} M, un pH compris entre 4 et 10, une concentration faible de substances humiques et en l'absence de chélatant organique) ont été obtenues. Une corrélation entre le pH et coefficient de partage sol-eau du sol a pu être mise en évidence. Sur cette base, la relation suivante a été définie :

  $$Kd = - 0,54 + 0,45 \times pH \qquad (r = 0,75)$$ Équation 15

  L'OAR indique qu'autour de la valeur estimée, à partir de cette relation, le Kd peut varier de deux ordres de grandeur pour un pH donné. L'analyse par régression multiple n'a pas permis de mettre en évidence de variables prédictives complémentaires permettant d'améliorer la relation.

  L'OAR donne en outre des intervalles de variation du Kd pour trois plages de pH.

  Pour le plomb, les données collectées laissent principalement apparaître une corrélation du Kd avec le pH et avec la concentration de la solution à l'équilibre. Le Kd augmente quand le pH augmente et quand la concentration de la solution à l'équilibre diminue. Sur la base de deux publications, l'ORD présente un tableau donnant des intervalles de valeurs du Kd pour le plomb en fonction de ces deux paramètres.

  Pour le chrome VI, le pH a aussi été identifié comme un paramètre influant le Kd (le Kd diminue quand le pH augmente). Les paramètres susceptibles de réduire le Cr VI en Cr III comme les oxydes de fer peuvent également jouer un rôle. La teneur en fer extractible par citrate-bicarbonate dithionite (CBD) est ainsi retenue comme indicateur de la capacité du sol à réduire le Cr VI en Cr III. Enfin, la présence d'ions compétiteurs comme le HPO_4^{2-}, le $H_2PO_4^-$, le SO_4^{2-}, le CO_3^{2-} et le HCO_3^- tend à réduire le Kd. Sur la base des données disponibles, l'OAR a donc défini un tableau donnant des intervalles de valeurs du Kd pour le chrome VI en fonction du pH, de la teneur en fer extractible par le CBD et la teneur en sulfate sous forme soluble.

  Les plages de variation définies par l'OAR pour le Kd du cadmium, du plomb et du chrome VI en fonction des facteurs décrits ci-dessus sont reproduites en annexe.

- L'Office of Research and Development (ORD) de l'US EPA a conduit une recherche de coefficients de partage pour plusieurs matrices, notamment entre le sol et l'eau du sol, les particules en suspension et les eaux superficielles, ainsi que les sédiments et l'eau des sédiments. Le document final décrivant cette étude est daté de 2005, mais la version provisoire (identique à la version finale) date de 1999.

Une base de données a été élaborée à partir de critères stricts. Elle intègre des données issues d'articles originaux et de rapports, mais exclut celles issues de compilations. Les valeurs incluses devaient avoir été déterminées pour un milieu naturel (pas de phase minérale pure, pas de sol traité), en utilisant un extractant à faible force ionique, avec une faible concentration totale de métal (quand le coefficient de partage avait été déterminé pour plusieurs concentrations, seule la valeur correspondant à la concentration la plus faible a été prise en compte), un pH compris entre 4 et 10 et en l'absence de chélatant organique. Par ailleurs, pour éviter des biais de sur-représentation, une seule valeur a été relevée pour une matrice particulière. Ainsi, en présence de plusieurs valeurs mesurées pour un même sol, avec des conditions expérimentales différentes (variation du pH par exemple), seule la valeur la plus proche des conditions naturelles a été incluse. De même, si dans la même étude, le coefficient avait été mesuré sur colonne et en batch, seule la valeur mesurée en batch a été utilisée. Les caractéristiques des milieux susceptibles d'influer sur le coefficient de partage ont également été collectées.

A partir de cette base de données, des distributions statistiques ont été définies pour les métaux et les matrices pour lesquelles les données étaient suffisamment nombreuses. Sur la base de tests statistiques, des distributions normales ont été attribués aux coefficients de partage, après transformation logarithmique.

Pour les autres, un travail d'analyse complémentaire a été mené pour définir un intervalle de variation, voire une distribution statistique. Ces données reposent sur la définition d'équations de régression, l'utilisation du modèle de géochimie MINTEQA2 (Allison J., 1990) ou le jugement d'expert.

L'analyse des données collectées montrent en effet que les coefficients de partage relatifs aux particules en suspension sont supérieurs à ceux se rapportant aux sédiments, eux-mêmes supérieurs à ceux du sol. Par ailleurs, malgré quelques incohérences liées à un jeu de données incomplet, le classement des métaux en fonction du coefficient de partage moyen est sensiblement le même pour les trois milieux (le plomb, le mercure inorganique et le chrome III présentant les valeurs les plus fortes). A partir des métaux pour lesquels les données étaient suffisamment nombreuses, l'ORD a donc défini une relation linéaire entre la moyenne du logarithme du coefficient de partage d'un métal dans un milieu et la moyenne de celui calculé pour le même métal dans un autre milieu. Cette relation a été utilisée pour estimer par exemple le coefficient de partage moyen du vanadium dans les sols à partir de celui défini grâce aux données de la littérature pour le coefficient de partage des particules en suspension.

Lorsqu'aucune relation n'a pu être développée, le logiciel MINTEQ2 a été utilisé. Le modèle a été calibré à l'aide des données recueillies dans la littérature et en jouant sur les données d'entrée utilisées pour les concentrations en oxyde de fer. Différentes combinaisons de valeurs ont été testées pour les paramètres sensibles (pH, teneur en carbone organique dissous, teneur en carbone organique particulaire, concentration des oxydes métalliques). Le coefficient de partage moyen d'un composé dans le sol a finalement été défini comme la moyenne des Kd calculés avec des valeurs

médianes pour le pH, la teneur en carbone dissous et la teneur en oxydes de fer, ainsi qu'une valeur faible, médiane et forte pour le carbone particulaire.

Enfin, si les estimations par régression linéaire et par modélisation n'ont pu être utilisées, des valeurs ont été définies sur la base des données disponibles dans des travaux de compilation antérieurs, des similitudes de comportements entre métaux et des informations qualitatives disponibles dans la littérature.

- Le dernier document (annexe 3 du rapport d'étude Risk Assessment Technical Background Document for the Paint and Coatings Hazardous Waste Listing Determination) fait partie d'un travail d'évaluation sur les déchets liés au peintures, publié en 2001 et mené par l'Office of Solid Waste (OSW) de l'US EPA. A cette occasion, les données sur les coefficients de partage sol-eau du sol des deux études décrites précédemment ont été complétées par une extension de la recherche de valeurs et l'ajout de données relatives aux aquifères.

  Les données ont été sélectionnées selon les mêmes critères que ceux définis dans l'étude de l'ORD. L'OSW présente dans son rapport l'ensemble des données retenues, avec les conditions expérimentales et les caractéristiques du milieu.

