

**ANNEXE A1 : CONSIGNES POUR L'ENCODAGE DU MERCURE, DES  
ISOMÈRES (XYLÈNES ET 1,2- DICHLOROÉTHÈNE) ET DES  
HYDROCARBURES PÉTROLIERS**

**Version 06**

## Table des matières

Liste des tableaux .....	2
Préambule .....	3
A1-1.Mercure.....	3
A1-2.Xylènes.....	4
A1-3.1,2-dichloroéthène .....	4
A1-4.Hydrocarbures pétroliers .....	4
A1-4.1. Concentrations représentatives pour le sol .....	6
A1-4.2. Concentrations représentatives pour l'eau souterraine .....	7
A1-5.Références.....	8

## Liste des tableaux

<b>Tableau 1.</b> Détermination des concentrations représentatives des fractions aliphatiques et aromatiques dans le sol à partir des fractions globales. ....	7
<b>Tableau 2.</b> Détermination des concentrations représentatives des fractions aliphatiques et aromatiques à partir des fractions globales dans l'eau souterraine. ....	7

## Préambule

L'**Annexe A1** présente les consignes d'encodage pour les cas particuliers que sont le mercure, les xylènes, les 1,2-dichloroéthène et les hydrocarbures pétroliers pour les différents outils préconisés par l'administration dans le cadre de la réalisation des études de risques. Les indications ci-après concernent l'ensemble des outils mis à disposition, sauf lorsque qu'un outil particulier est précisé.

### A1-1. Mercure

Le mercure étant présent sous plusieurs formes dans l'environnement, les outils proposés tiennent compte des formes les plus courantes.

Trois formes coexistent généralement dans les sols : le mercure métallique, le mercure inorganique et le mercure organique. La forme **inorganique** (en général HgS) est la plus fréquente. Le mercure **organique** est essentiellement présent sous forme méthylique (mono- et diméthylmercure) (Coulibaly & al, 2016). Plusieurs auteurs rapportent que la proportion de méthylmercure par rapport au mercure total n'excède jamais 5% (Leveque & Bonnard, 1998). Le mercure **métallique** (mercure élémentaire) est généralement minoritaire par rapport aux autres formes présentes. **En cas de sols pollués spécifiquement par du mercure métallique ou du mercure organique, ces proportions hypothétiques ne peuvent s'appliquer.**

La valeur seuil pour la santé humaine ( $VS_H$ ) du mercure a été élaborée partant de l'hypothèse suivante sur la distribution des différentes formes de mercure et en supposant l'additivité des doses relatives à ces différentes formes :

- mercure inorganique : 95 % (représenté par la chlorure mercurique  $HgCl_2$  (CAS n° 7484-94-7), nommé « Mercury (Mercuric chloride) » dans S-Risk®) ;
- mono-méthylmercure  $HgCH_3$  : 5 % (modélisé sur base des propriétés du méthylmercure (CAS n°22967-92-6), nommé « Mercury (Methyl mercury) » dans S-Risk®).

Dans le cadre de l'**outil ESR.xlsm** :

- **dans le sol** : les concentrations représentatives en mercure total seront comparées aux valeurs limites ( $VS_H$ ) du mercure. L'expert doit cependant vérifier l'applicabilité des hypothèses précédentes<sup>1</sup> ;
- **dans l'eau souterraine** : les concentrations représentatives seront comparées à la valeur  $VS_{nappe}$  en mercure total telle que figurant à l'Annexe 1 du décret sols pour les eaux souterraines afin de prévenir les risques associés à l'usage de l'eau souterraine notamment à des fins de production alimentaire.

---

<sup>1</sup> Dans le cas où les sols auraient été pollués spécifiquement par du mercure métallique ou du diméthylmercure (non considérés dans l'élaboration des valeurs limites), il est préconisé de reporter l'évaluation à l'étape de l'EDR-SH.

