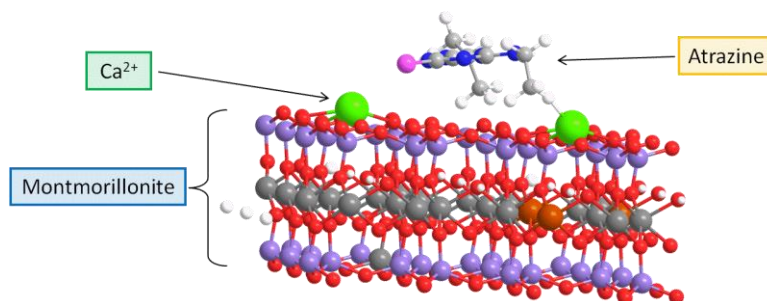


Simulations à l'échelle atomique pour l'étude de l'interaction de pesticides avec la matière minérale du sol

Fabienne Bessac^{a,b,c}, Magali Benoit^d, Nathalie Tarrat^d, Bastien Belzunces^{b,c}, Sophie Hoyau^{b,c}

^aUniversité de Toulouse ; INPT ; Ecole d'Ingénieurs de Purpan ; Equipe DINA (Dynamique des INtrants dans les Agroécosystèmes) ; 75, voie du TOEC, BP 57611, F-31076 Toulouse Cedex 03, France ; ^bUniversité de Toulouse ; UPS ; IRSAMC ; Laboratoire de Chimie et Physique Quantiques ; 118, route de Narbonne ; F-31062 Toulouse, France ; ^cCNRS (UMR 5626) ; F-31062 Toulouse, France ; ^dCEMES - Centre d'Elaboration de Matériaux et d'Etudes Structurales - CNRS (UPR 8011) Groupe MC2, 29 rue Jeanne Marvig ; F-31055 Toulouse, France ; e-mail: fabienne.bessac@purpan.fr



Quand un pesticide est appliqué au champ, une fraction plus ou moins grande atteint le sol en fonction de plusieurs facteurs. Ces facteurs sont soit inhérents au produit : sa fonction et son mode d'application (herbicides, fongicides, fertilisants...), ses propriétés physico-chimiques (volatilité, solubilité...) ; soit indépendant comme les conditions météorologiques lors de l'application. Les substances qui atteignent le sol rencontrent les quatre composants essentiels du sol : sa partie minérale (ou inorganique), la solution du sol (eau, macromolécules organiques solubles et ions), la fraction organique (macromolécules insolubles et bactéries) et sa partie gazeuse (essentiellement de l'air). Les proportions relatives de ces quatre composants varient avec le type de sol et les conditions climatiques.

Nous avons, tout d'abord, étudié l'atrazine, un herbicide chimique comportant un groupement triazine. Cet herbicide a été modélisé en interaction avec des cations échangeables du sol Na^+ et Ca^{2+} à l'aide de la DFT (fonctionnelle B3LYP), la théorie des perturbations Moller-Plesset (MP2), la méthode Coupled Cluster (CCSD(T)) et les Interactions de Configurations (CISD) en orbitales localisées.

Dans une deuxième partie, nous avons commencé à modéliser la partie minérale du sol par une surface d'argile. L'argile sélectionnée est une montmorillonite, une famille d'argiles gonflantes. En agriculture, ses caractéristiques sont appréciées car elles limitent l'irrigation artificielle en augmentant les réserves d'eau libres d'un sol cultivé.

Une montmorillonite est constituée de feuillets eux-mêmes formés de trois couches : une couche d'octaèdres entre deux couches de tétraèdres formés par les atomes d'oxygène. Un tiers des positions octaédriques est occupé par un ion Al^{3+} , les autres sont vides. Les positions tétraédriques sont toutes occupées par un cation Si^{4+} . Naturellement, des substitutions sont possibles dans chaque couche : Al^{3+} peut être substitué par Mg^{2+} et Si^{4+} par Al^{3+} . Les substitutions sont plus nombreuses dans la couche d'octaèdres. Le déficit de charge résultant de ces substitutions est compensé par l'ajout de cations dans l'espace inter-feuillets. Nous avons construit la montmorillonite à partir de la pyrophyllite en considérant seulement les substitutions majoritaires (couche octaédrique). Ainsi, nous avons étudié l'interaction de l'atrazine avec la surface de montmorillonite en présence de cations Ca^{2+} . Pour décrire correctement la surface, des calculs de DFT périodique en ondes planes ont été effectués.

[1] F. Bessac, S. Hoyau, Computational and Theoretical Chemistry **1022** (2013) 6.

[2] P. Clausen, W. Andreoni, A. Curioni, E. Hughes, C. J. G. Plummer, J. Phys. Chem. C **113** (2009) 12293.

[3] F. Bessac, S. Hoyau, Computational and Theoretical Chemistry **966** (2011) 284.

[4] N. Ben Amor, F. Bessac, S. Hoyau, D. Maynaud, J. Chem. Phys. **135** (2011) 014101.