  Pour certaines substances, le jeu de données relatives au Kd a pu être enrichi de manière sensible (pour le cadmium, la distribution du coefficient de partage pour les sols est basée sur 37 valeurs dans le document de l'ORD, alors que 104 sont listées dans le document de l'OSW).

  A partir de six valeurs collectées pour un métal, l'OSW a fait le choix de définir une distribution empirique[3]. En deçà, une distribution loguniforme s'étirant sur 3 ordres de grandeur (hypothèse de dispersion axée sur l'observation) a été attribuée au Kd. La moyenne des valeurs logarithmiques des Kd a été calculée, puis les bornes inférieure et supérieure de la distribution ont été définies, en soustrayant et en ajoutant respectivement 1,5 à cette moyenne.

3.9.2 APPROCHE RETENUE POUR DEFINIR LES VALEURS UTILISEES POUR LES METAUX ET LE METHYLMERCURE DANS MODUL'ERS

Les données issues de ces deux dernières études ont été privilégiées car :

- elles s'appuient sur les collectes de données les plus étendues,
- elles reposent sur des critères de sélection stricts des données,
- elles évitent certains biais de sur-représentation, en ne retenant qu'une seule valeur de coefficient de partage, parmi des valeurs multiples données pour une même matrice.

Concrètement les distributions et les intervalles de variations fournies par l'ORD pour le coefficient de partage des particules en suspension-eaux superficielles ont été utilisées pour renseigner le paramètre Kd_{MES} de MODUL'ERS et reportées dans le tableau 9.

[3] La définition d'une distribution empirique consiste à classer les données par ordre croissant, puis à associer à chacune une fréquence cumulée, calculée à partir de leur rang.

Pour les sols, les distributions définies par l'ORD ont également été utilisées, sauf lorsque le jeu de données reporté par l'OSW était plus important. Dans ce cas, des distributions statistiques ont été redéfinies à partir de ce dernier jeu de données.

Puisque dans MODUL'ERS, il n'est pas possible de définir des distributions empiriques en associant des fréquences cumulées aux données, une recherche des formes de distributions statistiques s'ajustant le mieux au données a été conduite. Ce travail a été réalisé avec les logiciels Crystal Ball (Oracle) et R (The R foundation for statistical computing), par analyse de la distribution des données (forme de l'histogramme), vérification graphique de l'adéquation entre les données empiriques et la distribution théorique (graphique de type quantile-quantile) et test de Kolmogorov-Smirnov. Après calcul du logarithme des données, les valeurs de « p » les plus élevées ont été obtenues pour des distributions de type normal, béta ou weibull. Le rejet de la distribution normale n'étant jamais justifié par les tests statistiques, des distributions normales ont été sélectionnées, dans un souci d'homogénéité, pour tous les nouveaux jeux de données. Ces distributions ont été bornées par les valeurs minimales et maximales relevées par l'OSW et l'ORD.

Enfin, pour le coefficient de partage du vanadium dans les sols, l'ORD présentant une valeur basée sur la modélisation et l'OSW n'ayant collecté que deux valeurs expérimentales, les données issues du RIVM ont été préférées.

Les données collectées présentent des incertitudes importantes liées aux méthodes (mesures en batch ou en colonne, calcul à partir du facteur de retard,…) et aux conditions de mesure (durée de l'expérimentation permettant l'atteinte ou non de l'équilibre, type d'extractant utilisé, maîtrise ou non des conditions oxydo-réductrices…) différentes employées. Par ailleurs, malgré l'étendue des recherches sur laquelle s'appuient les distributions et les intervalles de valeurs présentés dans les tableaux ci-dessous, il convient de garder en tête que les données collectées n'ont pas été tirées au hasard. Les distributions proposées ne peuvent donc prétendre être réellement représentatives de la vraie fréquence de distributions des coefficients de partage dans l'environnement. Néanmoins, la prise en compte des données de l'OSW a permis de corriger certaines distorsions relevées par l'ORD dans ses propres données. Ainsi, la valeur médiane du coefficient de partage de l'arsenic dans les sols basée sur les 21 valeurs collectées par l'ORD (égale à 3,4) paraissait anormalement élevée. Avec le jeu de données de l'OSW, constitué de 35 valeurs, la médiane est cette fois égale à 2,4.

*Tableau 8 : Distributions du coefficient de partage entre les particules du sol et l'eau du sol – **log Kd ($l.kg^{-1}$)***

Substance	log Kd	Commentaires
Métaux et méthylmercure		
Arsenic	N (2,4 ; 1,4 ; -2,3 ; 4,3)	Distribution et bornes basées sur les 35 valeurs issues de l'OSW. Selon les cas, la forme associée à ces données est l'arsenic V ou l'arsenic III. Dans d'autres cas, l'état d'oxydation n'est pas reporté.
Cadmium	N (2,3 ; 0,8 ; 0,1 ; 5)	Distribution basée sur 102 valeurs issues de l'OSW. Bornes minimale et maximale issues de l'ORD
Chrome (Cr III)	N (3,6 ; 0,7 ; 1 ; 4,7)	Distribution basée sur les 25 valeurs issues de l'OSW. Bornes minimale et maximale issues de l'ORD
Chrome (Cr VI)	N (0,8 ; 0,8 ; -0,7 ; 3,3)	Hypothèse d'une distribution normale, définie par l'ORD sur la base de 24 données. Bornes de la distribution définies à partir des valeurs minimale et maximale rapportées par l'ORD
Mercure inorganique (Hg II)	N (3,6 ; 0,7 ; -0,7 ; 5,8)	Distribution définie par l'ORD sur la base de 17 données. Borne inférieure définie à partir de la valeur minimale rapportée par l'OSW. Borne supérieure définie à partir de la valeur maximale rapportée par l'ORD
Méthylmercure	N (2,7 ; 0,6 ; 1,3 ; 4,8)	Distribution définie par l'ORD sur la base de 11 données. Bornes de la distribution définies à partir des valeurs minimale et maximale rapportées par l'ORD
Nickel	N (2,6 ; 0,9 ; 0,5 ; 3,9)	Distribution et bornes basées sur les 40 valeurs issues de l'OSW.
Plomb	N (3,5 ; 1,2 ; 0,7 ; 5)	Distribution basée sur les 39 valeurs issues de l'OSW. Bornes minimale et maximale issues de l'ORD
Sélénium	N (1,3 ; 0,35 ; -0,3 ; 2,4)	Distribution basée sur les 14 valeurs issues de l'OSW (la distribution définie par l'ORD, sur la base de 11 valeurs, est identique). Bornes minimale et maximale issues de l'ORD. Cette distribution se rapporte à la forme Sélénite (Se IV) dominante dans les sols de pH neutre et bien drainés (ATSDR, 2003). Pour les séléniates (VI), forme très mobile et prédominante dans les sols alcalins et oxydés, aucune valeur expérimentale n'a été trouvée par l'US EPA. En utilisant le logiciel MINTEQA2, l'ORD a calculée une valeur moyenne égale à -0,2 pour le log Kd. Des valeurs minimale (-2,0) et maximale (2,0) ont été défini par jugement d'expert.
Vanadium (V)	N (2,49 ; 0,55)	La moyenne et l'écart type sont issus du rapport du RIVM (Buchter et al) sur la base de valeurs issues de 11 sols différents. L'hypothèse d'une distribution normale est faite

