

# Etude des transferts d'un pesticide dans un sol aride ; cas d'un composé modèle : *TCE*

S. Ouoba<sup>a</sup>, F. Cherblanc<sup>a</sup>, J.C. Bénét<sup>a</sup>

<sup>a</sup>*LMGC, UMR CNRS 5508, Université Montpellier 2, Place Eugène Bataillon, 34095 Montpellier Cedex 5*

*Key words:* milieux poreux hygroscopiques, équilibres liquide/gaz, loi de Henry, changement de phase

## 1. Introduction

La description et la prévision des transferts de pesticides dans les couches superficielles d'un sol aride revêtent une importance certaine dès qu'il s'agit de résoudre des problèmes concrets liés aux sciences environnementales. C'est en effet dans ce domaine physique appelé "zone non-saturée" qu'à lieu l'essentiel des transferts. Après une pluie, les pesticides sont transportés dans le sol sous 3 formes, en vapeur dans la phase gazeuse, dissous dans la phase aqueuse ou adsorbé sur la matrice solide. La plupart des descriptions classiques des mécanismes de transfert supposent, d'une part, que les équilibres liquide-gaz sont toujours satisfaits et, d'autre part, que ces équilibres sont correctement décrits par les relations établies hors du contexte des sols (pression de vapeur saturante, loi de Henry, ...) [2].

Les effets hygroscopiques conduisent à des déplacements d'équilibres, et se manifestent à travers l'isotherme de désorption. De plus, des travaux récents montrent que ces effets hygroscopiques modifient aussi les cinétiques de changement de phase [4]. Ainsi, lorsque la phase liquide est partiellement adsorbée sur le squelette solide, la vitesse d'évaporation est considérablement réduite, et nous incite à remettre en cause l'hypothèse d'*équilibre local* classiquement admise dans les modèles de transfert [3]. La question des transferts dans les sols arides a rarement été abordée, or pour les faibles teneurs en eau, les effets hygroscopiques deviennent prépondérants et contrôlent les transferts. La phase aqueuse présente dans le sol est dite "liée". Les mécanismes de transfert de l'eau liquide ou vapeur étant fortement influencés par les effets hygroscopiques, il doit en être de même pour un composé dissous dans la phase aqueuse.

Ainsi, l'objectif de ce travail est, dans un premier temps, de caractériser les équilibres liquide/gaz d'une solution au sein d'un sol dans le domaine hygroscopique. Ceci revient à l'établissement d'isothermes de désorption afin d'observer l'influence de la concentration du soluté et de tester l'adéquation de la loi de Henry dans le cas d'un milieu poreux. Dans un deuxième temps, il s'agit de caractériser la cinétique de changement de phase du pesticide afin de discuter la validité de l'hypothèse d'*équilibre local*. Pour cette étude, un composé modèle a été choisi, le trichloréthylène (*TCE*). Il fait partie de la classe des organo-chlorés, est très volatil et a fait l'objet de nombreuses études et caractérisations.

## 2. Modélisation

Le bilan de masse d'un composé  $i$  dissous dans la phase liquide  $L$  s'écrit :

$$\frac{\partial \rho_{Li}}{\partial t} + \nabla \cdot (\mathbf{v}_L \rho_{Li}) = \nabla \cdot (D \nabla \rho_{Li}) + J_i \quad (1)$$

où le terme  $J_i$  correspond au taux de changement de phase exprimé de la façon suivante [1, 3] :

$$J_i = -L_i \frac{R}{\eta_g M_i} \ln \left( \frac{P_v^i}{P_{veq}^i} \right) \quad (2)$$

Dans cette relation le coefficient phénoménologique de changement de phase  $L_i$  caractérise la cinétique du phénomène. Ce coefficient dépend des variables d'état (température  $T$ , teneur en liquide du composé  $w_i$ , ...) et des propriétés du sol (composition, texture, compacité, ...). Le taux de changement de phase  $J_i$  est un terme volumique macroscopique qui encapsule un ensemble de phénomènes microscopiques :

changement de phase au niveau de l'interface liquide/gaz, refroidissement des interfaces et rééquilibrage thermique, diffusion de la vapeur à l'échelle des pores, ... Aucune expression explicite n'est disponible et sa détermination passe donc par une étude expérimentale.

