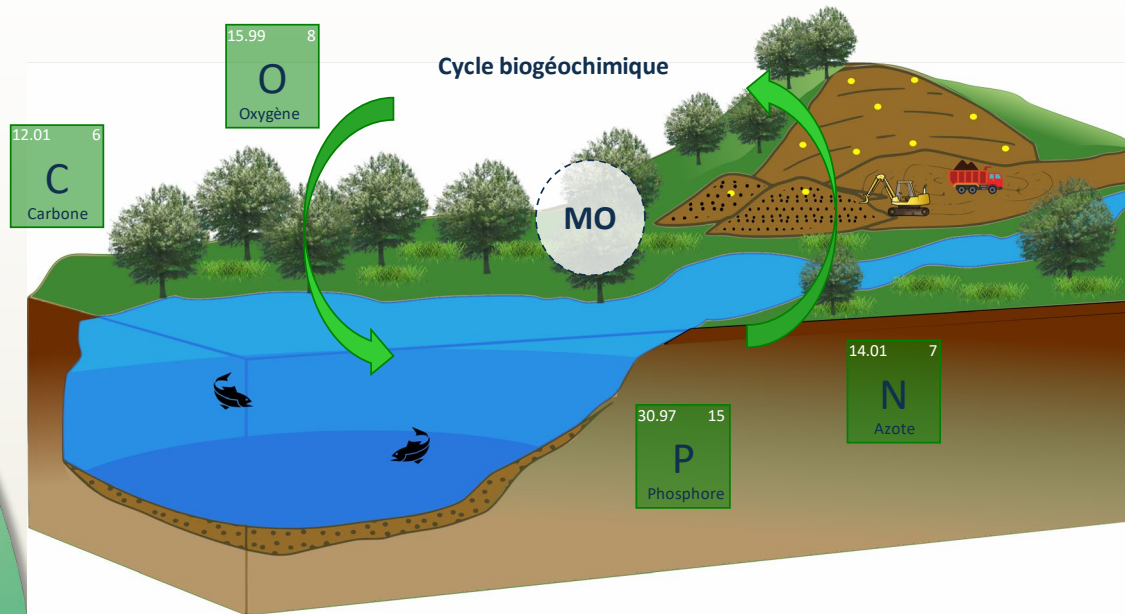


# Caractérisation des groupements fonctionnels de la matière organique complexant les métaux par spectroscopie d'absorption et de fluorescence