Dans le cadre de l'outil **S-Risk®**, le programme impose d'entrer les concentrations représentatives de chacune des formes de mercure alors que le résultat d'analyse ne fournit que le mercure total. La partition 95-5% présentée ci-avant est à utiliser **cf. Annexe B1 (GRER Partie B) point 2.5.2. pour le choix du paramètre adéquat à utiliser dans l'outil S-Risk®.**

## A1-2. Xylènes

Dans l'outil **ESR.xlsm**, il convient d'encoder la somme des isomères (ortho-, méta- et para- xylènes) dans la ligne prévue à cet effet. Attention au fait que cette somme n'est pas calculée automatiquement lorsque seuls les isomères sont encodés.

Dans le cadre de l'outil **S-Risk®**, le programme impose d'entrer les concentrations représentatives de chacune des formes de xylène.

## A1-3. 1,2-dichloroéthène

Dans **les outils ESR.xlsm et BIOCHLOR**, il convient d'encoder la somme des isomères (cis- et trans-1,2-dichloroéthène) dans la ligne prévue à cet effet. Attention au fait que cette somme n'est pas calculée automatiquement lorsque seuls les isomères sont encodés.

Dans le cadre de l'outil **S-Risk®**, le programme impose d'entrer les concentrations représentatives de chacune des formes de 1,2-dichloroéthène.

## A1-4. Hydrocarbures pétroliers

Dans le cas particulier des hydrocarbures pétroliers constitués d'un mélange de polluants aux propriétés physico-chimiques et toxicologiques distinctes, une approche par fractions – exprimées en équivalent carbone (EC)<sup>2</sup> – a été retenue plutôt qu'une approche directe des mélanges ou par recours à des composés indicateurs comme expliqué dans l'encadré ci-dessous.

---

<sup>2</sup> Le nombre d'équivalent carbone (EC) d'un composé organique donné fournit le nombre d'atomes de carbone d'un n-alcane hypothétique qui aurait le même point d'ébullition et le même temps de rétention dans une colonne chromatographique que celui dudit composé organique.

Sélection des fractions aliphatiques et aromatiques constituant les fractions globales en équivalent carbone

- Les fractions aliphatiques et aromatiques considérées sont globalement celles définies par le Total Petroleum Hydrocarbon Criteria Working Group<sup>3</sup> (TPHCWG) (1997, 1999). Le TPHCWG justifie l'utilisation d'une approche par fractions, plutôt qu'une approche directe des mélanges ou par recours à des composés indicateurs, d'une part, parce que les données concernant la toxicité de certains produits (diesel, carburant brut, etc.) sont manquantes et, d'autre part, parce qu'une fois libéré dans l'environnement, le produit se sépare en fractions compte tenu de leurs caractéristiques intrinsèques.
- Sur base de 260 composés chimiques (11 séries homologues), 13 fractions aromatiques et aliphatiques - exprimées en équivalent carbone EC - sont définies sur base d'une comparaison de leurs propriétés physico-chimiques et de leurs degrés de similitude en termes de mobilité :



Fractions en EC	
aliphatiques	aromatiques
EC <sub>5-6</sub>	<b>EC<sub>6-7</sub></b> (comprend uniquement le benzène : EC = 6.5)
EC <sub>&gt;6-8</sub>	<b>EC<sub>&gt;7-8</sub></b> (comprend uniquement le toluène : EC = 7.6)
EC <sub>&gt;8-10</sub>	<b>EC<sub>&gt;8-10</sub></b> (inclut l'éthylbenzène et les xylènes)
EC <sub>&gt;10-12</sub>	EC <sub>&gt;10-12</sub>
EC <sub>&gt;12-16</sub>	EC <sub>&gt;12-16</sub>
EC <sub>&gt;16-21</sub>	EC <sub>&gt;16-21</sub>
	EC <sub>&gt;21-35</sub>

- Aux fractions initialement considérées par le TPHCWG, une fraction aliphatique supplémentaire a été ajoutée (fraction EC<sub>>21-35</sub> aliphatique).

<sup>3</sup> Les travaux du TPHCWG ont également été retenus dans la Directive BOFAS relative à l'assainissement des sols des stations service en Belgique qui précise notamment « ... que l'expert en assainissement du sol doit toujours envisager d'utiliser la méthode de fractionnement telle qu'elle a été développée par le TPHCWG pour la détermination des risques humains potentiels pour les « huiles minérales (HM) ».