*Tableau 9 : Distributions du coefficient de partage entre les particules en suspension et les eaux superficielles - **log Kd_{MES}** (**l.kg^{-1}**)*

Substance	log Kd_{MES}	Commentaires
Métaux		
Arsenic	N (3,9 ; 0,5 ; 2,0 ; 6,0)	Hypothèse d'une distribution normale faite par l'ORD sur la base de 25 données. Bornes de la distribution définies à partir des valeurs minimales et maximales rapportées par l'ORD. Les données publiées ne permettent pas de différencier l'As V de l'AS III. Il est probable qu'elles concernent les deux états d'oxydation.
Cadmium	N (4,9 ; 0,6 ; 2,8 ; 6,3)	Distribution définie par l'ORD sur la base de 38 données. Bornes de la distribution définies à partir des valeurs minimale et maximale rapportées par l'ORD
Chrome (III)	N (5,1 ; 0,4 ; 3,9 ; 6,0)	Distribution définie par l'ORD sur la base de 25 données. Bornes de la distribution définies à partir des valeurs minimales et maximales rapportées par l'ORD. Lorsque l'état d'oxydation n'était pas précisé, l'ORD a fait l'hypothèse qu'il s'agissait de Cr III
Chrome (VI)	N (4,2 ; 0,5 ; 3,6 ; 5,1)	Valeurs moyenne, minimale et maximale définies à partir de l'équation de régression construite pour estimer log Kd_{MES} en fonction de log Kd_{sol} (équation construite à partir des couples Kd_{MES} / Kd_{sol} de 9 métaux, r^2=0,37). Hypothèse d'une distribution normale faite par l'ORD. Ecart-type défini comme la moitié de l'écart entre la valeur maximale et la moyenne.
Mercure inorganique	N (5,3 ; 0,4 ; 4,2 ; 6,9)	Distribution définie par l'ORD sur la base de 26 données. Bornes de la distribution définies à partir des valeurs minimale et maximale rapportées par l'ORD
Mercure organique	N (4,9 ; 0,7 ; 4,2 ; 6,2)	Valeur moyenne définie à partir de l'équation de régression construite pour estimer log Kd_{MES} en fonction de log Kd_{sol} (équation construite à partir des couples Kd_{MES} / Kd_{sol} de 9 métaux, r^2=0,37). Hypothèse d'une distribution normale faite par l'ORD. Bornes de la distribution définies à partir des deux valeurs rapportées par l'ORD. Ecart-type défini comme la moitié de l'écart entre la valeur maximale et la moyenne.
Nickel	N (4,4 ; 0,4 ; 3,5 ; 5,7)	Distribution définie par l'ORD sur la base de 25 données. Bornes de la distribution définies à partir des valeurs minimale et maximale rapportées par l'ORD
Plomb	N (5,7 ; 0,4 ; 3,4 ; 6,5)	Hypothèse d'une distribution normale faite par l'ORD sur la base de 38 données (histogramme des Kd_{MES} présentant une forme lognormale). Bornes de la distribution définies à partir des valeurs minimale et maximale rapportées par l'ORD

Tableau 9 (suite) : Distributions du coefficient de partage entre les particules en suspension et les eaux superficielles
***log Kd_{MES}* (l.kg^{-1})**

Substance	log Kd_{MES}	Commentaires
Sélénium (IV)	N (4,4 ; 0,3 ; 3,8 ; 4,8)	Valeurs moyenne, minimale et maximale définies à partir de l'équation de régression construite pour estimer log Kd_{MES} en fonction de log Kd_{sol} (équation construite à partir des couples Kd_{MES} / Kd_{sol} de 9 métaux, r^2=0,37). Hypothèse d'une distribution normale faite par l'ORD. Ecart-type défini comme la moitié de l'écart entre la moyenne et la valeur minimale.
Sélénium (VI)	N (3,8 ; 0,4 ; 3,1 ; 4,6)	Valeurs moyenne, minimale et maximale définies à partir de l'équation de régression construite pour estimer log Kd_{MES} en fonction de log Kd_{sol} (équation construite à partir des couples Kd_{MES} / Kd_{sol} de 9 métaux, r^2=0,37). Hypothèse d'une distribution normale faite par l'ORD. Ecart-type défini comme la moitié de l'écart entre la valeur maximale et la moyenne. Les deux états d'oxydation pouvant être présent en milieu environnemental, une distribution normale avec une moyenne égale à la moyenne des distributions données pour le Se IV et le Se VI est reportée dans la colonne PDF de MODUL'ERS. L'écart-type et la borne inférieure sont ceux de la distribution du Se VI et la borne supérieure est celle utilisée pour la distribution du Se IV
Vanadium (V)	N (3,7 ; 0,6 ; 2,5 ; 4,5)	Hypothèse d'une distribution normale faite par l'ORD sur la base de 5 données. Bornes de la distribution définies sur jugement d'expert de l'ORD. L'état d'oxydation se rapportant aux valeurs collectées n'est pas toujours défini. Les 9 valeurs reportées par le RIVM (valeurs mesurées de manière hétérogène, sur des échantillons d'eau de rivière et de lac, donnent une valeur moyenne identique à celle rapportée par l'ORD et sont comprises entre les valeurs minimale et maximale de la distribution proposée

3.10 COEFFICIENT DE DIFFUSION DANS L'AIR ET DANS L'EAU

La diffusion moléculaire correspond au transport d'une molécule dans une phase liquide ou gazeuse sous l'effet des collisions intermoléculaires.

Le coefficient de diffusion d'une substance dépend de ses propriétés et de celles de la phase où a lieu le transport.

Les coefficients de diffusion ont les dimensions suivantes : $L^2.T^{-1}$.

3.10.1 COEFFICIENT DE DIFFUSION DANS L'AIR

Ce paramètre est défini dans les modules *Eaux_superficielles*, *Conc_gaz_air_exterieur*, *Conc_gaz_air_interieur_J_E*, *Conc_gaz_air_interieur_ Volasoil* et *Par_Subst* .