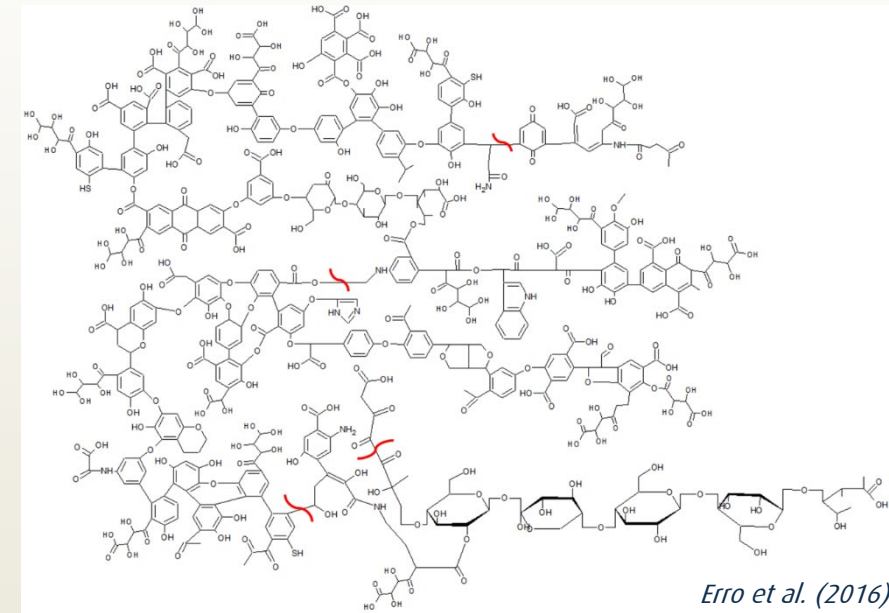
*Rémi Marsac et Charlotte Catrouillet*

*Institut de physique du globe de Paris*

# La MO au cœur du cycle biogéochimique de éléments

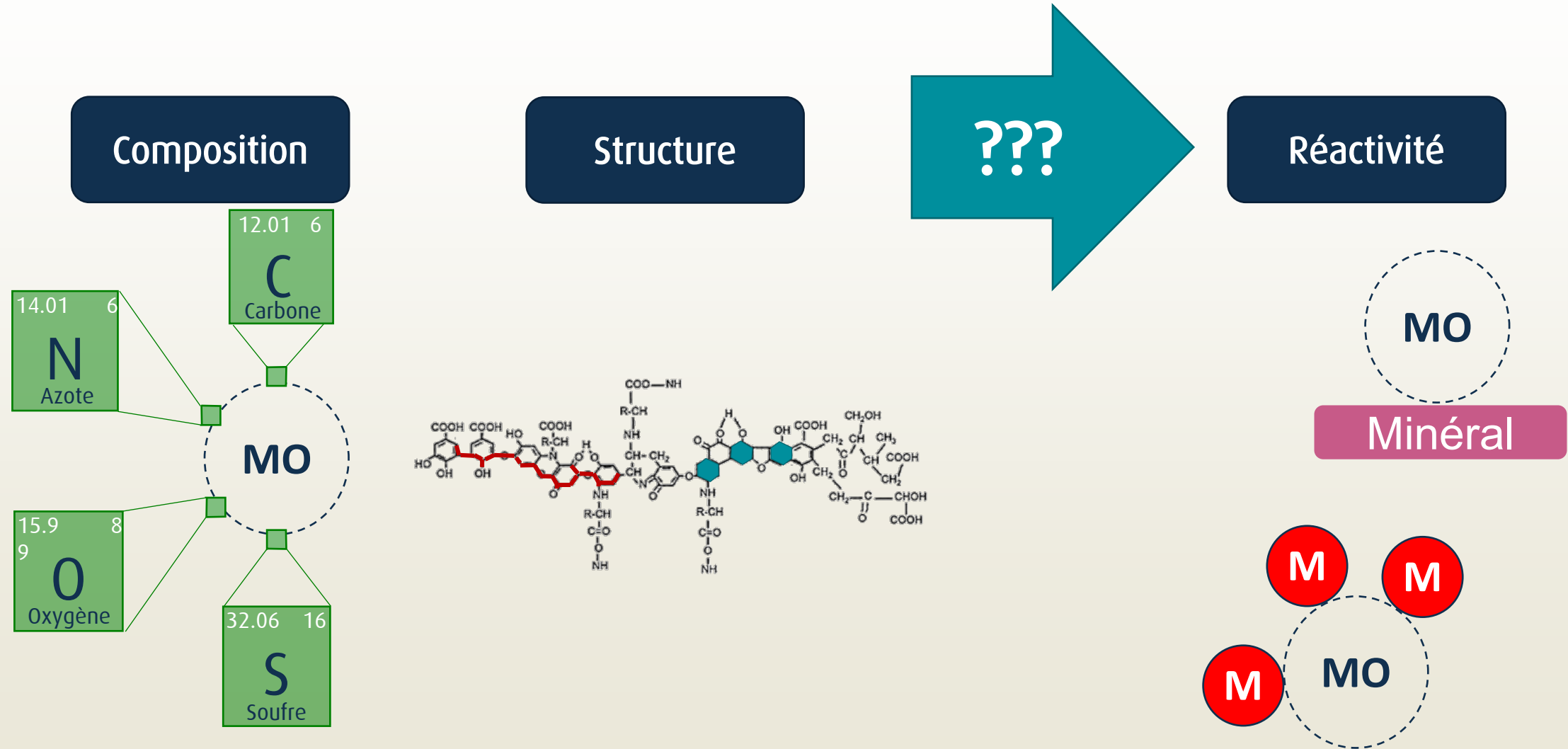


- Spéciation et transport des contaminants  
Ex: Cd, Pb, Cu, U...

