



HAL
open science

Les processus de transfert des pesticides dans les sols : déterminants et pistes d'actions

Pierre Benoit, Marjolaine Bourdat-Deschamps, Nathalie Bernet, Sabine Houot

► **To cite this version:**

Pierre Benoit, Marjolaine Bourdat-Deschamps, Nathalie Bernet, Sabine Houot. Les processus de transfert des pesticides dans les sols : déterminants et pistes d'actions. École thématique. Webinaire - Centre Ressources Captage OFB, France. 2021. hal-04334367

HAL Id: hal-04334367

<https://hal.inrae.fr/hal-04334367v1>

Submitted on 10 Dec 2023

HAL is a multi-disciplinary open access archive for the deposit and dissemination of scientific research documents, whether they are published or not. The documents may come from teaching and research institutions in France or abroad, or from public or private research centers.

L'archive ouverte pluridisciplinaire **HAL**, est destinée au dépôt et à la diffusion de documents scientifiques de niveau recherche, publiés ou non, émanant des établissements d'enseignement et de recherche français ou étrangers, des laboratoires publics ou privés.

Public Domain

Les processus de transfert des pesticides dans les sols : déterminants et pistes d'actions



Pierre Benoit, Laure Mamy, Enrique Barriuso

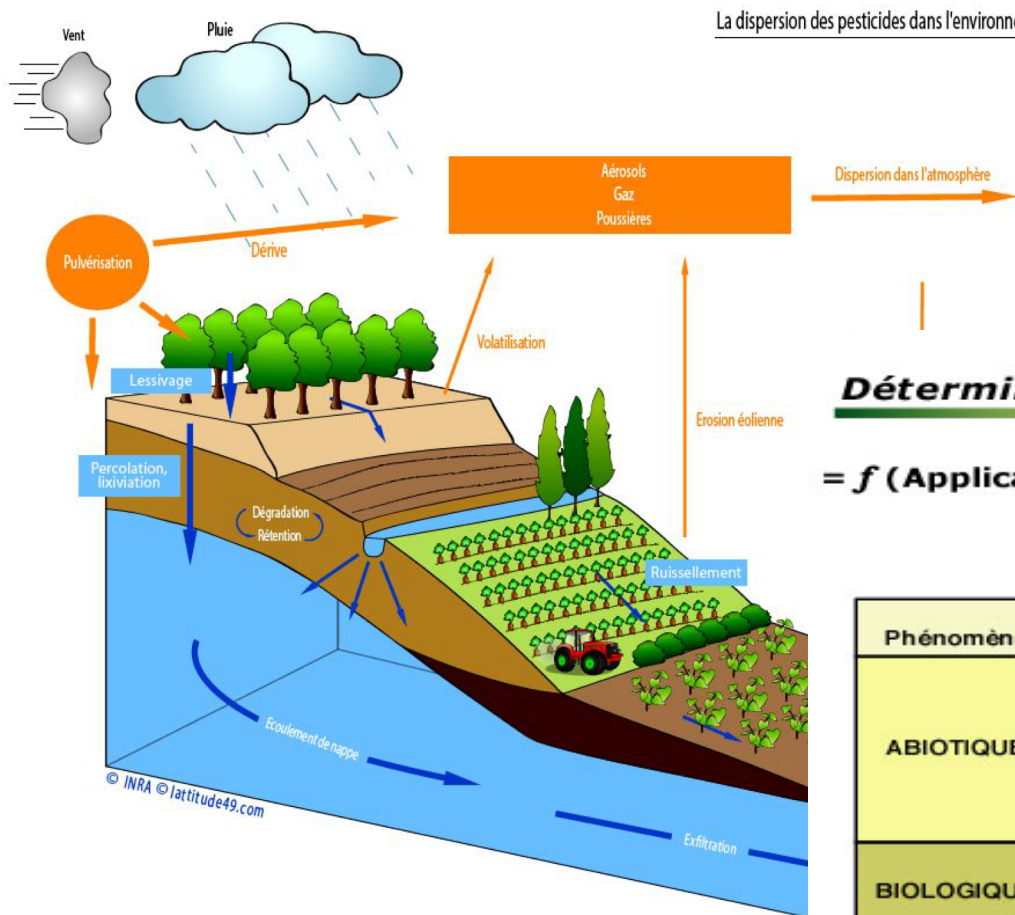
UMR1402

Ecologie Fonctionnelle et écotoxicologie des agroécosystèmes

INRAE, AGROPARISTECH



Devenir environnemental des pesticides



Sol = Interface clef

Déterminisme des facteurs d'exposition - disponibilité

$$= f(\text{Application}) - f'(\text{Transformation, Rétention}) - f''(\text{Transport})$$

Phénomènes	TRANSFORMATION	RETENTION	TRANSPORT
ABIOTIQUES	Photolyse Catalyse	ADSORPTION/DESORPTION Précipitation → Solubilisation Sublimation Réaction de coordination	LIXIVIATION Lessivage RUISSELLEMENT Erosion VOLATILISATION
BIOLOGIQUES	METABOLISME	Absorption → Plante Microflore	Culture Faune

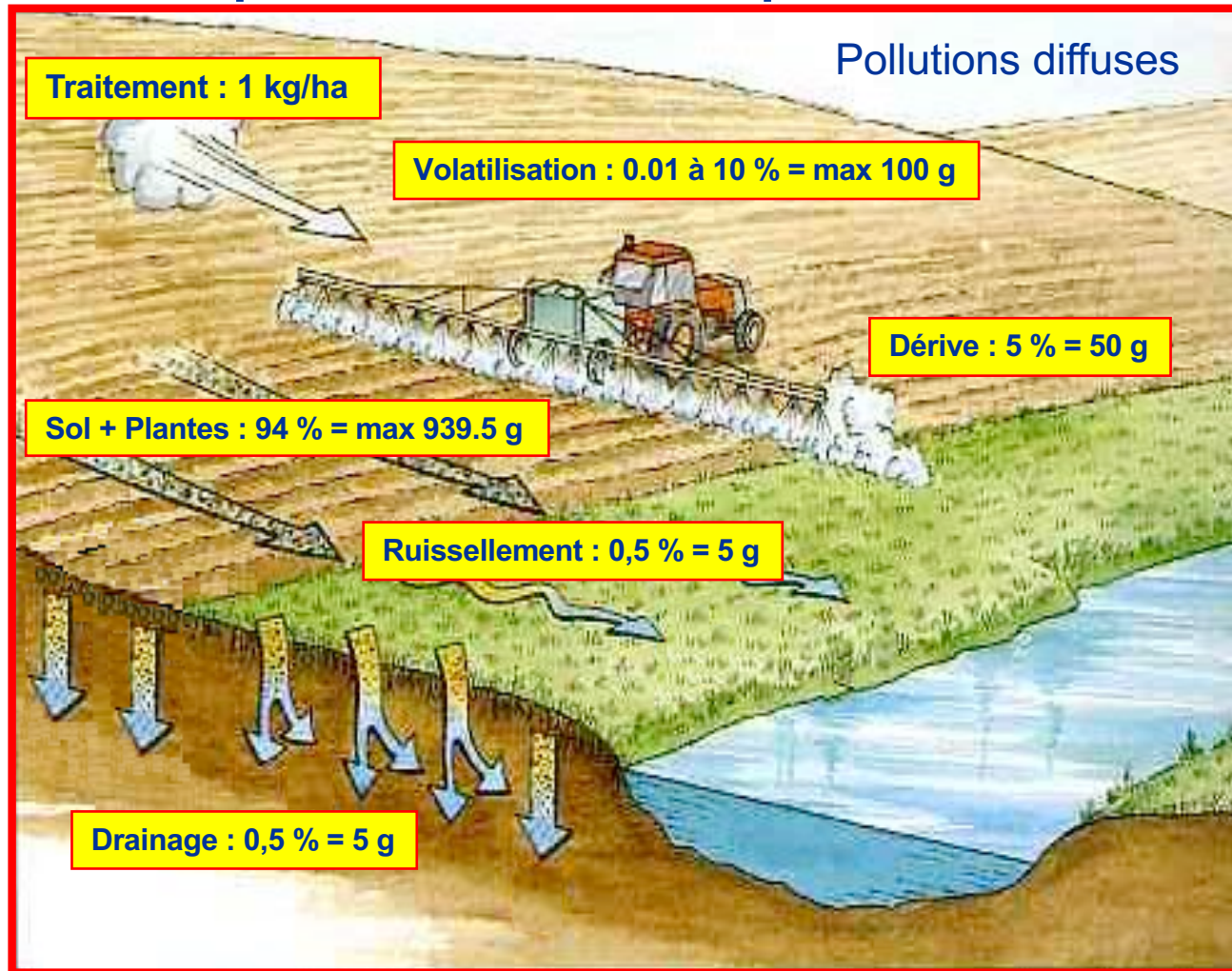
Deux démarches complémentaires
Déterminisme de la disponibilité
Évaluation des voies de transferts



INRAE

Transferts : quels ordres de grandeurs ?

Flux de pesticides dans une parcelle traitée



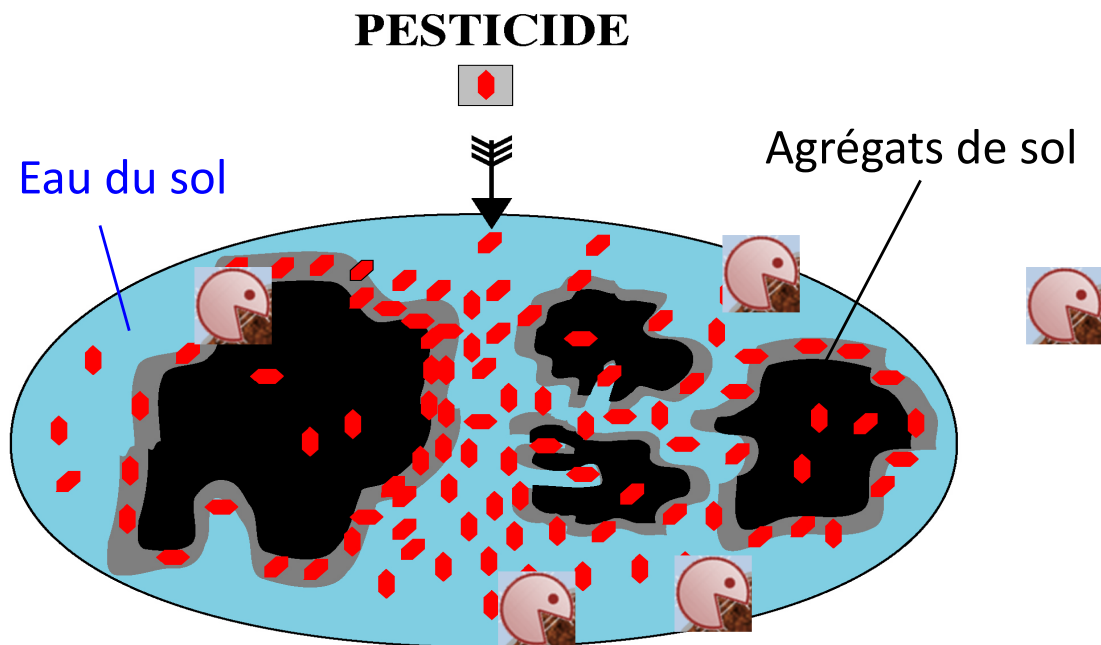
Sol = Interface clef

- devenir et effets
- voies d'exposition des autres milieux

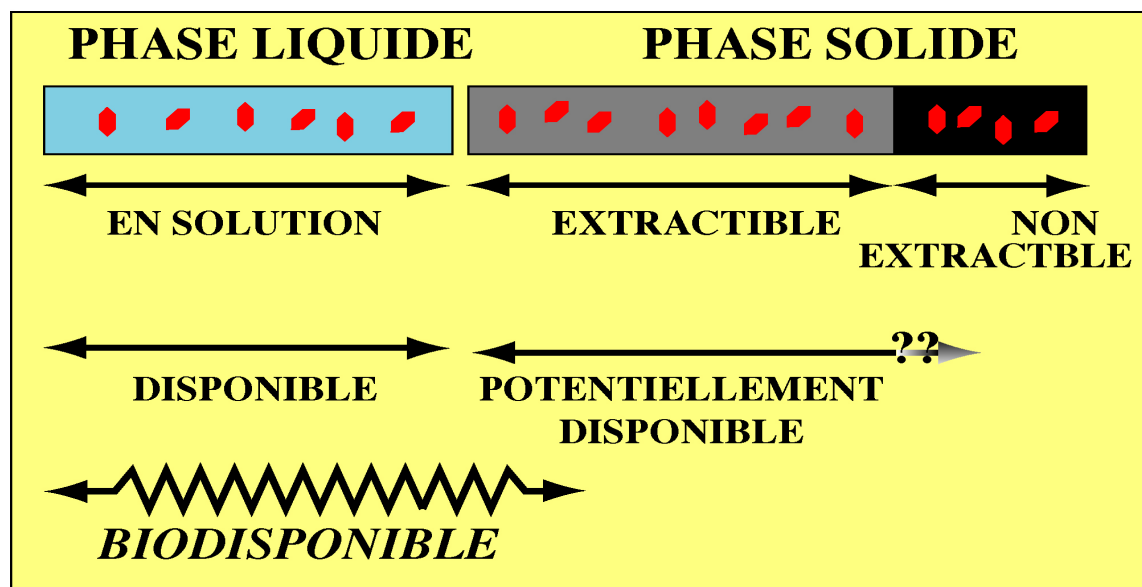


INRAE

Concentrations : totales ou disponibles



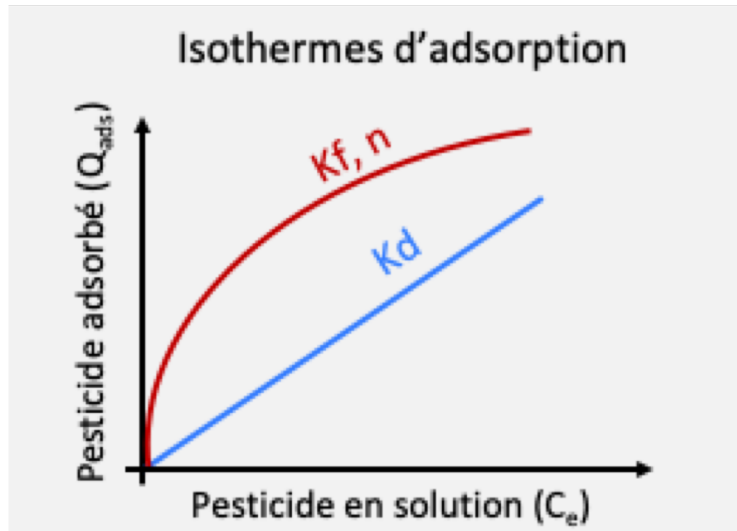
Microorganismes capables de dégrader les pesticides