Peu de données de mesures ont été trouvées pour ce paramètre. En revanche, différentes méthodes d'estimation sont proposées dans la littérature.

Par exemple, dans le logiciel WATER9, l'US EPA (2001b) utilise la relation de corrélation suivante, basée sur la masse molaire et la masse volumique des substances :

$$D_a = \frac{0{,}0029 \times (T + 273{,}16)^{1{,}5} \times \sqrt{0{,}034 + \frac{1}{M}} \times \max(1 - 1{,}5.10^5 \times M^2; 0{,}4)}{\left[\left(\frac{M}{2{,}5 \times \rho}\right)^{0{,}333} + 1{,}8\right]^2} \qquad \text{Équation 16}$$

avec D_a : coefficient de diffusion dans l'air ($cm^2.s^{-1}$),

M : masse molaire de la substance ($g.mol^{-1}$),

T : température (°C),

ρ : masse volumique de la substance ($g.cm^{-3}$).

Si la masse volumique n'est pas connue, l'US EPA (1987) utilise la relation suivante :

$$D_a = 1{,}9 \times M^{-\frac{2}{3}} \qquad \text{Équation 17}$$

Enfin, pour les dioxines, l'équation 18 (US EPA, 2003) est proposée :

$$D_a = 0{,}068 \times \sqrt{\frac{154}{M}} \qquad \text{Équation 18}$$

Cette relation est apparemment basée sur l'approximation rapportée par Tinsley (1979) et Swarzenbach et al. (1993), qui permet d'estimer le coefficient de diffusion dans l'air d'une espèce chimique à partir des données relatives à une autre :

$$\frac{D_{a,i}}{D_{a,j}} = \sqrt{\frac{M_j}{M_i}} \qquad \text{Équation 19}$$

avec $D_{a,i}$: coefficient de diffusion dans l'air de l'espèce chimique i,

$D_{a,j}$: coefficient de diffusion dans l'air de l'espèce chimique j,

M_i : masse molaire de l'espèce i,

M_j : masse molaire de l'espèce j.

Dans cette équation, l'US EPA renseigne le coefficient de diffusion dans l'air et la masse molaire d'une des deux espèces à partir des valeurs de paramètres du diphényle, pour obtenir l'équation 18.

Cependant, dans la plupart des documents consultés, l'origine des équations proposées et l'erreur d'estimation liée à l'utilisation de ces relations ne sont pas précisées.

Lyman et al (1990), rapportent les résultats de la revue effectuée par Jarvis et Lugg sur les méthodes d'estimation du coefficient de diffusion dans l'air. Ces méthodes, reposent sur le modèle de Chapman et Enskog pour des gaz dilués à basse pression. Sur des critères de facilité d'utilisation et de justesse des résultats pour un large nombre de substances, Lyman et al. en recommandent deux :

- la méthode de Fuller, Schettler et Giddings (FSG) :

$$D_a = \frac{10^{-3} \times (T + 273{,}16)^{1,75} \times \sqrt{\frac{M_{air} + M}{M_{air} \times M}}}{P \times (V_{air}^{1/3} + V^{1/3})^2}$$ Équation 20

avec T : température (°C),

P : pression atmosphérique (1 atm),

M_{air}, V_{air} : masse molaire (28,97 g/mol) et volume molaire de l'air (20,1 cm^3/mol),

M, V : masse molaire et volume molaire de la substance,

Le volume molaire peut être estimé à partir de la structure de la molécule selon la méthode de Lebas (Reid et al, 1977 ; Lyman et al, 1990). Mackay et al (2006) donne également le volume molaire des substances référencées.

Cette approche s'applique aux gaz non polaires à basse et moyenne températures. D'après Jarvis et Lugg (cité dans Lyman et al), les meilleurs résultats sont obtenus pour les substances aliphatiques chlorées. Pour les substances aromatiques, les alcanes et les cétones, l'erreur par rapport aux mesures est de l'ordre de 5 %. Les résultats les moins bons sont obtenus pour les acides polaires et les glycols.

- la méthode de Wilke et Lee (WL). Cette méthode est applicable à un plus grand nombre de composés et pour une plage de température plus étendue. Les erreurs par rapport aux données de mesure sont plus faibles (l'erreur moyenne est de 4,3% sur les 137 substances testées par Jarvis et al., contre 7,6 % pour la méthode FSG), en particulier pour les nitriles, les glycols et les esters aromatiques. En revanche, les calculs nécessaires sont plus longs. Les étapes de calcul sont présentées ci-dessous.

$$D_a = \frac{B' \times (T + 273{,}16)^{1,5} \times \sqrt{\frac{M_{air} + M}{M_{air} \times M}}}{P \times \sigma^2 \times \Omega}$$ Équation 21

avec σ : longueur caractéristique, fonction du volume molaire à la température d'ébullition

$$\sigma = \frac{\sigma_A + 1{,}18 \times V^{1/3}}{2}$$ Équation 22

avec σ_A : longueur caractéristique pour l'air (3,711 Å)

Ω : fonction de l'énergie d'attraction moléculaire

$$\Omega = \frac{1{,}06036}{(T^*)^{0,1561}} + \frac{0{,}193}{e^{0,47635 \times T^*}} + \frac{1{,}03587}{e^{1,52996 \times T^*}} + \frac{1{,}76474}{e^{3,89411 \times T^*}}$$ Équation 23

et B' et T : coefficients de corrélation

$$B' = 2{,}17.10^{-2} - 5.10^{-3} \times \sqrt{\frac{1}{M_{air}} + \frac{1}{M}}$$ Équation 24

$$T^* = \frac{T}{\sqrt{\left(\varepsilon / k\right)_{air} \times 1{,}15 \times T_b}}$$ Équation 25

avec $\left(\varepsilon / k\right)_{air}$ *:* fonction de l'énergie moléculaire d'attraction et de la constante de Bolzmann pour l'air (=78,6 K),

T_b : température d'ébullition de la substance (K)

Les coefficients de diffusion dans l'air des substances organiques prédéfinies dans MODUL'ERS ont été estimés à l'air des différentes méthodes présentées dans cette section. Pour les molécules de masse moléculaire élevée, les méthodes FSG et WL donnent des résultats quasiment identiques. L'équation 16 de l'US EPA donne, en revanche, des résultats plus de deux fois inférieurs. Pour les substances volatiles, quelques données de mesure ont été recueillies. Les résultats fournis par la méthode WL sont très proches de ces valeurs, et sensiblement meilleurs que ceux obtenus avec les autres équations. Les résultats fournis par cette méthode ont donc été privilégiés. Toutefois, pour les polychlorobiphényles, en l'absence de donnée de mesure sur la température d'ébullition, la méthode FSG a été utilisée.

