
Résumé

L'émission d'un polluant dans l'environnement peut causer des effets néfastes. Ces effets peuvent être causés par le polluant, mais aussi par ses produits de dégradation. Ainsi, l'impact *direct* est défini ici comme la somme des effets du polluant lui-même, alors que l'impact *total* est défini comme la somme des effets du polluant et de ses produits de transformation.

Dans la première partie de ce travail, le statut des produits de transformation dans l'évaluation des risques liés aux produits chimiques est brièvement discuté, la législation de l'Union Européenne sur les produits chimiques (Directives 67/548/EEC, 93/67/EEC, 91/414/EEC et Régulation 1488/98) étant prise comme exemple représentatif de la pratique courante. Il apparaît que les produits de transformation des pesticides sont soumis au même processus d'évaluation que leurs précurseurs. Par contre, pour les substances qui ne sont pas des pesticides, l'évaluation des produits de transformation n'est en général pas requise.

Dans la seconde partie, on démontre que les produits de transformation peuvent parfaitement être intégrés dans une évaluation basée sur la *portée*. La portée d'un polluant est une mesure de l'étendue spatiale de son impact. Ce concept a été proposé par Scheringer, Berg et Müller-Herold (38). Jusqu'ici, seule l'étendue spatiale de l'impact direct a pu être estimée, la portée correspondante ayant été nommée *portée caractéristique*. Le but de cette thèse est d'estimer

l'étendue de l'impact total. L'approche choisie est basée sur la méthode développée par Müller-Herold et Nickel pour le calcul de la portée caractéristique. Le modèle utilisé intègre la diffusion turbulente à grand échelle et les réactions chimiques de premier ordre. Le résultat obtenu est une expression analytique de la portée secondaire ϱ_{AB} , exprimée comme fonction des portées caractéristiques respectives ϱ_A et ϱ_B d'un précurseur A et de B, l'un de ses produits de transformation de première génération. L'expression exacte de la portée secondaire (voir équation 6.30) étant trop compliquée pour permettre une interprétation directe du rôle des différents paramètres impliqués, une approximation plus simple mais néanmoins précise a été développée:

$$\varrho_{AB} \cong \frac{\varrho_A + \varrho_B}{2} + \frac{\varrho_B}{2^{1+\varrho_A/\varrho_B}} + \frac{\varrho_A}{2^{1+\varrho_B/\varrho_A}}$$

La portée secondaire ϱ_{AB} est interprétée comme une mesure de l'étendue spatiale de l'impact total, à la différence de la portée caractéristique ϱ_A , qui est une mesure de l'étendue de l'impact direct.

Etonnamment, la constante de vitesse de la réaction de transformation du précurseur A en produit de transformation B, k_{AB} , n'intervient pas dans l'expression de la portée secondaire. De plus, il apparaît que, dans une paire précurseur/produit de transformation, c'est la substance ayant la plus grande portée caractéristique qui domine la portée secondaire, que ce soit le précurseur ou le produit de transformation.

$$\max\{\varrho_A, \varrho_B\} \leq \varrho_{AB} \leq 1.4843 \cdot \max\{\varrho_A, \varrho_B\}$$

En particulier, il est montré ici que l'impact total est significativement plus étendu que l'impact direct si la portée caractéristique du produit de transformation est plus grande que celle du précurseur:

$$\varrho_B > \varrho_A \quad \implies \quad \varrho_{AB} > 1.5 \cdot \varrho_A$$