Barriuso et al., 1996

Mobilité des pesticides - A retenir :

- ❖ Plus le coefficient K_d ou K_{oc} est grand plus la rétention des pesticides est importante et moins ils sont mobiles dans les sols



Coefficients d'adsorption

Linéaire $K_d = Q_{ads} / C_e$ ($L\ kg^{-1}$)

$K_{oc} = K_d / CO$ ($L\ kg^{-1}$)

Freundlich $K_f = Q_{ads} / C_e^n$

- ❖ La rétention des molécules hydrophobes = peu solubles dans l'eau est majoritairement contrôlée par les matières organiques du sol. Plus celles-ci sont en quantités élevées dans les sols, plus les **substances actives** sont retenues et moins elles sont mobiles

- ❖ **MAIS** la rétention dépend aussi d'autres facteurs (pH, argiles)



Mobilité des pesticides - A retenir :

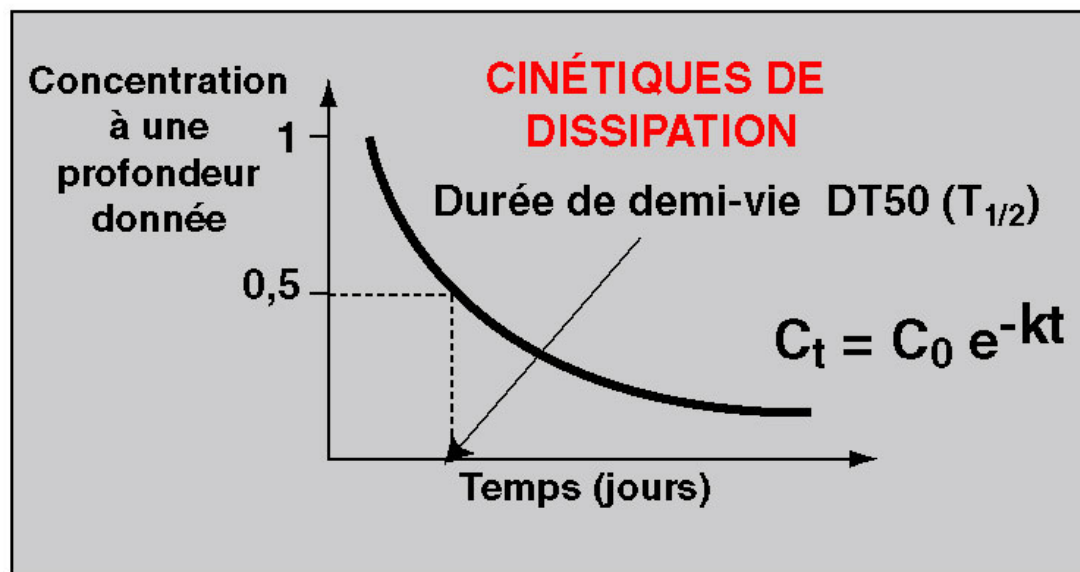
- ❖ Le Koc est utilisé comme **caractéristique des substances actives** **MAIS** il **varie** car il dépend de la nature des matières organiques des sols et il ne prend pas en compte d'autres facteurs influents : **argiles, cations, pH**



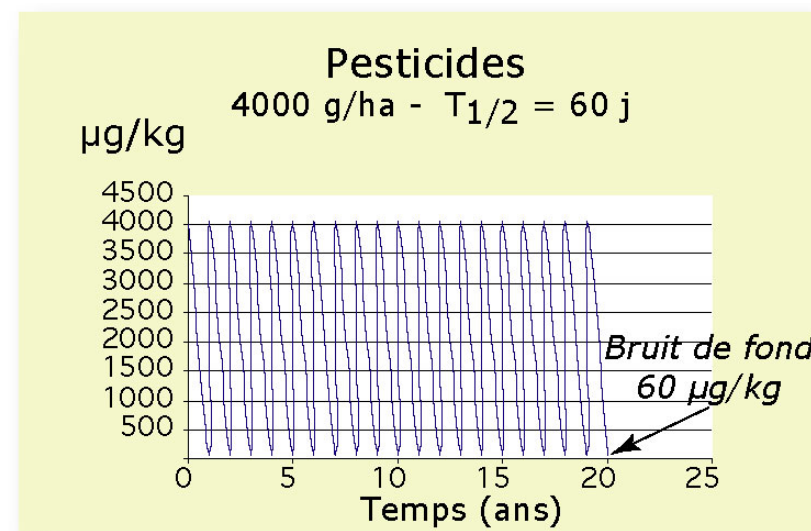
TROP FORTE SIMPLIFICATION

- ❖ Le **Koc varie** donc selon les types de sols et selon la proportion relative entre fractions organique et minérale : en conséquence **en fonction de la profondeur du sol**

Persistance des molécules - A retenir :



- ❖ Plus la DT50 est élevée, plus la persistance/rémanance des pesticides est importante et plus ils peuvent être transportés hors des zones de traitement



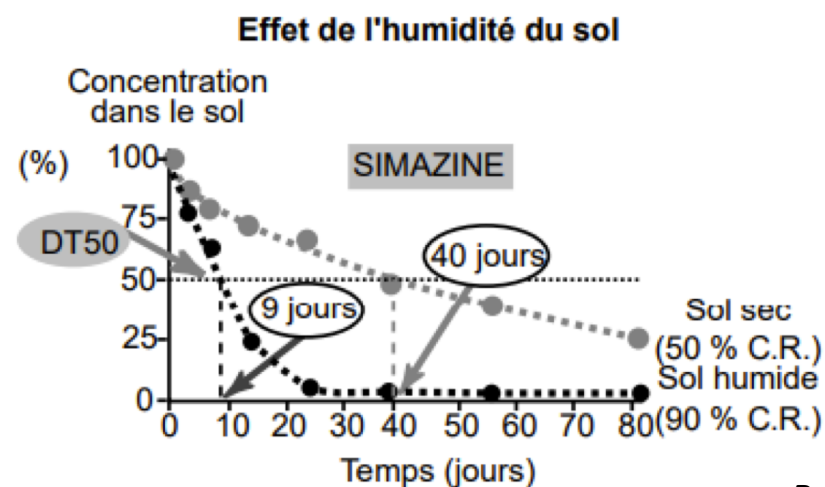
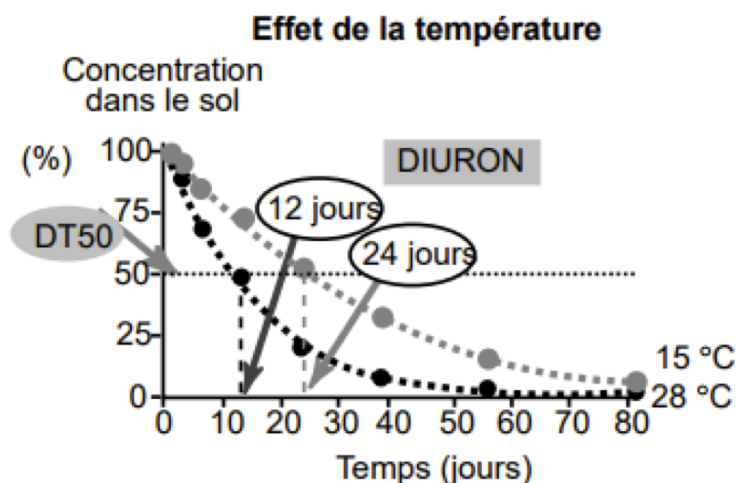
INRAE

Barriuso et al., 1996

Webinaire Centre Ressources Captages OFB – 10 juin 2021

Persistance des molécules - A retenir :

- ❖ La DT50 est utilisée comme **caractéristique des substances actives**
- ❖ **MAIS** elle varie car elle dépend :
 1. Des conditions de mesures (DT50 labo \neq DT50 champ)
 2. Des facteurs climatiques



Barriuso et al., 1996

3. Des facteurs pédologiques (qui contrôlent la biodisponibilité, et l'activité microbienne)
4. Des facteurs liés aux pratiques (fréquence d'usage)



INRAE

Liens pratiques phytos et dégradation : A retenir

- ❖ **Les pratiques phytosanitaires ont un effet sur les capacités de dégradation des sols**
 1. Pression de sélection sur la microflore et des sols
 2. Bactéries du sol capables de s'adapter à la présence de certaines S.A.
 3. Conséquences sur des pertes d'efficacité
 4. Conséquences aussi sur la diminution de la persistance et la réduction des impacts si dégradation complète

- ❖ **Dégradation accélérée mise en évidence pour un grand nombre de SA**



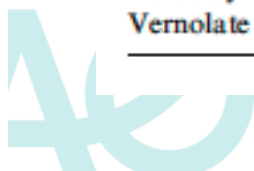
Biodégradation accélérée et pertes d'efficacité

Table 1
Herbicides known to undergo accelerated degradation

Pesticide	Loss of efficacy	Reference
2,4,-D	+	Audus (1949, 1951); Gray and Joo (1985)
Alachlor		Walker and Wech (1991)
Amitrole		Riempa (1962)
Atrazine		Barriuso and Houot (1996)
Bentazon		Wagner et al. (1996)
Butylate	+	Harvey (1987)
Carbetamide	+	Hole et al. (2001)
Chloramben		Wildung et al. (1968)
Chlorotoluron		Rouchaud et al. (2000)
Chlorsulfuron		Ravelli et al. (1997)
Dalapon	+	Leasure (1964); Gray and Joo (1985)
Diclofop-methyl		Piutti et al. (2002)
Diuron		Rouchaud, et al. (2000)
Endothall		Horowitz (1966)
EPTC	+	Rahman and James (1983)
Isoproturon	+	Bending et al. (2001); El-Sebai et al. (2005)
Isoxaben		Rouchaud et al. (1997)
Linuron		Walker and Wech (1991)
MCPA		Audus (1951)
Monolinuron		Maier-Bode and Hartel (1981)
Napropamide		Walker and Wech (1991)
Nitralin		Savage (1973)
Pendimethaline		Kulshrestha et al. (2000)
Proyzamide	+	Walker and Welch (1991); Rouchaud et al. (2000)
Pyrazon		Engvold and Jansen (1969)
Simazine	?	Albarrán et al. (2004); Suett et al. (1996a)
Terbutryn		Avidov et al. (1985)
Vernolate	+	Wilson (1984); Gray and Joo (1985)

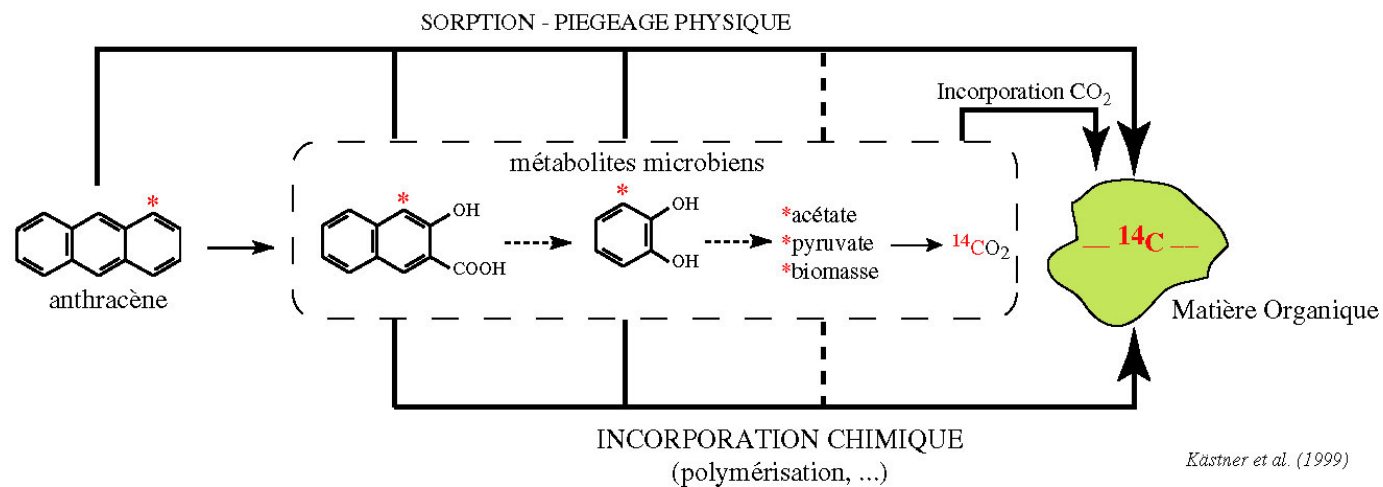
Herbicides

Arbeli et Fuentes, 2007



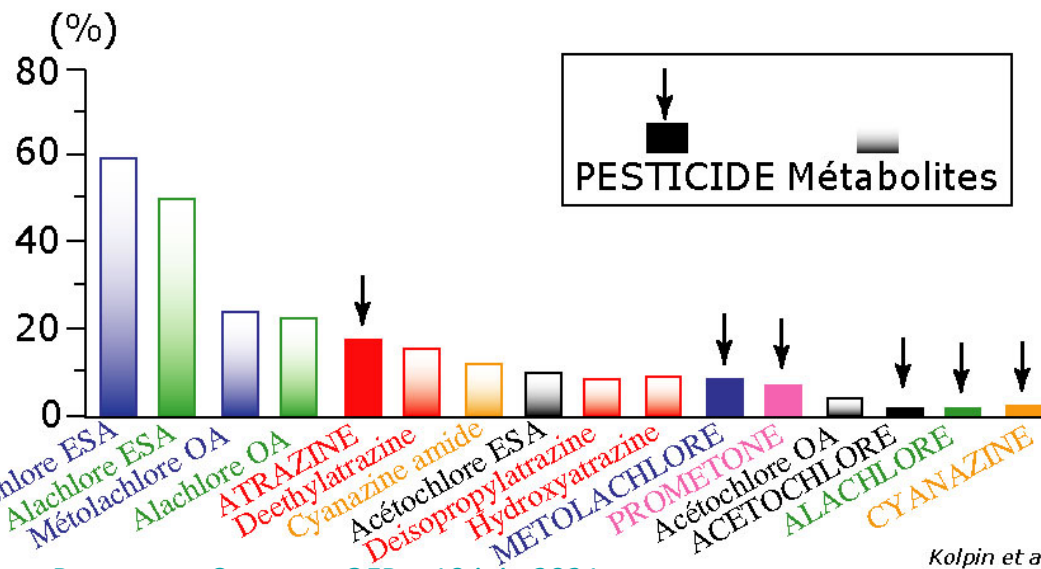
Métabolites- produits de dégradation (transformation)

- Modification de la réactivité, toxicité, ...