Les valeurs du coefficient de diffusion dans l'air ont été calculées à 25°C et à 12,5°C. En cohérence, avec les valeurs des autres paramètres, les valeurs calculées à 25°C ont été reportées dans la colonne « Value » dans MODUL'ERS et la valeur calculée à 12,5°C est donnée dans la colonne « Comment ». Les valeurs calculées à 12,5°C sont inférieures de 6% à celles estimées à 25°C, avec la méthode de WL (7% avec la méthode FSG).

A l’exception du mercure et de ses composés, les coefficients de diffusion dans l’air des métaux n’ont pas besoin d’être renseignés, compte-tenu de leur très faible volatilité. Pour le mercure et ses composés, le coefficient de diffusion dans l’air est calculé par la méthode WL ou FSG, selon la disponibilité de la température d’ébullition.

*Tableau 10 : Coefficient de diffusion des substances dans l'air – **Da ($m^2.s^{-1}$)***

Substance	Valeur à 25°C	Valeur à 12,5°C	Commentaires
Hydrocarbures Aromatiques Polycycliques			
Naphtalène	$7{,}3.10^{-6}$	$6{,}9.10^{-6}$	Valeurs calculées par méthode WL
Fluoranthène	$5{,}5.10^{-6}$	$5{,}2.10^{-6}$	
Benzo(a)pyrène	$4{,}9.10^{-6}$	$4{,}5.10^{-6}$	
Composés Organiques Volatils			
Benzène	$9{,}7.10^{-6}$	$9{,}1.10^{-6}$	Valeurs calculées par méthode WL
Chlorure de vinyle	$1{,}2.10^{-5}$	$1{,}2.10^{-5}$	
Trichloroéthylène	$8{,}7.10^{-6}$	$8{,}2.10^{-6}$	
Tétrachloroéthylène	$7{,}8.10^{-6}$	$7{,}3.10^{-6}$	
Dioxines			
2378 Tétrachlorodibenzodioxine	$4{,}9.10^{-6}$	$4{,}6.10^{-6}$	Valeurs calculées par méthode WL
12378 Pentachlorodibenzodioxine	$4{,}7.10^{-6}$	$4{,}4.10^{-6}$	
123478 Hexachlorodibenzodioxine	$4{,}5.10^{-6}$	$4{,}2.10^{-6}$	
123678 Hexachlorodibenzodioxine	$4{,}5.10^{-6}$	$4{,}2.10^{-6}$	
123789 Hexachlorodibenzodioxine	$4{,}5.10^{-6}$	$4{,}2.10^{-6}$	
1234678 Heptachlorodibenzodioxine	$4{,}3.10^{-6}$	$4{,}0.10^{-6}$	
Octachlorodibenzodioxine	$4{,}2.10^{-6}$	$3{,}9.10^{-6}$	
Furannes			
2378 Tétrachlorodibenzofuranne	$4{,}9.10^{-6}$	$4{,}6.10^{-6}$	Valeurs calculées par méthode WL
12378 Pentachlorodibenzofuranne	$4{,}7.10^{-6}$	$4{,}4.10^{-6}$	
23478 Pentachlorodibenzofuranne	$4{,}7.10^{-6}$	$4{,}4.10^{-6}$	
123478 Hexachlorodibenzofuranne	$4{,}5.10^{-6}$	$4{,}2.10^{-6}$	
123678 Hexachlorodibenzofuranne	$4{,}5.10^{-6}$	$4{,}2.10^{-6}$	
123789 Hexachlorodibenzofuranne	$4{,}5.10^{-6}$	$4{,}2.10^{-6}$	
234678 Hexachlorodibenzofuranne	$4{,}5.10^{-6}$	$4{,}2.10^{-6}$	
1234678 Heptachlorodibenzofuranne	$4{,}3.10^{-6}$	$4{,}0.10^{-6}$	
1234789 Heptachlorodibenzofuranne	$4{,}3.10^{-6}$	$4{,}0.10^{-6}$	
Octachlorodibenzofuranne	$4{,}2.10^{-6}$	$3{,}9.10^{-6}$	
Polychlorobiphényles indicateurs			
244' Trichlorobiphényle (28)	$5{,}2.10^{-6}$	$4{,}8.10^{-6}$	Valeurs calculées par méthode FSG
22'55'' Tétrachlorobiphényle (52)	$4{,}8.10^{-6}$	$4{,}4.10^{-6}$	
22'455' Pentachlorobiphényle (101)	$4{,}8.10^{-6}$	$4{,}4.10^{-6}$	
22'344'5' Hexachlorobiphényle (138)	$4{,}6.10^{-6}$	$4{,}3.10^{-6}$	
22'44'55' Hexachlorobiphényle (153)	$4{,}6.10^{-6}$	$4{,}3.10^{-6}$	
22'344'55' Heptachlorobiphényle (180)	$4{,}4.10^{-6}$	$4{,}1.10^{-6}$	

Tableau 10 (suite) : Coefficient de diffusion des substances dans l'air – Da ($m^2.s^{-1}$)

Substance	Valeur à 25°C	Valeur à 12,5°C	Commentaires
Polychlorobiphényles dioxine-like			
33'44' Tétrachlorobiphényle (77)	$5,0.10^{-6}$	$4,6.10^{-6}$	
344'5 Tétrachlorobiphényle (81)	$5,0.10^{-6}$	$4,6.10^{-6}$	
233'44' Pentachlorobiphényle (105)	$4,8.10^{-6}$	$4,4.10^{-6}$	
2344'5 Pentachlorobiphényle (114)	$4,8.10^{-6}$	$4,4.10^{-6}$	
23'44'5 Pentachlorobiphényle (118)	$4,8.10^{-6}$	$4,4.10^{-6}$	Valeurs calculées par méthode FSG
3344'5 Pentachlorobiphényle (126)	$4,8.10^{-6}$	$4,4.10^{-6}$	
233'44'5 Hexachlorobiphényle (156)	$4,6.10^{-6}$	$4,3.10^{-6}$	
233'44'5' Hexachlorobiphényle (157)	$4,6.10^{-6}$	$4,3.10^{-6}$	
23'44'55' Hexachlorobiphényle (167)	$4,6.10^{-6}$	$4,3.10^{-6}$	
33'44'55' Hexachlorobiphényle (169)	$4,6.10^{-6}$	$4,3.10^{-6}$	
233'44'55' Heptachlorobiphényle (189)	$4,4.10^{-6}$	$4,1.10^{-6}$	
Mercure et méthylmercure			
Mercure élémentaire	$1,4.10^{-5}$	$1,3.10^{-5}$	Valeurs calculées par méthode WL
Mercure inorganique (Hg II)	$9,0.10^{-6}$	$8,4.10^{-6}$	Valeurs calculées par méthode WL
Méthylmercure	$9,0.10^{-6}$	$8,3.10^{-6}$	Valeurs calculées par méthode FSG

3.10.2 COEFFICIENT DE DIFFUSION DANS L'EAU

Le coefficient de diffusion dans l'eau est défini dans les modules *Eaux_superficielles, Eaux_souterraines, Conc_gaz_air_exterieur, Conc_gaz_air_interieur_J_E, Conc_gaz_air_interieur_Volasoil et Par_Subst .*

Comme pour le coefficient de diffusion dans l'air, peu de données de mesure sont disponibles dans la littérature.