Les méthodes d'analyse des hydrocarbures pétroliers dans les échantillons de sol et d'eau souterraine sont décrites dans le CWEA et énoncées comme « indice hydrocarbures » C<sub>5</sub>-C<sub>11</sub> et C<sub>10</sub>-C<sub>40</sub>.

Ces méthodes visent en première intention à exprimer les résultats en regard des normes sur base des fractions **EC globales**. Au total, six fractions globales sont définies (fractions EC<sub>5-8</sub>, EC<sub>>8-10</sub>, EC<sub>>10-12</sub>, EC<sub>>12-16</sub>, EC<sub>>16-21</sub> et EC<sub>>21-35</sub>), ce sont ces fractions qui sont normées.

Ces **fractions globales** ont l'avantage d'être simples et faciles d'utilisation mais elles présentent le désavantage d'être généralistes et de reposer sur une hypothèse d'une répartition 70% aliphatiques – 30% aromatiques (alors que la toxicité et mobilité des composés hydrocarbonés sont évaluées sur chaque fraction spécifique).

L'étude de risques (ER pour le volet santé humaine et le volet nappe), doit être réalisée sur les fractions aliphatiques et aromatiques distinctes et non plus sur les fractions globales. **Dès lors, le split aromatiques/aliphatiques doit être appliqué dès l'étude simplifiée des risques, dans l'outil ESR.xlsm.** Cela ne s'applique toutefois pas pour le volet écosystèmes.

La détermination des fractions splittées aromatiques/aliphatiques peut être réalisée soit par analyse, en suivant la méthode CWEA, soit en utilisant un split théorique considérant que chaque fraction globale est composée de 30% d'aromatiques et de 70 % d'aliphatiques.

Le **split analytique** aromatique/aliphatique, plus représentatif, est **recommandé** mais non imposé.

Le **split théorique** ne peut s'appliquer que sous certaines conditions :

- il doit s'agir effectivement d'hydrocarbures pétroliers et,
- les BTEX doivent avoir été quantifiés.

L'application du split théorique pour fixer les concentrations représentatives des fractions d'hydrocarbures pétroliers est à réaliser selon lignes directrices décrites ci-dessous.

#### **A1-4.1. Concentrations représentatives pour le sol**

Ce sont les concentrations représentatives du benzène et du toluène qui sont à considérer pour évaluer les risques relatifs aux fractions EC<sub>6-7</sub> et EC<sub>7-8</sub> aromatiques. Il n'y a donc pas d'ER à réaliser pour ces deux fractions quand les concentrations représentatives en benzène et toluène sont connues.

Les concentrations représentatives EC<sub>5-6</sub> et EC<sub>6-8</sub> aliphatiques sont déterminées en considérant la concentration résultant de la concentration de la fraction globale EC<sub>5-8</sub> à laquelle est soustraite la somme des concentrations représentatives en benzène et en toluène.

Pour la fraction EC<sub>8-10</sub>, le split 30/70 est applicable, tenant compte du fait que l'éthylbenzène et les xylènes sont spécifiquement quantifiés et intégrés à l'étude de risques.

**Tableau 1.** Détermination des concentrations représentatives des fractions aliphatiques et aromatiques dans le sol à partir des fractions globales.

Fractions EC globales Sol	Aliphatiques (ALI)	Aromatiques (AROM)
EC <sub>5-8</sub>	EC <sub>5-6</sub> ALI = 100% EC <sub>5-8</sub> – (B+T)	EC <sub>6-7</sub> AROM = non pertinent
	EC <sub>6-8</sub> ALI = 100% EC <sub>5-8</sub> – (B+T)	EC <sub>7-8</sub> AROM = non pertinent
EC <sub>8-10</sub>	EC <sub>8-10</sub> ALI = 70% EC <sub>8-10</sub>	EC <sub>8-10</sub> AROM = 30% EC <sub>8-10</sub>
Pour les fractions EC <sub>10-40</sub>	EC <sub>x-y</sub> ALI = 70% EC <sub>x-y</sub>	EC <sub>x-y</sub> AROM = 30% EC <sub>x-y</sub>


### A1-4.2. Concentrations représentatives pour l'eau souterraine

Comme pour le sol, les fractions EC<sub>6-7</sub> et EC<sub>7-8</sub> aromatiques ne sont pas prises en compte car elles correspondent, respectivement, à celles du benzène et du toluène analysés.