- Démultiplication des polluants

Fréquence de détection (%)

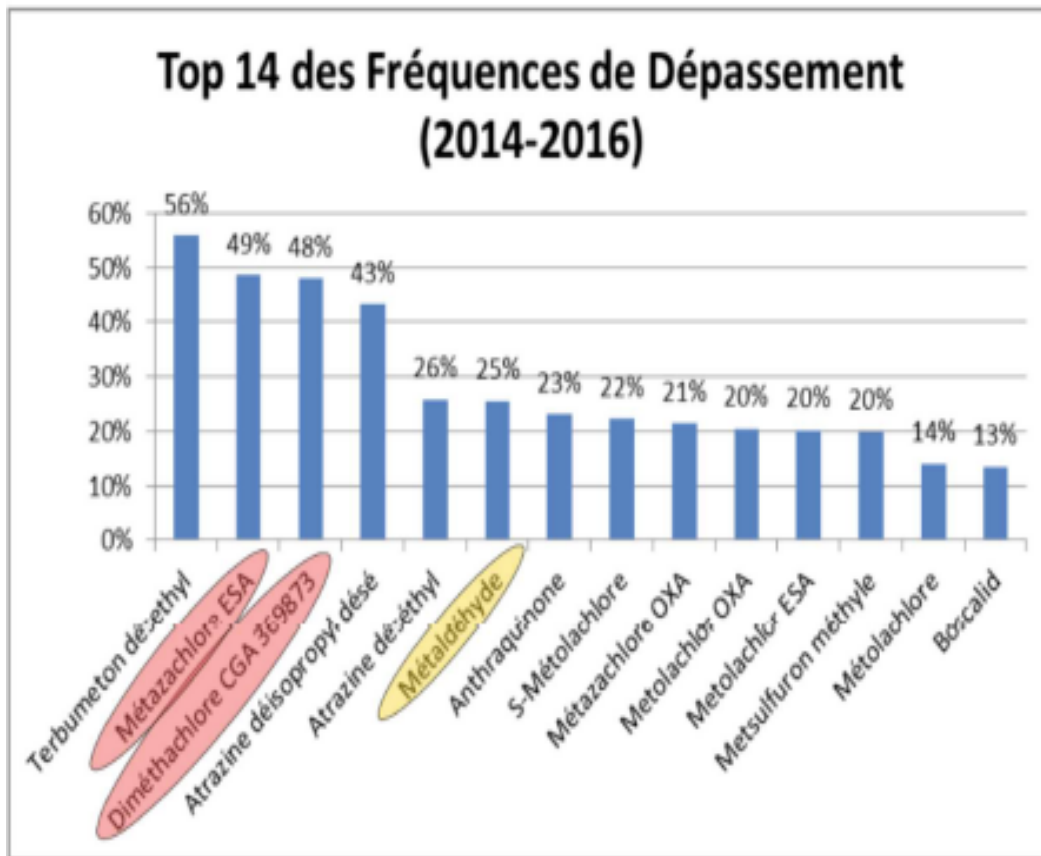


Kolpin et al. (1998)



INRAE

Exemple : Captages de l'Yonne



Boscalid DT_{50 champ} 200 jours ; K_{oc} 809 l/kg

Metaldehyde DT_{50 champ} 5 jours ; K_{oc} 85 l/kg

S-Metolachlore DT_{50 champ} 7 - 16 jours ; K_{oc} 200 l/kg

➤ Metolachlor OXA DT₅₀ 50 jours ; K_{oc} 7-22 l/kg

➤ Metolachlor ESA DT₅₀ 70 - 132 jours ; K_{oc} 5-20 l/kg

Metazachlor DT_{50 champ} 200 jours ; K_{oc} 134 l/kg

➤ Metazachlor OXA DT₅₀ ; K_{oc} 48 l/kg

➤ Metazachlor ESA DT₅₀ ; K_{oc} 41 l/kg

Atrazine DT₅₀ 75 jours ; K_{oc} 100 l/kg

➤ Desethyl- Atrazine DT₅₀ 45 jours ; K_{oc} 72 l/kg

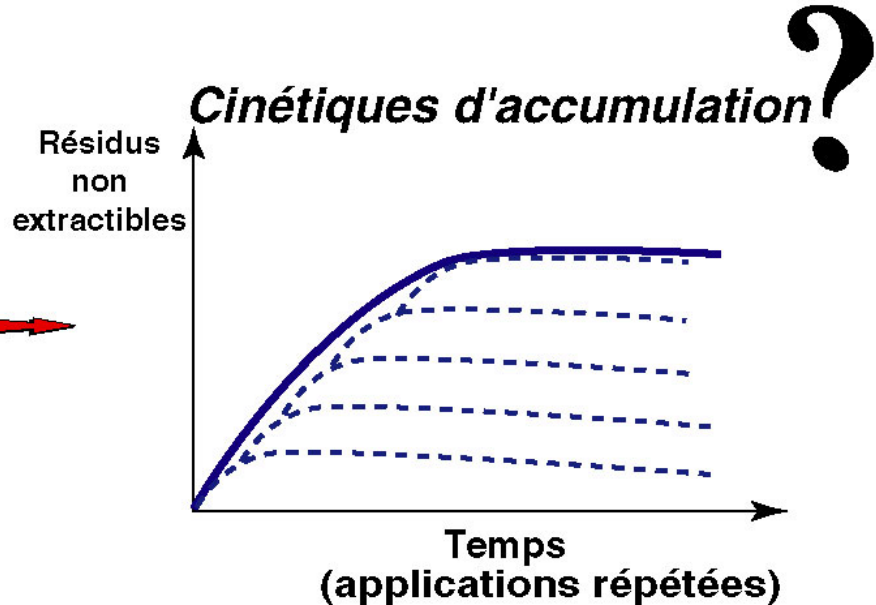
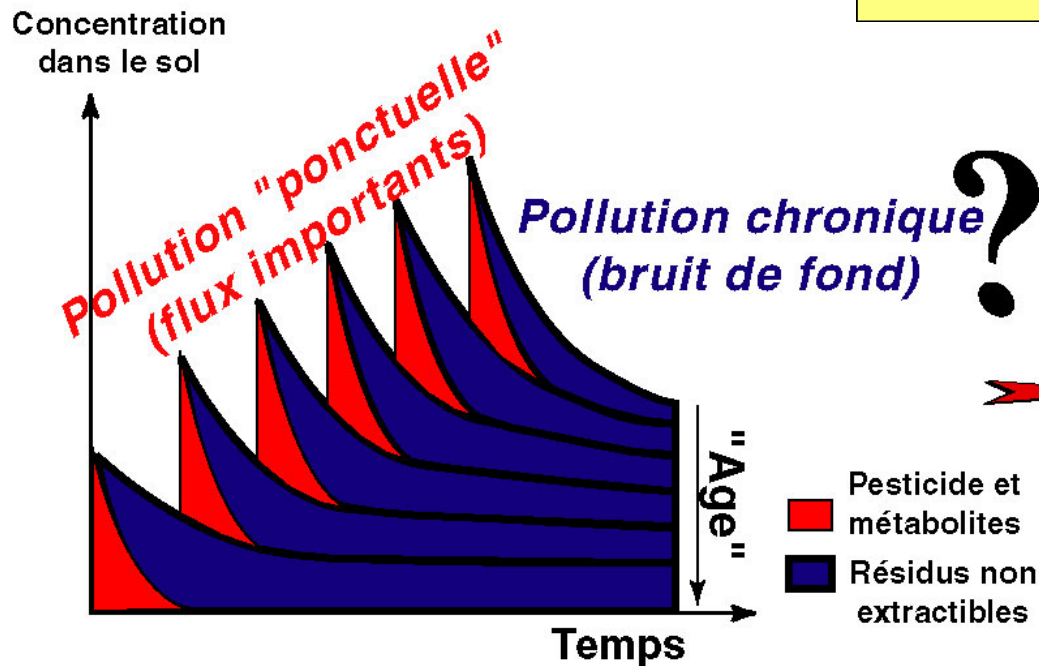
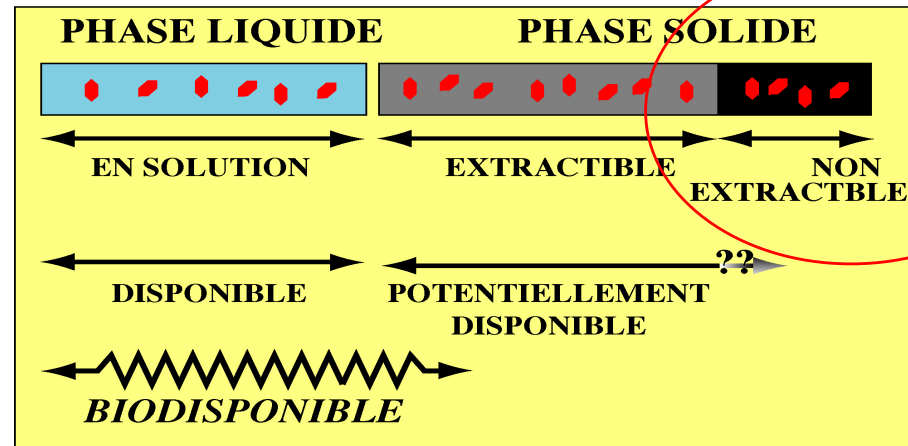
PPDB - Pesticide Properties DataBase, 2016

Certains métabolites plus persistants et/ou plus mobiles que molécules mères

- Deséthyl atrazine
- ESA et OXA metolachlor, metazachlor

La question des résidus non extractibles

Accumulation - stockage ?
 Atténuation naturelle ?
 Degré de réversibilité ?



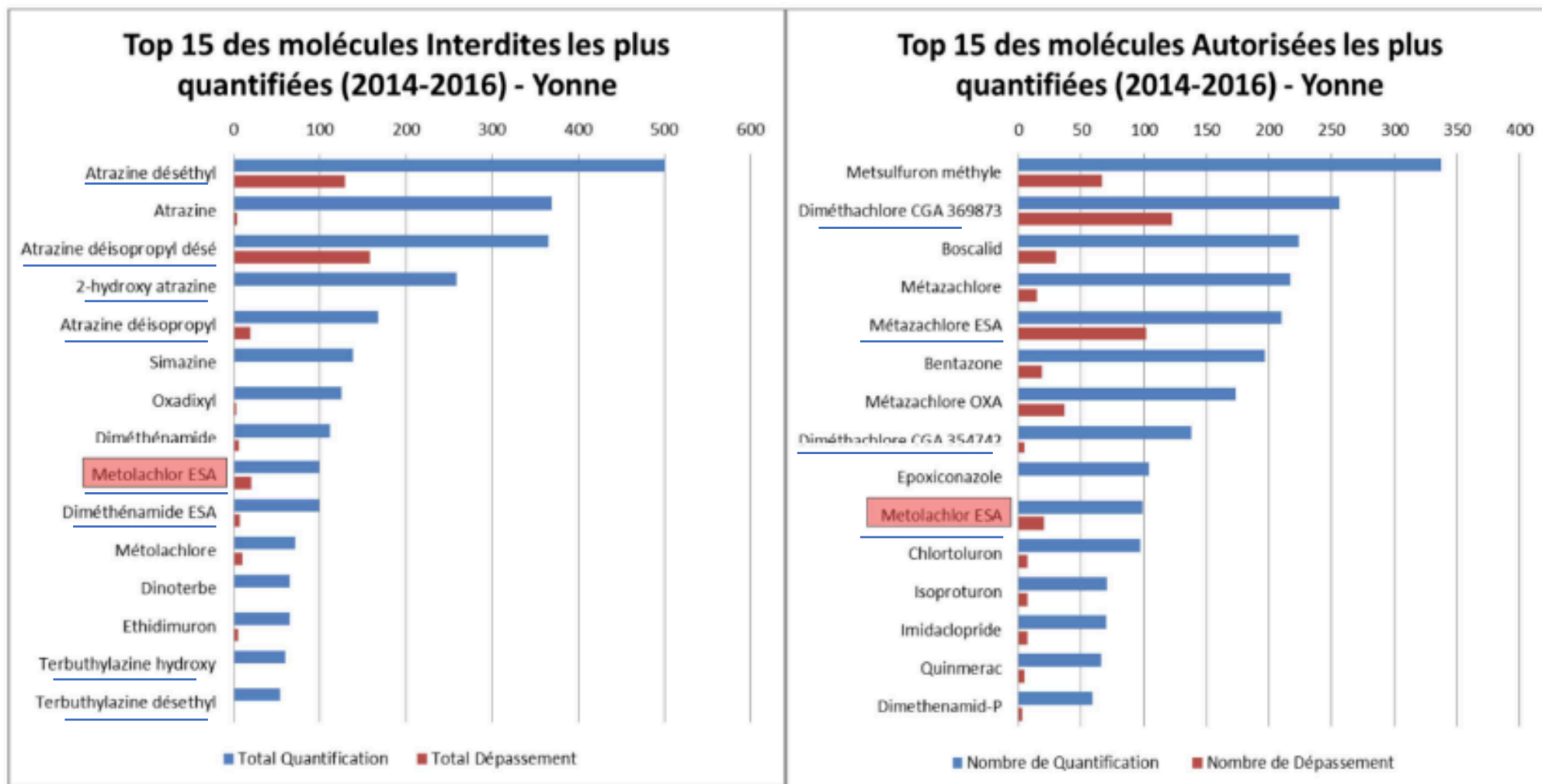
Barriuso, 1999



INRAE

Des dynamiques à long terme

Taux de quantification (% des analyses réalisées pour chaque substance)



INRAE

Résidus dans les sols - A retenir :

❖ Les produits de transformation (métabolites) :

1. Multiplication des contaminants
2. Toxicité, persistance et mobilité différentes
3. A prendre en considération dans l'évaluation des risques

❖ La formation de résidus non extractibles

1. Diverses origines (physique, chimique et biologique)
2. Souvent couplé aux processus de biodégradation
3. Diverses formes (SA, métabolites, C microbien)
4. Dans certains cas, à l'origine de contamination différée – exemple de produits retrouvés dans l'environnement longtemps après arrêt de leur utilisation)



Quelles pistes d'action ?