Dans le logiciel WATER9, l'US EPA (2001b) utilise la relation de corrélation suivante :

$$D_e = 1,518.10^{-4} \times \frac{(T+273,16)^{1,5}}{298,16} \times \left(\frac{M}{\rho}\right)^{-0,6} \qquad \text{Équation 26}$$

avec D_e : coefficient de diffusion dans l'eau ($cm^2.s^{-1}$),

M : masse molaire de la substance ($g.mol^{-1}$),

T : température (°C),

ρ : masse volumique de la substance ($g.cm^{-3}$).

Si la masse volumique n'est pas connue, l'US EPA (1987) propose la relation suivante :

$$D_e = 2,2.10^{-4} \times M^{-2/3} \qquad \text{Équation 27}$$

Là encore, l'origine des équations proposées et l'erreur d'estimation liée à l'utilisation de ces relations ne sont pas précisées.

Lyman et al (1990) présentent une comparaison de six méthodes dérivant chacune de l'équation de Stokes-Einstein et dépendant de la taille du soluté et de la viscosité de la solution. Ces méthodes sont applicables pour des solutions ayant une concentration inférieure à 0,05 mole par litre. Reid et al. (1987), ainsi que Lyman et al recommandent la relation de Hayduk et Laudie, car elle est plus simple à utiliser que d'autres méthodes et a été validée sur un ensemble de données plus récent. L'équation est la suivante :

$$D_e = \frac{1{,}326.10^{-4}}{\eta_e^{1{,}14} \times V^{0{,}589}}$$ Équation 28

avec η_e : viscosité de l'eau (cPoise),

V : volume molaire de la substance ($cm^3.mol^{-1}$).

L'équation de Hayduk et Laudie s'applique à un large ensemble de composés. Sur 87 substances en solution, l'erreur moyenne mesurée par Reid et al (1977), en estimant le volume molaire par la méthode de Lebas, est de 5,8%.

Les résultats fournis par cette méthode ont été privilégiés pour les substances organiques. Les valeurs ont été calculées à 25°C et à 12,5°C (en ajustant la valeur de la viscosité de l'eau à la température considérée). Comme pour les autres paramètres, les valeurs calculées à 25°C ont été reportées dans la colonne « Value » dans MODUL'ERS et la valeur calculée à 12,5°C est donnée dans la colonne « Comment ». Les valeurs calculées à 12,5°C sont inférieures de 30% à celles estimées à 25°C.

Dans le cas d'électrolytes, le mouvement des ions par diffusion génère un champ électrique, créant une force additionnelle. Le transfert de masse peut alors être beaucoup plus important. Pour les métaux et leurs composés, la méthode décrite ci-dessus n'est donc pas appropriée. Crittenden et al (2012) indiquent que le coefficient de diffusion dans l'eau doit être défini pour l'électrolyte et non pas pour chaque ion pris individuellement, le principe d'électroneutralité nécessitant que les ions positifs et négatifs se déplacent ensemble. Bodek et al (1988) donnent une méthode d'estimation tenant compte de la conductance (équation de Nernst-Haaskell). Mais les valeurs correspondant aux substances étudiées ici ne sont pas renseignées. Les auteurs indiquent toutefois que les coefficients de diffusion dans l'eau varient peu. Les coefficients de nombreux sels simples ne varient pas plus d'un facteur 2 sur une large gamme de température et de concentration. Les valeurs reportées par Bodek et al (1988) pour la plupart des sels sont ainsi comprises entre $7{,}5.10^{-10}$ et $3{,}0.10^{-9}$ $m^2.s^{-1}$, avec une moyenne de l'ordre de $1{,}5.10^{-9}$ $m^2.s^{-1}$ pour une température de 25°C. Ces valeurs, issues de Bodek et al, sont utilisées pour renseigner le coefficient de diffusion dans l'eau des métaux et du méthylmercure dans MODUL'ERS. A titre de comparaison, les valeurs estimées par WATER9 (méthode non précisée) sont égales à $3{,}01.10^{-9}$ $m^2.s^{-1}$ pour le mercure, $1{,}41.10^{-9}$ $m^2.s^{-1}$ pour le chrome (dit chrome total) et $9{,}57.10^{-10}$ $m^2.s^{-1}$ pour les autres métaux.

*Tableau 11 : Coefficient de diffusion des substances dans l'eau – **De ($m^2.s^{-1}$)***

Substance	Valeur à 25°C	Valeur à 12,5°C
Hydrocarbures Aromatiques Polycycliques		
Naphtalène	$8{,}0.10^{-10}$	$5{,}6.10^{-10}$
Fluoranthène	$6{,}4.10^{-10}$	$4{,}5.10^{-10}$
Benzo(a)pyrène	$5{,}7.10^{-10}$	$4{,}0.10^{-10}$
Composés Organiques Volatils		
Benzène	$1{,}0.10^{-9}$	$7{,}2.10^{-10}$
Chlorure de vinyle	$1{,}3.10^{-9}$	$9{,}0.10^{-10}$
Trichloroéthylène	$9{,}7.10^{-10}$	$6{,}8.10^{-10}$
Tétrachloroéthylène	$8{,}7.10^{-10}$	$6{,}1.10^{-10}$
Dioxines		
2378 Tétrachlorodibenzodioxine	$5{,}7.10^{-10}$	$4{,}0.10^{-10}$
12378 Pentachlorodibenzodioxine	$5{,}5.10^{-10}$	$3{,}8.10^{-10}$
123478 Hexachlorodibenzodioxine	$5{,}2.10^{-10}$	$3{,}7.10^{-10}$
123678 Hexachlorodibenzodioxine	$5{,}2.10^{-10}$	$3{,}7.10^{-10}$
123789 Hexachlorodibenzodioxine	$5{,}2.10^{-10}$	$3{,}7.10^{-10}$
1234678 Heptachlorodibenzodioxine	$5{,}0.10^{-10}$	$3{,}5.10^{-10}$
Octachlorodibenzodioxine	$4{,}9.10^{-10}$	$3{,}4.10^{-6}$
Furannes		
2378 Tétrachlorodibenzofuranne	$5{,}7.10^{-10}$	$4{,}0.10^{-10}$
12378 Pentachlorodibenzofuranne	$5{,}5.10^{-10}$	$3{,}8.10^{-10}$
23478 Pentachlorodibenzofuranne	$5{,}5.10^{-10}$	$3{,}8.10^{-10}$
123478 Hexachlorodibenzofuranne	$5{,}2.10^{-10}$	$3{,}7.10^{-10}$
123678 Hexachlorodibenzofuranne	$5{,}2.10^{-10}$	$3{,}7.10^{-10}$
123789 Hexachlorodibenzofuranne	$5{,}2.10^{-10}$	$3{,}7.10^{-10}$
234678 Hexachlorodibenzofuranne	$5{,}2.10^{-10}$	$3{,}7.10^{-10}$
1234678 Heptachlorodibenzofuranne	$5{,}0.10^{-10}$	$3{,}5.10^{-10}$
1234789 Heptachlorodibenzofuranne	$5{,}0.10^{-10}$	$3{,}5.10^{-10}$
Octachlorodibenzofuranne	$4{,}9.10^{-10}$	$3{,}4.10^{-10}$
Polychlorobiphényles indicateurs		
244' Trichlorobiphényle (28)	$5{,}9.10^{-10}$	$4{,}1.10^{-10}$
22'55'' Tétrachlorobiphényle (52)	$5{,}4.10^{-10}$	$3{,}8.10^{-10}$
22'455' Pentachlorobiphényle (101)	$5{,}4.10^{-10}$	$3{,}8.10^{-10}$
22'344'5' Hexachlorobiphényle (138)	$5{,}2.10^{-10}$	$3{,}6.10^{-10}$
22'44'55' Hexachlorobiphényle (153)	$5{,}2.10^{-10}$	$3{,}6.10^{-10}$
22'344'55' Heptachlorobiphényle (180)	$5{,}0.10^{-10}$	$3{,}5.10^{-10}$