Pour les EC<sub>8-10</sub> aromatiques, il y a lieu de prendre en compte le caractère plus soluble des aromatiques par rapport aux aliphatiques. Il est donc recommandé de considérer que les EC<sub>8-10</sub> aromatiques équivalent à 100% de la fraction globale.

**Tableau 2.** Détermination des concentrations représentatives des fractions aliphatiques et aromatiques à partir des fractions globales dans l'eau souterraine.

Fractions EC globales eaux souterraines	Aliphatiques (ALI)	Aromatiques (AROM)
EC <sub>5-8</sub>	EC <sub>5-6</sub> ALI = 100% EC <sub>5-8</sub> – (B+T)	EC <sub>6-7</sub> AROM = non pertinent
	EC <sub>6-8</sub> ALI = 100% EC <sub>5-8</sub> – (B+T)	EC <sub>7-8</sub> AROM = non pertinent
EC <sub>8-10</sub>	EC <sub>8-10</sub> ALI = 100% EC <sub>8-10</sub> – (E+X)	EC <sub>8-10</sub> AROM = 100% EC <sub>8-10</sub>
Pour les fractions EC <sub>10-40</sub>	EC <sub>x-y</sub> ALI = 70% EC <sub>x-y</sub>	EC <sub>x-y</sub> AROM = 30% EC <sub>x-y</sub>

	<p>Hydrocarbures pétroliers et autres types de produits</p> <p>Des polluants autres que les hydrocarbures pétroliers peuvent être observés et quantifiés.</p> <p>Si un composé autre que ceux de type « hydrocarbures pétroliers » est suspecté ou si un composé spécifique est quantifié, il est recommandé de cibler ce composé spécifique pour établir sa concentration représentative (par exemple un impact en phtalate ou un impact en naphthalène).</p>
---	--

	<p>Il y a lieu également de faire attention :</p> <ul style="list-style-type: none"><li>- à la présence de composés spécifiques tels que MTBE / alcools / solvants chlorés / ... qui peuvent influencer le résultat analytique des fractions légères ;</li><li>- à la plus faible solubilité des fractions aliphatiques, pouvant donner lieu à une surestimation du risque pour la santé humaine par volatilisation si la concentration encodée dans le logiciel de modélisation est supérieure à la solubilité. Dans ce cas, il y a lieu de considérer que ce qui dépasse la solubilité en aliphatique est de la fraction aromatique. Des compléments d'informations concernant la solubilité sont fournis dans le GRER Partie B.</li></ul>
--	--

## A1-5. Références

Coulibaly M., Bamba D., Yao N.A., Zoro E.G. & El Rhazi M. (2016). Some aspects of speciation and reactivity of mercury in various matrices. *Comptes Rendus Chimie*, 19. pp. 832-840.

Leveque S. & Bonnard R. (1998). Définition des valeurs de constat d'impact pour le mercure – Document de travail – Groupe Sites et sols pollués : santé publique, 44 p.

TPHCWG. (1997). Volume 3. Selection of Representative TPH Fractions Based on Fate and Transport Considerations. Amherst, MA, Amherst Scientific Publishers. Total Petroleum Hydrocarbon Criteria Working Group Series. pp. 102.

TPHCWG (1997). Volume 4. Development of fraction specific reference doses (RfDs) and reference concentrations (RfCs) for total petroleum hydrocarbons. Amherst, MA, Amherst Scientific Publishers. Total Petroleum Hydrocarbon Criteria Working Group Series. pp.137.

TPHCWG (1999). Volume 5. Human Health Risk-Based Evaluation of Petroleum Release Sites: Implementing the Working Group Approach. Amherst, MA, Amherst Scientific Publishers. Total Petroleum Hydrocarbon Criteria Working Group Series. 98p.

De Baets H. (2007). Karakterisering van minerale olie. 45p. Juillet 2007

ISSeP (2016). Méthodes de datations des pollutions environnementales aux hydrocarbures – Synthèse bibliographique. Rapport ISSeP n°03413/2016. 6p.