Réduire les usages (baisser les IFT) via des changements de systèmes recherchant une moindre sensibilité aux bioagresseurs

Réduire les possibilités de transferts (post application mais aussi différés dans le temps)

- ❖ Effets de l'intercalation de prairies temporaires
- ❖ Effets des couverts intermédiaires
- ❖ Effets du travail du sol
- ❖ Effets de l'allongement des rotations
- ❖ Effets d'aménagements inter-parcellaires et paysagers



Pratiques et transferts de pesticides

En grandes cultures : prairies temporaires

Une pratique courante en système de polyculture-élevage

- Effets sur les cultures

- Diminution pression biotique par allongement des rotations

- Effets sur le sol

- Matières organiques et cycles
- Amélioration structure du sol
- Activité biologique du sol, auxiliaires

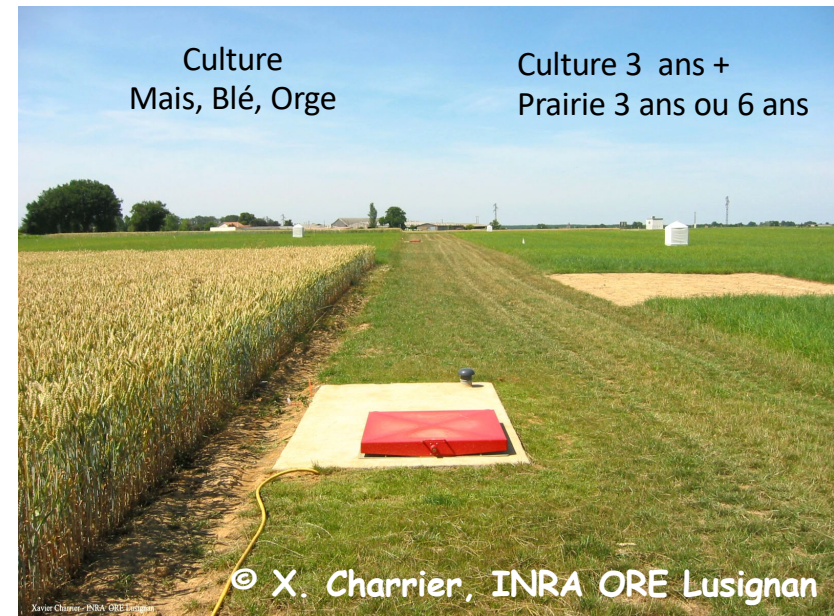
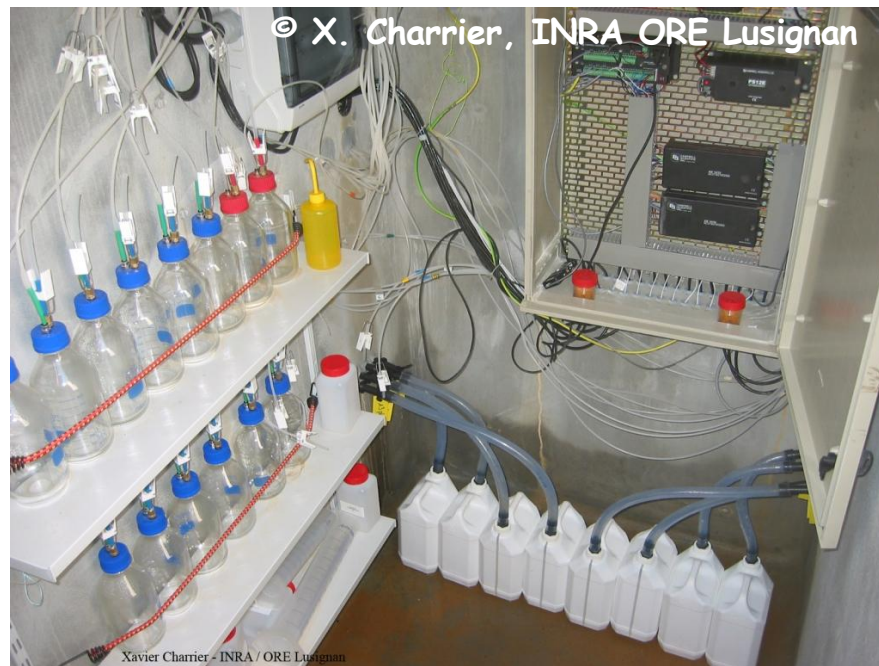
- Effets sur l'environnement

- Réduction des traitements sur plusieurs années
- Protection contre ruissellement et érosion
- Limitation des transferts de phytosanitaires



Prairies temporaires en grandes cultures et pertes en herbicides vers les eaux souterraines

- ❖ ORE ACBB Site de Lusignan - INRA Poitou-Charentes
- ❖ Comparaison de 2 modes de conduites :



Collaboration ORE ACBB A. Chabbi, X. Charrier



INRAE

Prairies temporaires en grandes cultures et pertes en herbicides vers les eaux souterraines

- ❖ ORE ACBB Site de Lusignan - INRA Poitou-Charentes
- ❖ Comparaison de 2 modes de conduites :

Substance	Rotation : Maïs - Blé - Orge			Cycle Culture - Prairie temporaire (N et fauche)	
	2006-2007 (orge)	2007-2008 (maïs)	2008-2009* (blé)	2007-2008 (prairie)	2008-2009 (prairie)
Isoproturon	[0,03-20]	< 0,02	< 0,02	< 0,02	< 0,02
MD-Isoproturon	[0,05-0,18]	< 0,02	< 0,02	< 0,02	< 0,02
DD-Isoproturon	[0,05-0,07]	0,02	< 0,02	< 0,02	< 0,02
Diflufenican	< 0,05	< 0,03	< 0,03	< 0,03	< 0,03
Alachlor	n.r.	< 0,03	< 0,03	< 0,03	< 0,03
Acetochlore	n.r.	[0,06-15,0]	[0,1-0,2]	< 0,03	< 0,03
Imidaclopride	n.r.	< 0,03	n.r.	< 0,03	n.r.
Atrazine	< 0,02	< 0,02	< 0,02	< 0,02	< 0,02
OH-Atrazine	[0,05-0,12]	[0,03-0,09]	[0,04-0,06]	[0,03-0,06]	[0,02-0,07]

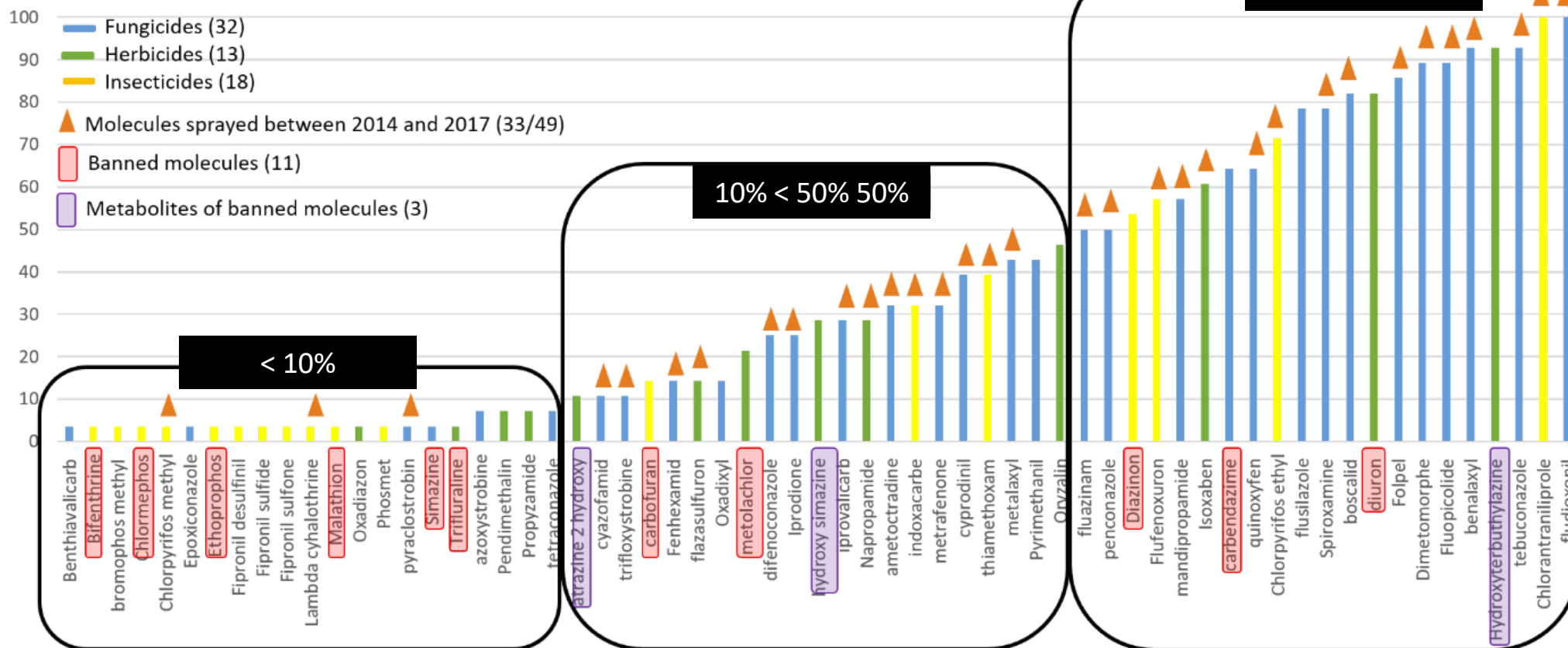
Collaboration ORE ACBB A. Chabbi, X. Charrier



Pratiques et transferts de pesticides

En viticulture

Fréquence de détection %



M. Pierdet, Thèse 2020



INRAE



université de BORDEAUX



EPOC



Interactions Sol Plante Atmosphère

Pratiques et transferts de pesticides

En viticulture et arboriculture : enherbement

Vignes, vergers : une pratique ancienne combinant plusieurs intérêts

- **Effets sur la vigne**

- Contrôle de la vigueur > qualité de la vendange
- Réduction sensibilité maladies (Botrytis) > réduction traitement fongicide

- **Effets sur le sol**

- Activité biologique du sol, auxiliaires
- Amélioration structure du sol, lutte contre compactage
- Portance des engins, accessibilité des parcelles

- **Effets sur l'environnement**

- Réduction des applications d'herbicide (interrang)
- Protection contre ruissellement et érosion
- Limitation des transferts de phytosanitaires



Modes de conduite de la vigne et transferts de pesticides

4 modes de conduites en vignoble languedocien (Andrieux et al., 2007)