Tableau 11 (suite) : Coefficient de diffusion des substances dans l'eau –

De ($m^2.s^{-1}$)

Substance	Valeur à 25°C	Valeur à 12,5°C
Polychlorobiphényles dioxine-like		
33'44' Tétrachlorobiphényle (77)	$5,6.10^{-10}$	$3,9.10^{-10}$
344'5 Tétrachlorobiphényle (81)	$5,6.10^{-10}$	$3,9.10^{-10}$
233'44' Pentachlorobiphényle (105)	$5,4.10^{-10}$	$3,8.10^{-10}$
2344'5 Pentachlorobiphényle (114)	$5,4.10^{-10}$	$3,8.10^{-10}$
23'44'5 Pentachlorobiphényle (118)	$5,4.10^{-10}$	$3,8.10^{-10}$
3344'5 Pentachlorobiphényle (126)	$5,4.10^{-10}$	$3,8.10^{-10}$
233'44'5 Hexachlorobiphényle (156)	$5,2.10^{-10}$	$3,6.10^{-10}$
233'44'5' Hexachlorobiphényle (157)	$5,2.10^{-10}$	$3,6.10^{-10}$
23'44'55' Hexachlorobiphényle (167)	$5,2.10^{-10}$	$3,6.10^{-10}$
33'44'55' Hexachlorobiphényle (169)	$5,2.10^{-10}$	$3,6.10^{-10}$
233'44'55' Heptachlorobiphényle (189)	$5,0.10^{-10}$	$3,5.10^{-10}$

4. REFERENCES BIBLIOGRAPHIQUES

ATSDR (Agency for Toxic Substances and Disease Registry), Toxicological profiles for selenium, Atlanta, GA: U.S department of Health and Human Services, Public, Health Services, 2003.htpp://www.atsdr.cdc.gov/toxpro2.html.

Beyer A., Wania F., Gouin T., Mackay D., Matthies M., Selecting internationally consistent physicochemical properties of organic compounds, Environmental Toxicology and chemistry, Vol. 21, n°5, pp. 941-953, 2002

Bodek I, Lyman W., Reehl W., Rosenblatt D., Environmental inorganic chemistry, Properties, processes, and estimation methods, SETAC special publications series, Pergamon press, 1988

Bolgar M., Cunningham J., Cooper R., Kozloski R., Hubbal J., Miller D., Crone T, Kimball H., Janooby A., Miller B., Fairless B., Physical, spectral and chromatographic properties of all 209 substances PCB congeners. Chemosphere 31(2): p. 2687-2705, 1995

Buchter B., Davidoff B., Amacher M., Hinz C., Iskandar I., Selim H., Correlation of Freundlich kd and n retention parameters with soils and elements. Soil Science 148: 370-379, 1989

Crittenden J., Trussell R., Hand D., Howe K., Tchobanoglous G., MWH's Water Treatment: Principles and Design, 3rd Edition**,** ISBN: 978-1-118-10377-7, 2012

European Union, Quality standards determination under the European water framework directive, Substance data sheet for mercury and compounds, draft of 01/03/01, 18 p., 2004

European Union, Environmental Quality Standards (EQS), Substance data sheet for priority substance, n°21: Mercury and its compounds, Cas n°7439-97-6, 21 p., 2005

King L., Retention of metals by several soils of the Southeastern United States. J. Environ Qual 17: 239-250, 1988

INERIS (Institut National de l'Environnement Industriel et des Risques), Portail Substances Chimiques, http://www.ineris.fr/substances/fr

INERIS (Institut National de l'Environnement Industriel et des Risques), Fiche de données toxicologiques et environnementales des substances chimiques, C, INERIS–DRC-01-05590-00DF253, Version N°2-Février 2005

INERIS (Institut National de l'Environnement Industriel et des Risques), Fiche de données toxicologiques et environnementales des substances chimiques, Mercure et ses dérivés, INERIS-DRC-10-109974-00926A, Version N°4-Septembre 2010

INERIS (Institut National de l'Environnement Industriel et des Risques), Fiche de données toxicologiques et environnementales des substances chimiques, Vanadium, INERIS–DRC-07-83451-06937D, Version N°2-Mars 2012

Karickhoff S., Brown D., Scott T., Sorption of hydrophobic pollutants on natural sediments, Water resources, 13: 241-248, 1979

LLNL (Lawrence Livermore National Library), McKone T., Daniels J., Chiao F., Hsieh D., Intermedia transfer factors for fifteen toxic pollutants released to air basins in California, 1993

Lyman W, Reehl W., Rosenblatt D. (eds.),Handbook of chemical property estimation methods, American Chemical Society, Washington DC, USA, 1990

Mackay D., Multimedia environmental models, The fugacity approach, Second Edition, Lewis Publishers, ISBN 1-56670-542-8, 2001

Mackay D., Shiu W., Ma K-C., Lee S. C., Handbook of physical-chemical properties and environmental fate for organic chemicals, Vol. I-II, Second edition, ISBN 1-56670-687-4, 2006