### 3. Résultats expérimentaux

Un dispositif expérimental original a été conçu afin de caractériser les équilibres liquide/gaz relatifs à une phase liquide quelconque adsorbée dans un échantillon de sol. Le régime stationnaire donne accès aux isothermes de désorption, alors que le régime transitoire permet la détermination de la cinétique de changement de phase. Ce dispositif fait actuellement l'objet d'un dépôt de brevet et son principe ne peut pas être exposé ici.

Par ce biais, les isothermes du *TCE* ont pu être établies et comparées à celles d'autres liquides (Fig. 1a). De plus le coefficient de changement de phase associé au *TCE* pur,  $L_T$ , est donné dans la Fig. 1b en fonction de la teneur en *TCE* liquide dans le sol. La courbe présente une allure similaire à celles obtenues avec de l'eau pure. Le maximum est atteint autour de 1.5%. Pour des teneurs inférieures à 1.5%, les effets hygroscopiques liés à l'adsorption du composé sur la phase solide deviennent importants. L'énergie de liaison supplémentaire a pour effet de ralentir la cinétique d'évaporation. Au-delà de 1.5%, on peut interpréter la décroissance comme étant une diminution de la surface interfaciale liquide/gaz participant au changement de phase. Ses valeurs sont environ 50 fois supérieures à celles de l'eau et met ainsi clairement en évidence le caractère plus volatil du *TCE* par rapport à l'eau.

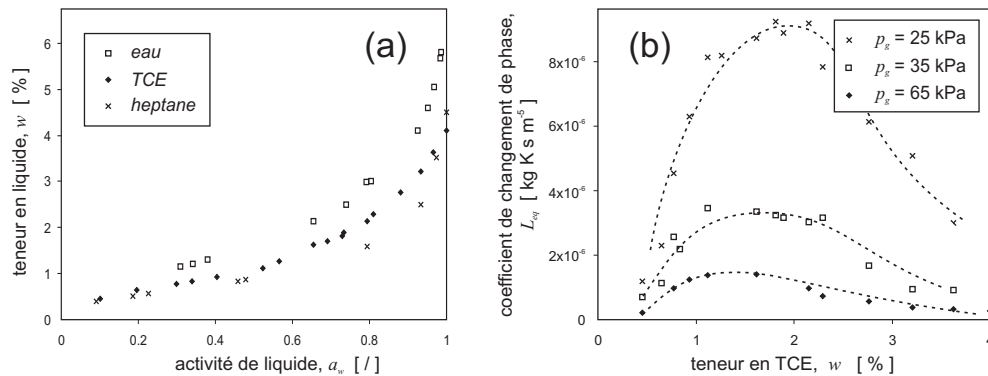


FIG. 1: (a) Isothermes de désorption de différentes phases liquides dans un sol; (b) coefficient phénoménologique de changement de phase du *TCE* à différentes pressions atmosphériques.

### 4. Perspectives

Une extension de ce dispositif expérimental est en cours d'essai autorisant la caractérisation simultanée des équilibres liquide/gaz, à la fois de l'eau en tant que solvant ainsi que du *TCE* dissous dans la phase liquide. Ce nouveau dispositif doit permettre de déterminer la constante de Henry dans un sol et montrer l'influence des effets hygroscopiques sur cette constante. En parallèle, une discrétisation numérique des équations de bilan couplées de l'eau et du *TCE* a été écrite afin de tester la validité de l'hypothèse d'équilibre local.

### Références

- [1] J.C. Bénet, P. Jouanna, Phenomenological relation of phase-change of water in a porous medium : Experimental verification and measurement of the phenomenological coefficient, International Journal of Heat and Mass Transfert, 25, 1747–1754 (1982)
- [2] M. Bohy, L. Dridi, G. Schäfer, O. Razakarisoa, Transport of a mixture of chlorinated solvent vapors in the vadose zone of a sandy aquifer : Experimental study and numerical modeling, Vadose Zone Journal, 5, 539–553 (2006)
- [3] A. Chammari, B. Naon, F. Cherblanc, B. Cousin, J.C. Bénet, Drying kinetic analysis using macroscopic non equilibrium between liquid water and vapor, Drying Technology, 26, 836–843 (2008)
- [4] A.L. Lozano, F. Cherblanc, B. Cousin, J.C. Bénet, Experimental study and modelling of the water phase change kinetics in soils, European Journal of Soil Science, 59, 939–949 (2008)