1 Désherbage chimique en plein



2 Enherbement naturel maîtrisé par le glyphosate



3 Enherbement naturel maîtrisé par un travail du sol



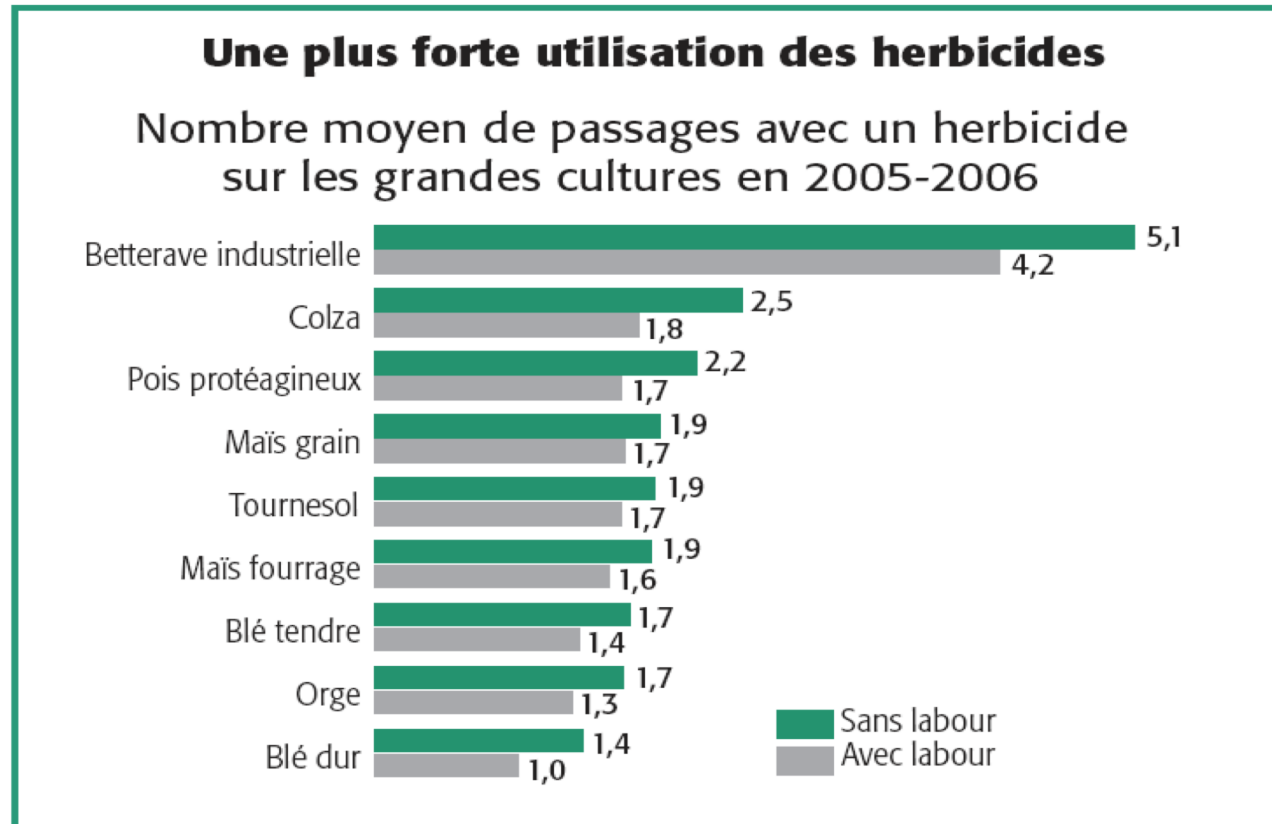
4 Engazonnement

Ruissellement (mm)	Pertes en terre (t/ha)	Pertes en glyphosate (g/ha)			Pertes en AMPA (g/ha)		
		Solution	Particulaire	Total	Solution	Particulaire	Total
1	Désherbage chimique en plein						
219	9,4	30	13,8	43,8	7,7	4,4	12,1
2	Enherbement naturel maîtrisé avec glyphosate						
140	3,9	23,8	8,1	31,9	4,8	1,7	6,5
3	Enherbement naturel maîtrisé par travail du sol						
79	1,3	3,1	0,4	3,5	0,4	0,1	0,5
4	Engazonnement permanent						
104	1,5	1,9	0,4	2,3	0,7	0,2	0,9

➡ Enherbement + travail du sol et Engazonnement ➡ Augmentation capacité infiltration sol et limitation recours aux pesticides ➡ Réduction des transferts de glyphosate

Travail du sol et utilisation des pesticides : la situation en France

Comparaison des fréquences d'utilisation d'herbicides avec et sans labour



Source : Agreste - Enquête sur les pratiques culturales 2006



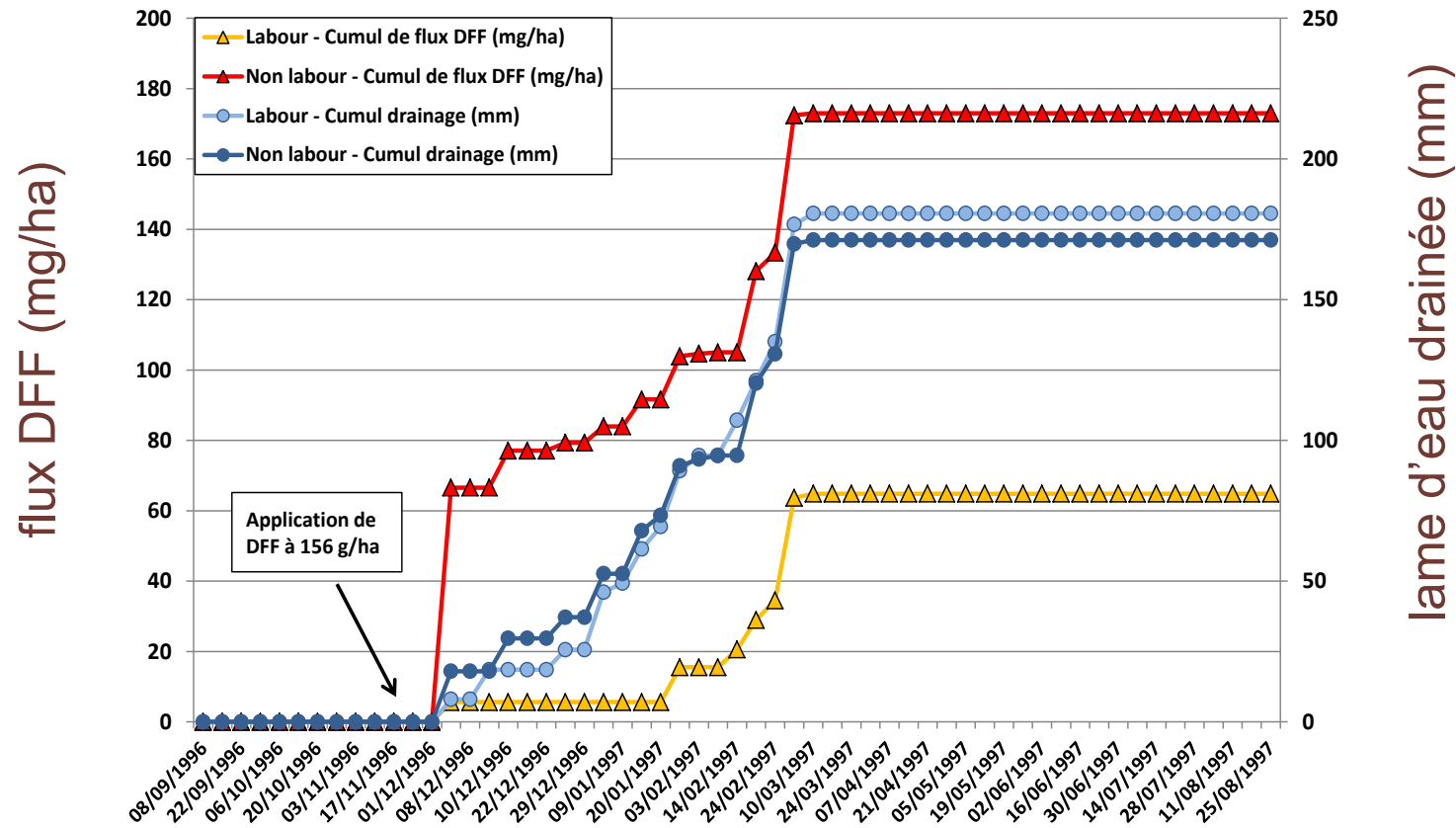
Sols agricoles drainés et travail du sol : études au champ

Drainage : Essais PCQE La Jaillière – Pays de Loire ARVALIS depuis 1993

DFF

Ex : Cumul drainage et flux de DFF – 1996-97

(Quartz GT, Quetzal)



ARVALIS
Institut du végétal

Augmentation des pertes par drainage en non labour par rapport au labour

- Pics d'écoulements plus élevés en reprise de drainage
- Risque plus importants des applications d'automne sur blé
- Tariessement plus rapide en absence de précipitation



INRAE

Effets croisés : couverts intermédiaires x travail du sol

Lixiviation : Suivi terrain 4 ans 2005-2008 - Dicétonitrile

- Monoculture Maïs irrigué – Midi-Pyrénées

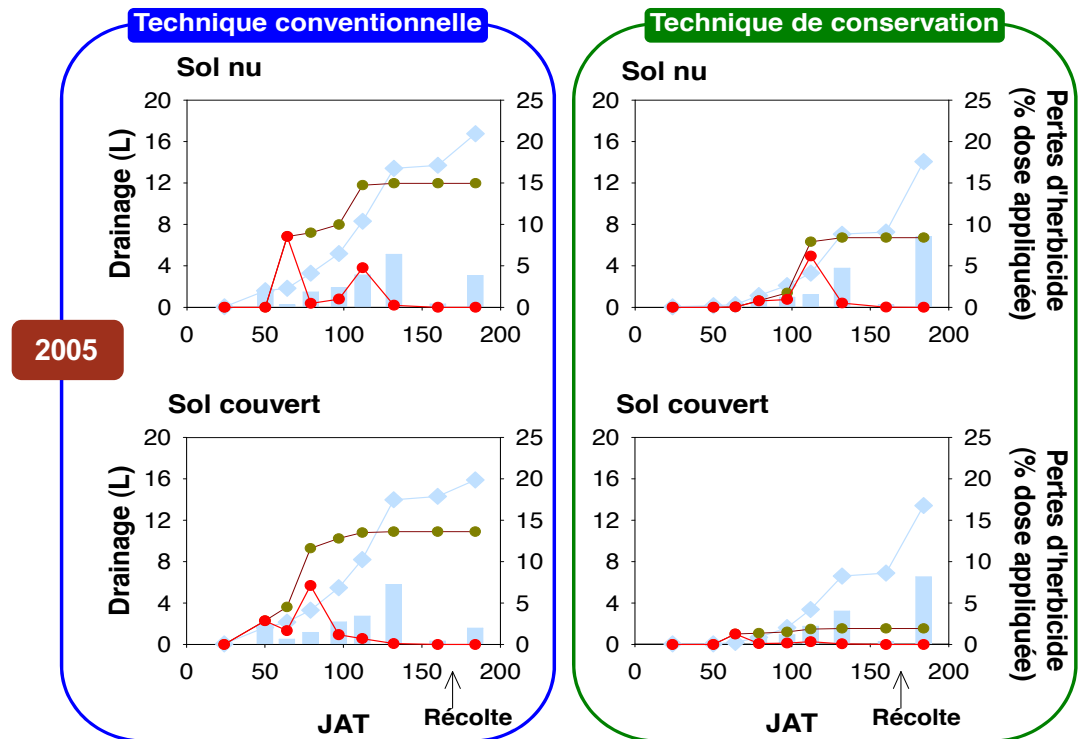


Travail du sol réduit

Facteur d'abattement (flux lixiviés) : 1,6

Travail réduit et Cultures intermédiaires

Facteur d'abattement (flux lixiviés) : 4,5



1. Modification du régime hydrique si bon développement des cultures intermédiaires

2. Effets sur les processus de rétention et de dégradation

Alletto et al., 2012



INRAE



A retenir : Effets du travail du sol

- ❖ La dynamique hydrique est essentielle
 - Circulation de l'eau (par où ?, à quelle vitesse ?)
 - Dynamique d'humectation du sol et d'évaporation

- ❖ Semis direct : possibilité de court-circuits et transferts rapides qui ne permettent pas une rétention et dégradation potentiellement plus élevée

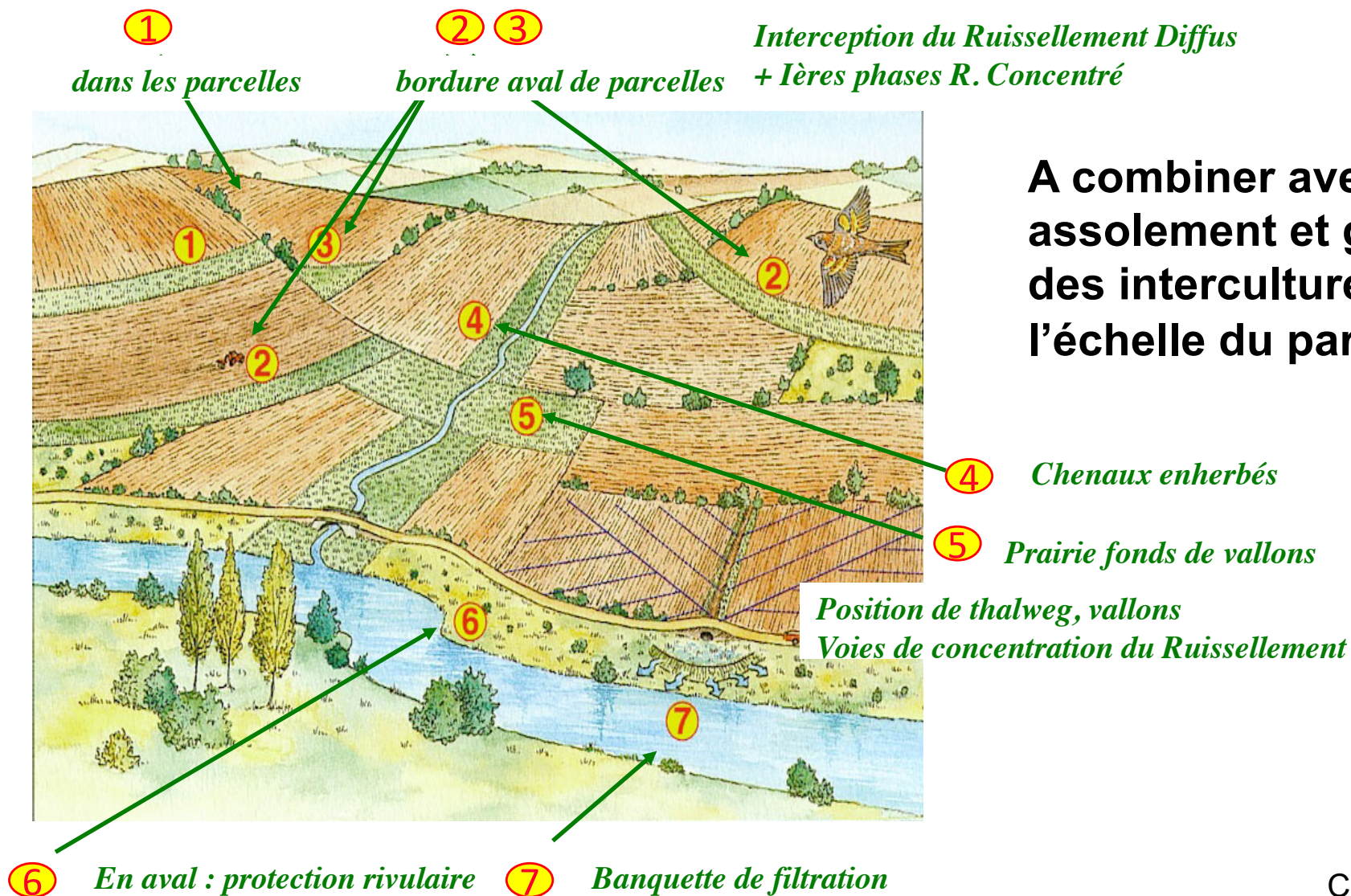
- ❖ Effets combinés des autres pratiques exemple de l'agriculture de conservation (mulchs, cultures intermédiaires, allongement des rotations)