Oracle, Crystal Ball, version 11, http://www.oracle.com/us/products/applications/

crystalball/crystal-ball-product/overview/index.html

Reid R., Prausnitz J.M., Sherwood T., The properties of gases and liquids, 3rd. edition, McGraw-Hill, New York, 1977

R Foundation for Statistical Computing, R version 3.1.1 (10-07-2014), http://www.r-project.org

RIVM (National Institute of Public Health and Environmental Protection Bilthoven), Bockting G., van de Plassche E., Struijs J., Canton J., Soil-water partition coefficients for some trace metals, Report n°679101003, 1992

Seth R., Mackay D., Muncke J., Estimating the organic carbon partition coefficient and its variability for hydrophobic chemicals, Environmental Science and Technology, 33:2330-2394, 1999

Smith F. L., Harvey A.H., Avoids common pitfalls when using Henry's law, Environmental management, CEP, September 2007

SRC (Syracuse Research Corporation), Chemfate, http://esc.syrres.com, dernier accès en 2011

Swarzenbach R., Gschwend P., Imboden D., Environmental organic chemistry, John Wiley and Sons, New York, 1983

Tinsley I., Chemicals concepts in pollutant behaviour, John Wiley and Sons, New York, 1979

US EPA (US Environmental Protection Agency), Process Coefficients and Models for Simulating Toxic Organics and Heavy Metals in Surface Waters. Office of Research and Development, Washington DC, 1987

US EPA (US Environmental Protection Agency), Allison J., Brown D., Novo-Gradac K., MINTEQA2/PRODEFA2, A geochemical assessment model for environmental systems: Version 3.0 User's manual. EPA/6003-91/021, 1990

US EPA (US Environmental Protection Agency), Soil screening guidance: Technical background document, Office of Solid Waste and Emergency Response, EPA/540/R-95/128, 1996

US EPA (US Environmental Protection Agency), Mercury study report to congress, Volume III: Fate and transport mercury in the environment, Office of Air Quality Planning & Standards and Office of Research and Development, EPA/452/R-97-005, 1997

US EPA (US Environmental Protection Agency), Understanding variation in partition coefficient Kd values, Volume II, Office of Air and Radiation EPA 402-R-99-004B, 1999

US EPA (US Environmental Protection Agency), Risk Assessment Technical Background Document for the Paint and Coatings Hazardous Waste Listing Determination, Appendix H, Office of Solid Waste (OSW) de l'US EPA, 2001a

US EPA (US Environmental Protection Agency), WATER9, User'guide for water9 software. Office of Air Quality Planning and Standards, Research Triangle Park, NC, 2001b, http://www.epa.gov/ttnchie1/software/water/water9_3/index.html

US EPA (US Environmental Protection Agency), National Center for Environmental Assessment, Exposure and Human Health Reassessment of 2,3,7,8-Tetrachlorodibenzo-p-Dioxin (TCDD) and Related Compounds, National Center for Environmental Assessment, Part 1: Estimating exposure to dioxin-like compounds, NAS Review draft, 2003.

US EPA (US Environmental Protection Agency), Office of Solid Waste, Human Health Risk Assessment Protocol for hazardous waste combustion facilities (HHRAP), report EPA/530/R-05-006, 2005a

US EPA (US Environmental Protection Agency), Partition coefficients for metals in surface water, soil and waste, Office of Research and Development, EPA/600/R-05/074, 2005b

US EPA (United States Environmental Protection Agency), EPI SUITE, Estimation Programs Interface SuiteTM for MicrosoftR Windows, v 4.10., Washington, DC, USA, 2011

US National Library of Medicine, Hazardous Substances Data Bank (HSDB), available at http://toxnet.nlm.nih.gov

Annexe :
Valeurs du coefficient de partage particules du sol-eau du sol (Kd) pour le cadmium, le plomb et le chrome VI en fonction de caractéristiques du sol

Tables définies par l'US EPA (1999)

Intervalles de valeurs pour le coefficient de partage dans les sols du cadmium - Kd ($l.kg^{-1}$)

pH	3 - 5	5 - 8	8 - 10
Kd	1 - 130	8 - 4000	50 - 12600

Intervalles de valeurs pour le coefficient de partage dans les sols du plomb - Kd ($l.kg^{-1}$)

Concentration d'équilibre (µg/l)	pH		
	4,0 – 6,3	6,4 – 8,7	8,8 – 11,0
0,1 – 0,9	940 - 8650	4360 - 23270	11520 – 44580
1,0 – 9,9	420 - 4000	1950 - 10760	5160 - 20620
10 – 99,9	190 - 1850	900 - 4970	2380 - 9530
100 – 200	150 - 860	710 - 2300	1880 - 4410

Intervalles de valeurs pour le coefficient de partage dans les sols du Chrome VI - Kd ($l.kg^{-1}$)

Concentration de sulfate en solution (mg/l)	pH					
	4,1 – 5,0			5,1 – 6,0		
	Fe extractible au CBD (mmol/g)			Fe extractible au CBD (mmol/g)		
	≤ 0,25	0,26 – 0,29	≥ 0,30	≤ 0,25	0,26 – 0,29	≥ 0,30
0 – 1,9	25 - 35	400 - 700	990 - 1770	20 - 34	190 - 380	390 - 920
2 – 18,9	12 - 15	190 – 330	460 - 820	10 - 15	90 – 180	180 - 430
19 - 189	5 - 8	90 – 150	210 - 380	4 - 7	40 - 80	80 - 200
≥ 190	3 - 4	40 - 70	100 - 180	2 – 3	20 - 40	40 - 90

Concentration de sulfate en solution (mg/l)	pH					
	6,1 – 7,0			≥ 7,0		
	Fe extractible au CBD (mmol/g)			Fe extractible au CBD (mmol/g)		
	≤ 0,25	0,26 – 0,29	≥ 0,30	≤ 0,25	0,26 – 0,29	≥ 0,30
0 – 1,9	8 - 22	70 - 180	80 - 350	0 - 7	0 - 30	1 - 60
2 – 18,9	4 - 10	30 – 80	40 - 160	0 - 3	0 - 14	1 - 30
19 - 189	2 - 5	15 – 40	20 - 75	0 - 2	0 – 7	0 - 13
≥ 190	1 - 2	7 - 20	8 - 35	0 - 1	0 - 3	0 - 6

INERIS

maîtriser le risque
pour un développement durable

Institut national de l'environnement industriel et des risques

Parc Technologique Alata
BP 2 - 60550 Verneuil-en-Halatte

Tél. : +33 (0)3 44 55 66 77 - Fax : +33 (0)3 44 55 66 99

E-mail : ineris@ineris.fr - **Internet** : http://www.ineris.fr