- ❖ Intérêt des cultures intermédiaires
 - Réduction des flux exportés à l'échelle de la saison
 - Réduction des flux à l'échelle de la succession culturale

A retenir : « effets systèmes »

- ❖ Diversité des situations : W du sol x Climat x Sol x Gestion de l'interculture
 - Herbicides mais quid des fongicides, anti-limaces ?
 - **Moins d'études sur les émissions vers atmosphère (volatilisation)**
 - **Données nécessaires sur nouveaux SdC**
- ❖ Besoin d'études à la parcelle et pluri-annuelles
 - Intérêt de réseaux d'essais adaptés aux contextes régionaux et locaux
 - Besoins de références sur des nouveaux systèmes de cultures
- ❖ Evaluation multicritère agronomie, autres impacts environnementaux, socio-économiques

Aménagements paysagers : autres leviers d'action complémentaires



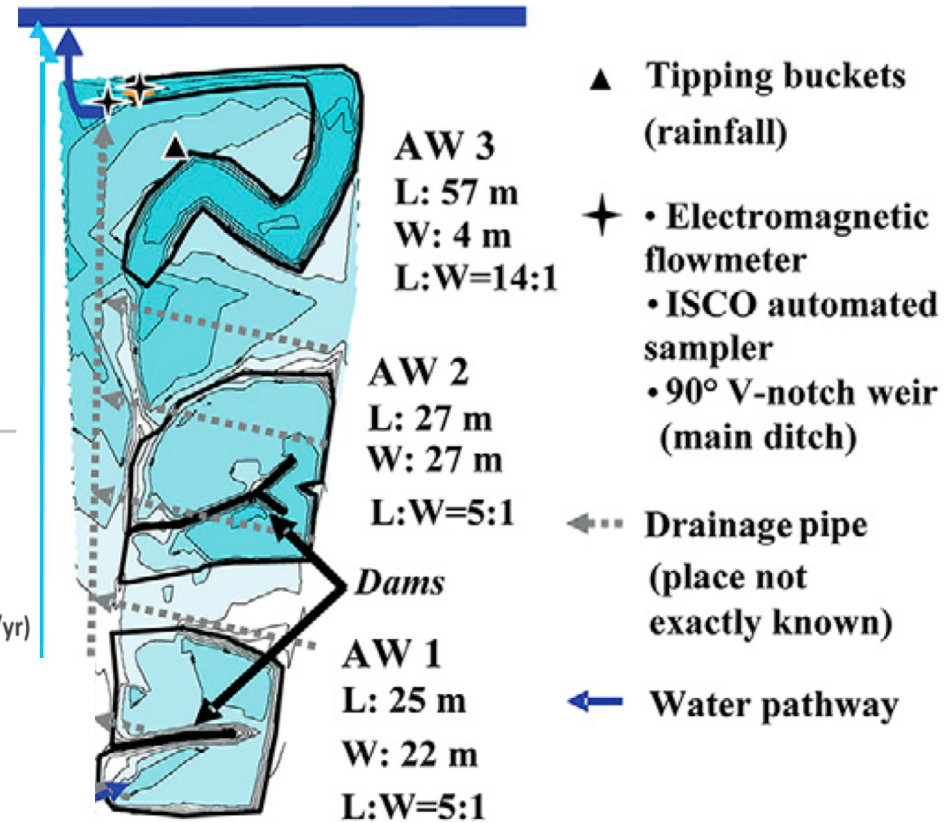
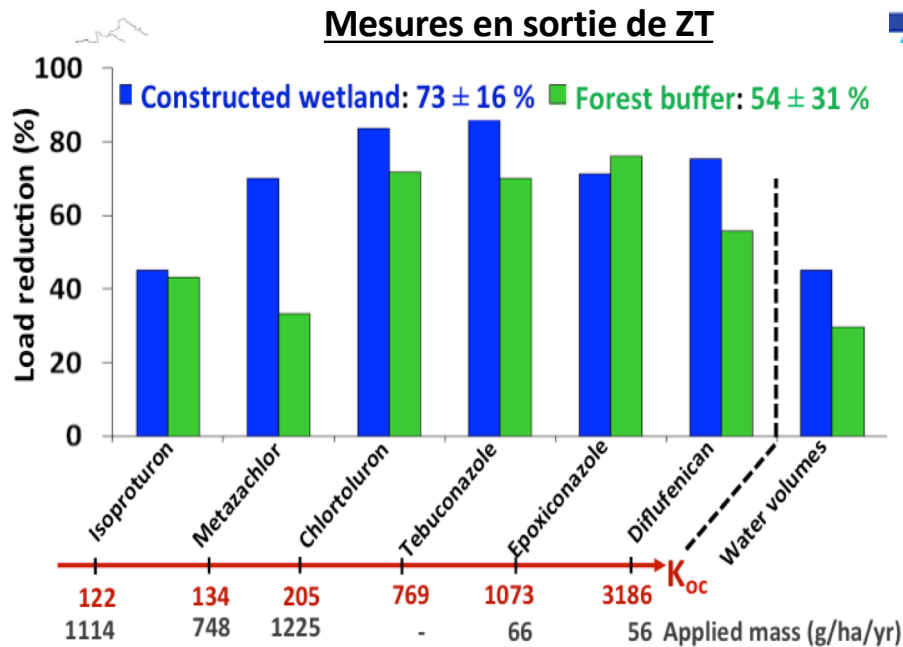
CORPEN, 1997

Boite à outil

Polluant	NO ₃	P dissous NH ₄	P particulaire	Pesticides	Eléments traces	Bactéries, antibiotiques	Limites, effets secondaires
Type de levier							
Adaptation des SDC	++	++	++	+ à ++	++	+ à ++	Acceptabilité
Relocalisation et adaptation des pratiques selon les risques associés	+	++	++	++	++	++	Acceptabilité
Zone humide naturelle	+ à ++	- à ++	+ à ++	+ à ++	- à +	+ à ++	N ₂ O, DON, Débits?
Haie, talus	+	+	+ à ++	+ à ++	+ à ++	+ à ++	Gestion, emprise
Bande enherbée	0	0 à +	0 à ++	+ à ++	+ à ++	+ à ++	Saturation, entretien
Fossés aménagés	+	+	+	+	?	+	Entretien, Hydraulique
Reméandrage	+	+	+ à ++	+	0	+?	Investissement, Emprise
Zone humide artificielle	++	++	++	+ à ++	- à +	+ à ++	Investissement
Retenues collinaires ou de thalweg	+ à ++	+ à ++	+ à ++	+ à ++	?	+ ?	Emprise, débits
Biobac	n.a.	n.a.	n.a.	++	n.a.	n.a.	Spécificité

Zones humides artificielles

Ingénierie et optimisation pour la réduction des flux de pesticides issus de parcelles agricoles drainées



- Efficacité de la ZT = f (taux d'interception des flux drainés, temps de résidence, hydrologie)
- Rôle des courts circuits joués le réseau de drains
- Importance des processus de rétention et de dégradation (microbienne, photodégradation)

Bilans hydrologique et hydrochimique (entrée sortie) comparés entre zone boisée et zone humide artificielle



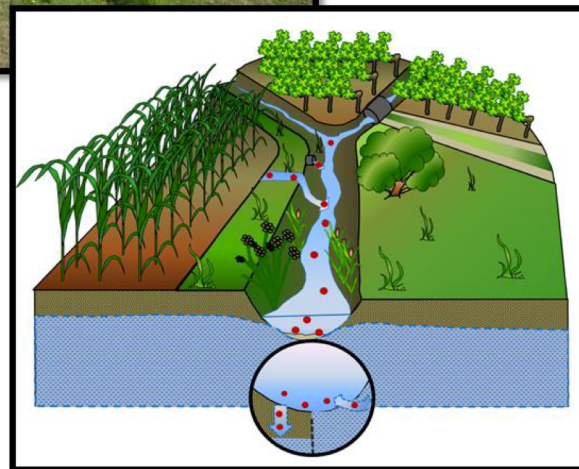
Role des fossés agricoles et de leur mode d'entretien



- Fonctionnement hydrologique et hydrochimique
- Echelle des paysages agricoles



- Sols drainés
- Erosion (MES et pesticides en ph. particulière)
- Ruissellement de surface
- Transfert hypodermique



- Zone tampon
- Zone d'échange surface – souterrain
- Ecohydrologie, habitat, diversité

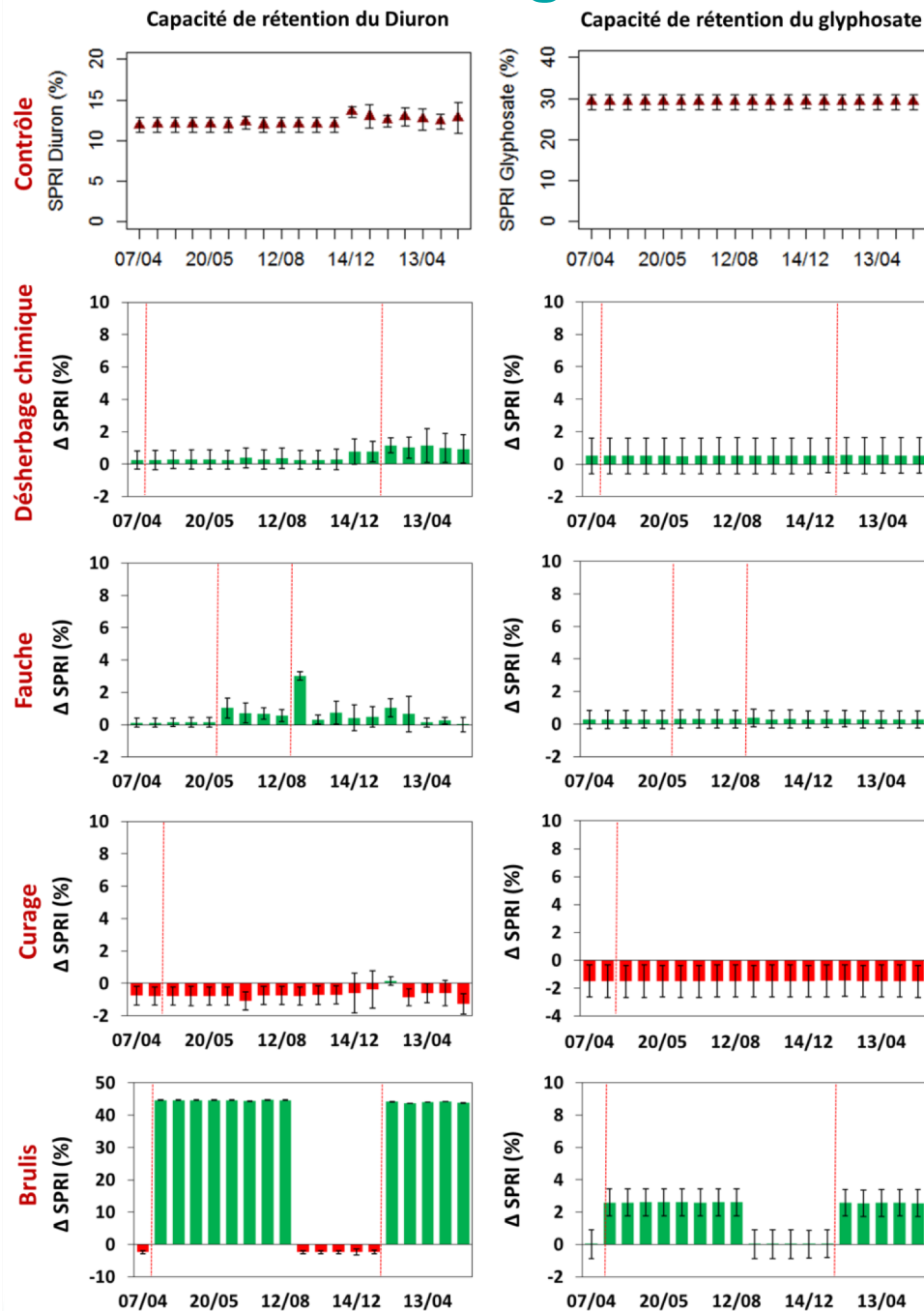


INRAE

LISAH
Laboratoire d'étude des Interactions
Sol - Agrosystème - Hydrosystème

p. 31

Role des fossés agricoles et de leur mode d'entretien



Capacité de rétention d'herbicides dans les fossés non-entretenus : Diuron 12-14%, Glyphosate ≈30%

La litière générée par le désherbage chimique augmente la rétention du diuron mais il y a un effet négatif des apports de désherbant par l'entretien

La litière générée par la fauche augmente la rétention du diuron – peu d'effet sur le glyphosate

L'élimination des matériaux de fond de fossé lors du curage diminue la capacité de rétention des herbicides

Les cendres issues du brulis augmentent fortement la capacité de rétention d'herbicides (Diuron & glyphosate)

A retenir

➤ Dimensionner, localiser, évaluer les dispositifs tampons

- La mise en place de ces dispositifs n'est pas sans coût,
- Leur efficacité est très variable, très dépendante du contexte, du positionnement dans le paysage, du design...
- Beaucoup sont multifonctionnels, mais favoriser une fonction peut se faire au détriment d'une autre : prévoir, arbitrer...
- Leur éventuelle généralisation (ou préservation!) dépend de notre capacité à prévoir, quantifier, optimiser.

Merci pour votre attention!



Références terrain en France sur des systèmes bas intrants

- ❖ Mesure des flux de pesticides vers les eaux souterraines dans des systèmes innovants de grandes cultures
- ❖ Mise en place d'un réseau de 4 sites expérimentaux de longue durée



- ❖ 14 systèmes innovants expérimentés (rotations diversifiées, cultures intermédiaires, cultures associées, mulch...)
- ❖ Séquences de cultures les plus fréquentes en France
- ❖ Séquences représentatives de différentes zones de culture



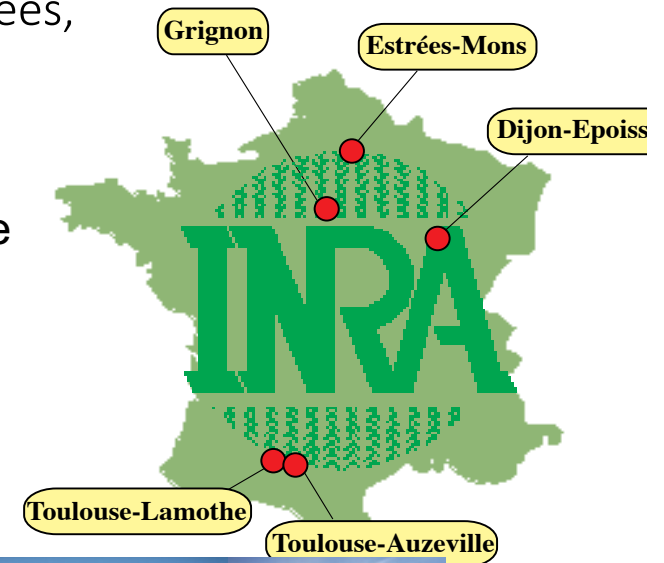
➤ Rotation colza - blé - orge



➤ Rotation tournesol - blé dur en sec



➤ Monoculture de maïs irriguée



Projets : MicMac Design (Eric Justes, INRA / ANR Systerra), SystemEco⁴ (Nicolas Munier-Jolain, INRA / ONEMA), Ecopest (Laure Mamy, INRA / ONEMA), Perform (Laure Mamy, INRA / ONEMA)

Références terrain en France sur des systèmes bas intrants

Mesure des concentrations en pesticides dans l'eau



Systèmes Colza - Blé - Orge

Systèmes Tournesol - Blé dur en sec

Systèmes Monoculture de maïs irriguée

Lysimètres à mèche
Lysimètres à plaque poreuse
Bougies poreuses
➔ 50 cm de profondeur

Lysimètres à plaque poreuse
➔ 100 cm de profondeur

Lysimètres à plaque poreuse
➔ 100 cm de profondeur



Dijon-Epoisses (© B. Nicolardot, AgroSup Dijon)



Toulouse-Lamothe (© L. Alletto, INP - El Purpan)

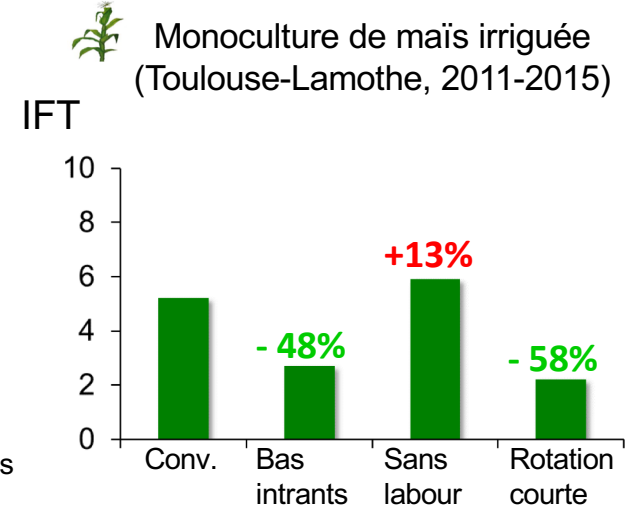
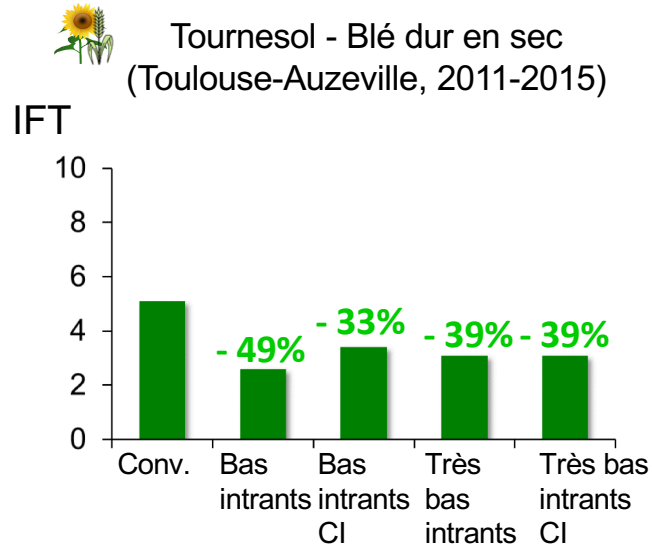
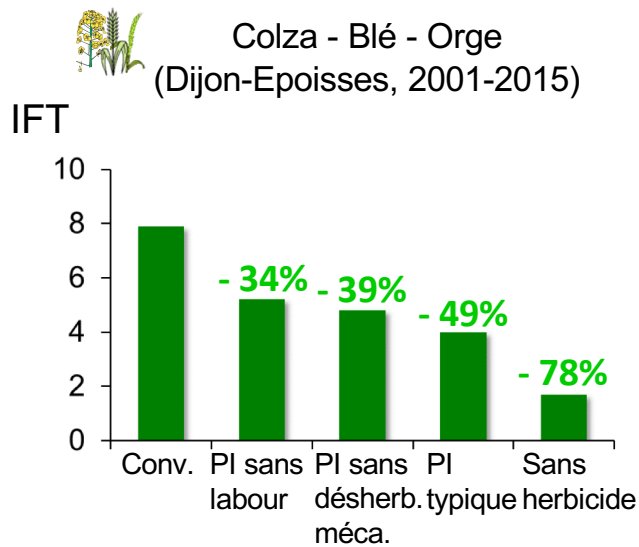
© Lionel Alletto

© Simon Giuliano

Mamy et al, 2017

Références terrain en France sur des systèmes bas intrants

IFT des systèmes étudiés



❖ Réduction maximale de l'usage des pesticides :

- Colza - Blé - Orge : Système « Sans herbicide »
- Tournesol - Blé dur en sec : « Bas intrants », mais IFT « Très bas intrants » > « Bas intrants » à cause des traitements de semences (2 cultures associées = 2 traitements)
- Monoculture de maïs irriguée : « Rotation courte »

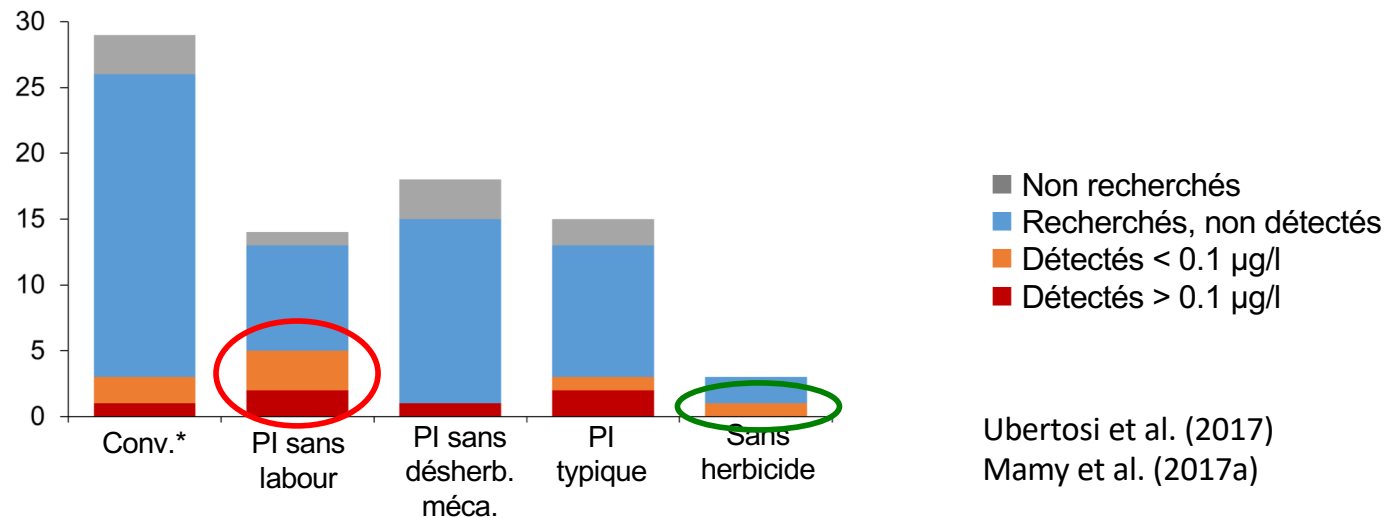
Mamy et al, 2017

Références terrain en France sur des systèmes bas intrants

Transfert des pesticides : Systèmes colza-blé-orge



Nombre de pesticides différents, recherchés et détectés (2010-2014)



- ❖ Mise en évidence de l'« effet système » sur les pertes en pesticides
- ❖ Meilleur système / réduction du transfert des pesticides dans l'eau : « Sans herbicide » (IFT min.)
- ❖ Nombreux pesticides détectés dans l'eau dans le cas du système sans labour :
 - Flux préférentiels + Multiplication des traitements herbicides

Mamy et al, 2017

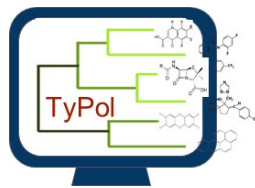
Systemes de culture et transfert de pesticides vers les eaux souterraines : bilan

- ❖ Lien entre usage des pesticides et contamination des eaux souterraines
- ❖ Systemes favorisant la **réduction des transferts de pesticides dans l'eau** :
 - Systemes sans herbicide (désherbage mécanique)
 - Systemes bas ou très bas intrants
 - Systemes impliquant des rotations (diversification des cultures et allongement des successions)
 - Systemes impliquant des cultures intermédiaires
- 😊 **Diminution de l'usage des pesticides, diminution de la pression parasitaire, modification du bilan hydrique des sols entraînant une réduction des transferts...**
- ❖ Systemes favorisant les **transferts de pesticides dans l'eau** :
 - Systemes conventionnels
 - Systemes sans labour (techniques culturales simplifiées)
- 😞 **Nombreux traitements herbicides, modification de la structure du sol favorisant les transferts des pesticides (flux préférentiels)...**
 - **Indispensable d'actionner les autres leviers (rotations, couvert)**

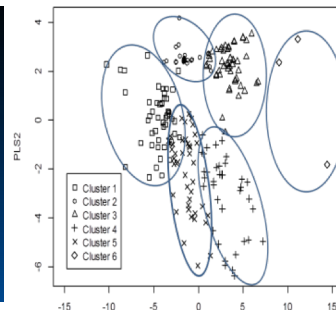
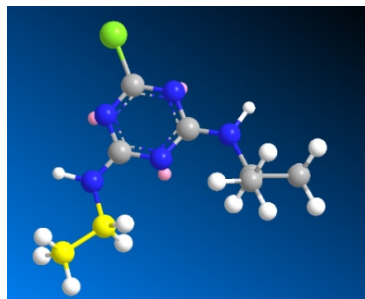


TyPol : outil de classification des contaminants organiques pour analyser (et prédire) leur écodynamique et leur (éco)toxicité

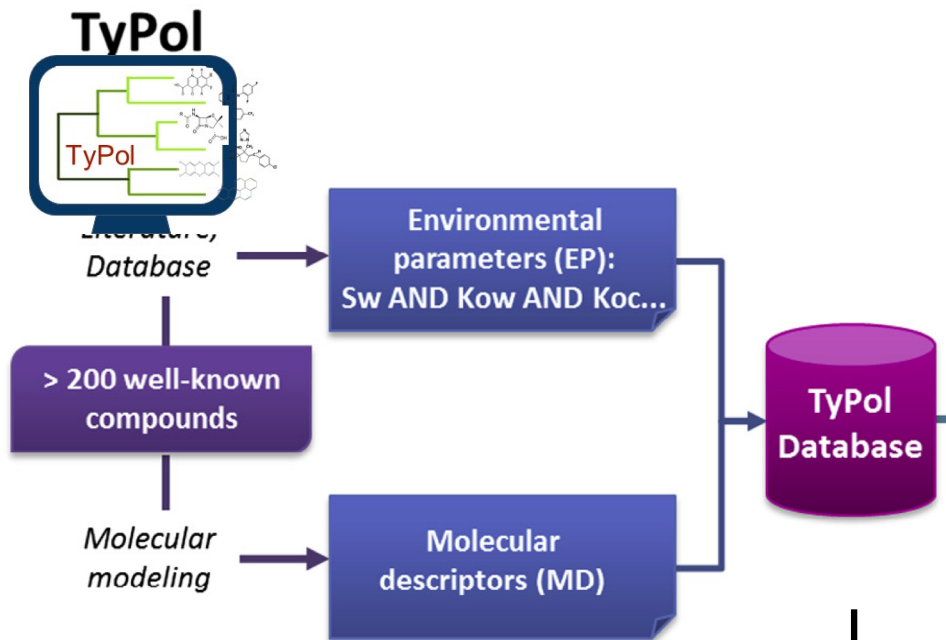
- ❑ Concevoir un outil pour sélectionner des molécules « modèles » selon des critères phénoménologiques (comportements différents) et opérationnels (intensité des risques actuels ou futurs)
- ❑ Aboutir à un outil mutualisable (BDD) qui permettra d'argumenter les choix de contaminants modèles pour réaliser des études concernant la dispersion, les effets écotoxicologiques des contaminants organiques, d'intérêt
- ❑ Tester de nouvelles molécules *in silico*, extrapolation (comportements et effets)



INRAE



TyPol : Classer les contaminants organiques pour analyser (et prédire) leur écodynamique et leur (éco)toxicité



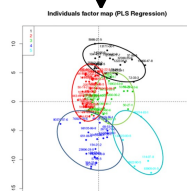
Type of descriptor	Descriptors
Constitution	Number and type of atoms and bonds Molecular Mass
Geometry	Surface
Topology	Connectivity Index
Electrostatic	Polarisability
Quantum	Dipolar Moment Orbital Energy (homo, lumo) Total Energy

➔ 40 molecular descriptors

Processus	Parameters
Volatilisation	P_{vap} , K_H
Adsorption	K_{oc}
Biodegradation	HL50
Dissolution	Sw , Kow
Toxicity	BCF, EC50, LC50, NOEC (on different organisms, daphnies, earthworm, algae)

EC50 : Concentration produisant 50% d'effet
 LC50 : Concentration létale à 50%

Statistical tools
(AHC, PLS)

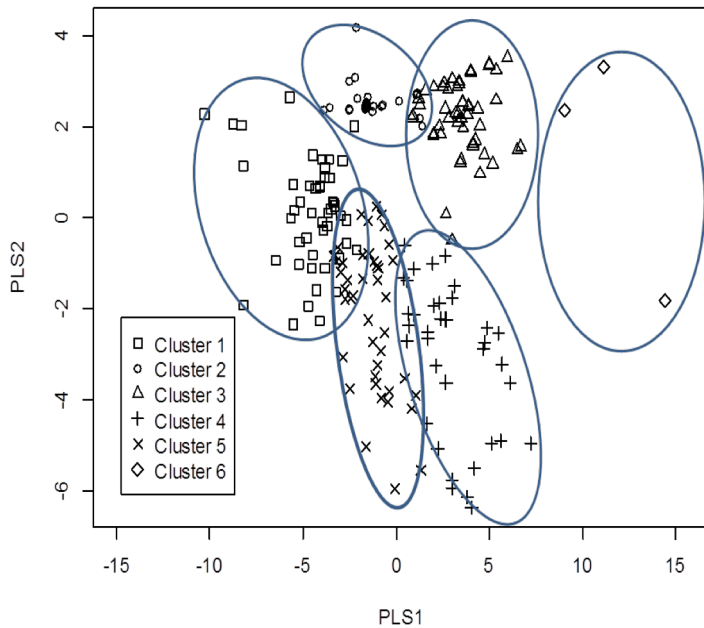


➔ 7 behavioural parameters
 ➔ 17 parameters ecotoxicity (2016)

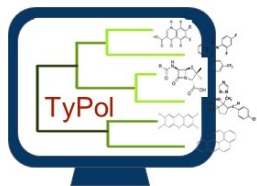


INRAE

TyPol : premiers résultats



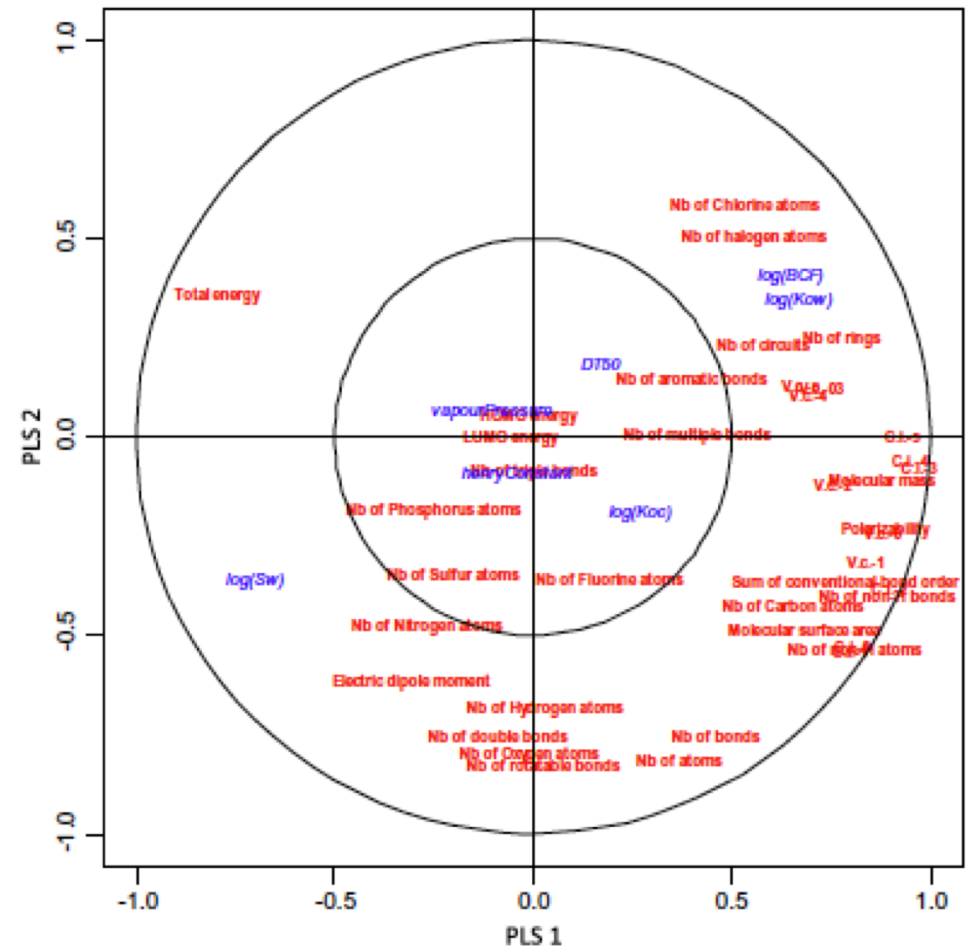
- Première composante PLS : 40% variance - poids important des descripteurs géométriques, topologiques et de constitution (nb atomes Cl)
- Seconde composante PLS : 16 % variance – nb et types de liaisons, nb total d'atomes



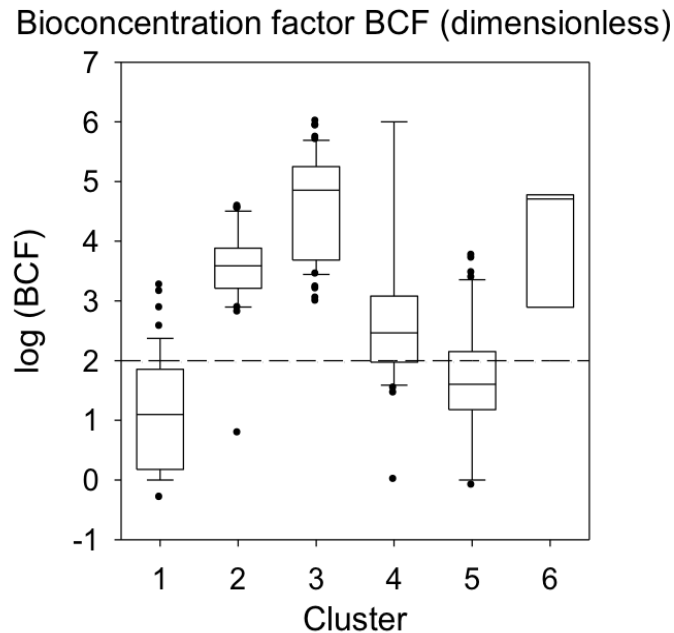
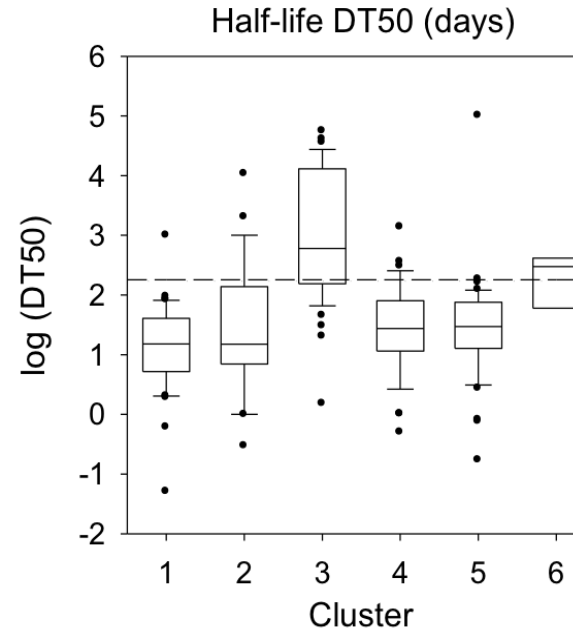
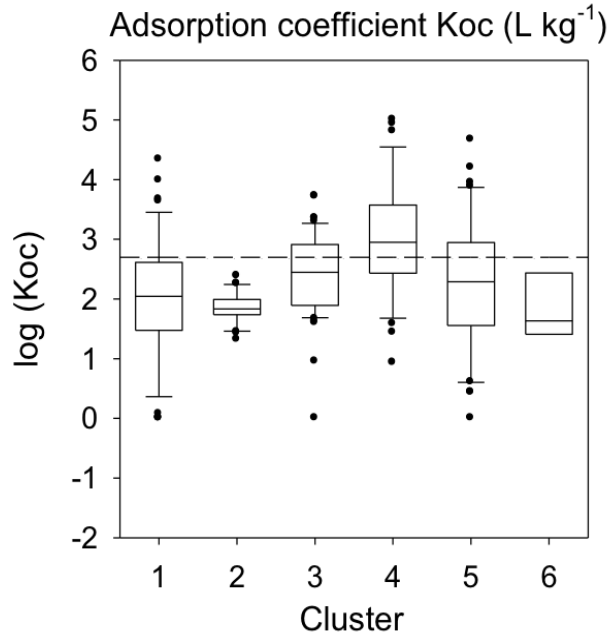
TyPol – A new methodology for organic compounds clustering based on their molecular characteristics and environmental behavior



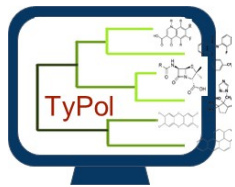
Rémi Servien^{a,b,*}, Laure Mamy^c, Ziang Li^d, Virginie Rossard^b, Eric Latrille^b, Fabienne Bessac^{e,f,g}, Dominique Patureau^b, Pierre Benoit^d



TyPol : premiers résultats



2020 : plus de 540 composés
dans la BDD TyPol



TyPol :comprendre le devenir de produits de transformation (métabolites ») – En complément d’approche « Suspect screening »

Environmental Pollution 208 (2016) 537–545



ELSEVIER

Contents lists available at ScienceDirect

Environmental Pollution

journal homepage: www.elsevier.com/locate/envpol



Short communication

Identification and characterization of tebuconazole transformatic products in soil by combining suspect screening and molecular typology

Veronika Storck ^{a,b,c}, Luigi Lucini ^{c,**}, Laure Mamy ^d, Federico Ferrari ^b, Evangelia S. Papadopoulou ^e, Sofia Nikolaki ^f, Panagiotis A. Karas ^e, Remi Servien ^g, Dimitrios G. Karpouzas ^e, Marco Trevisan ^c, Pierre Benoit ^d, Fabrice Martin-Laurent

^a INRA, Mixed Research Unit 1347 Agroecology, Dijon, France

^b Aelforia srl, Spinoff Catholic University of the Sacred Heart, Fidenza, Italy

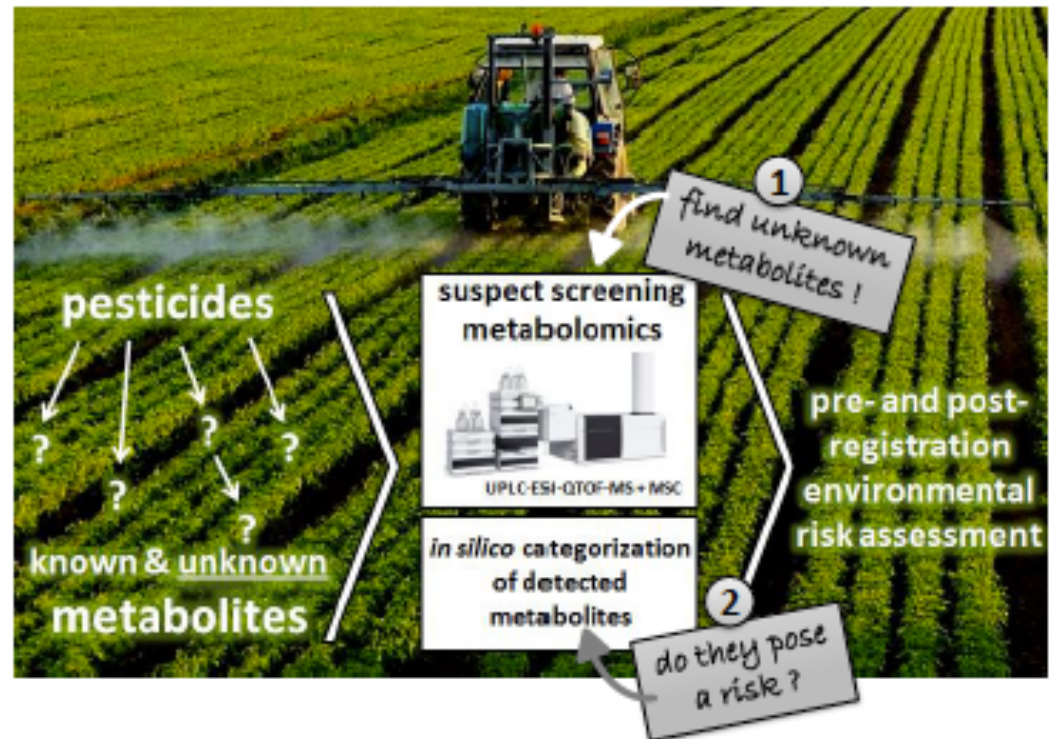
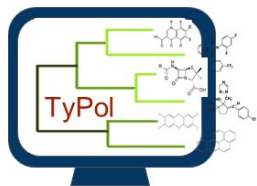
^c Catholic University of the Sacred Heart, Department of Agronomy and Environmental and Chemistry, Piacenza, Italy

^d INRA, Mixed Research Unit 1402 ECOSYS, Thiverval-Grignon, France

^e University of Thessaly, Department of Biochemistry and Biotechnology, Larissa, Greece

^f University of Patras, Department of Environmental and Natural Resources Management, Agrinio, Greece

^g INRA, Mixed Research Unit 1331 Taxalim, Toulouse, France



Storck V. et al. 2016. *Env. Pollution*, 208, 537-545.



INRAE