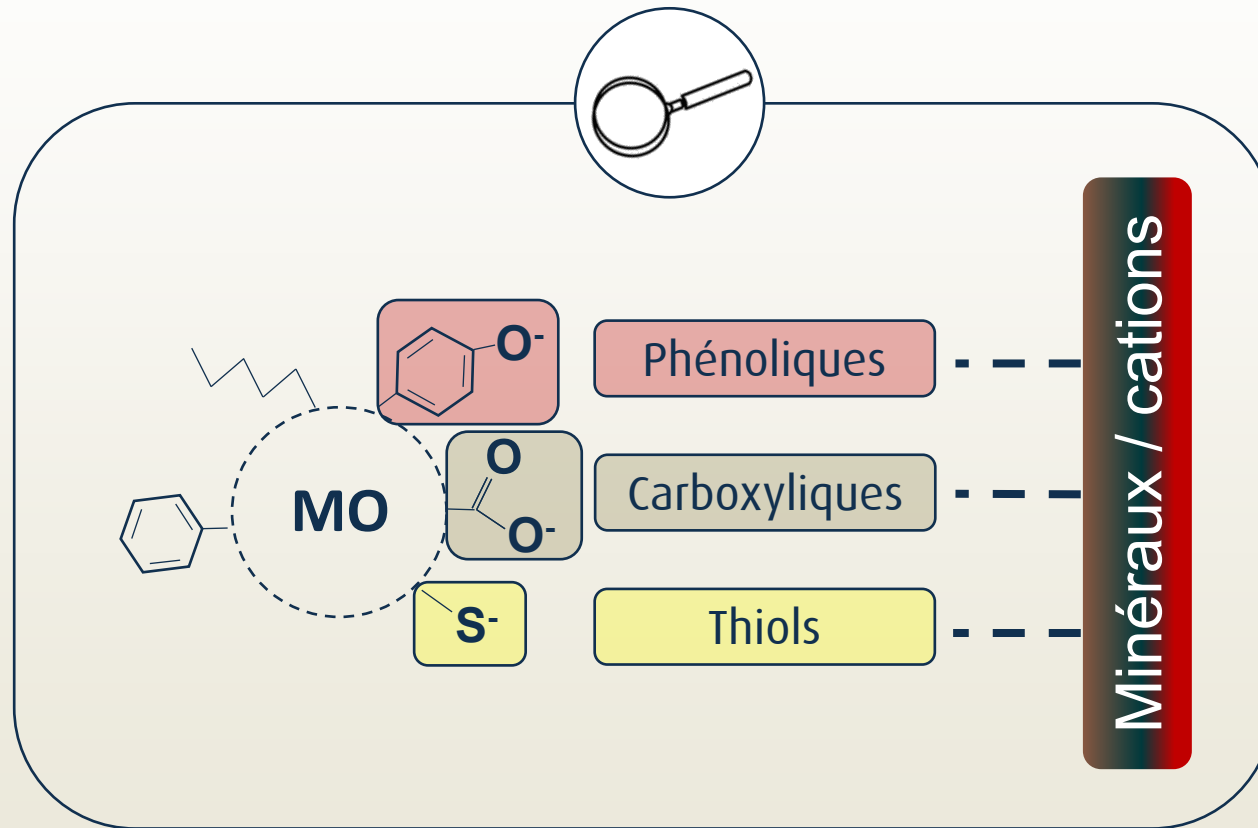


- Très hétérogène, caractérisation extrêmement difficile;
- Taille, composition et réactivité dépendent de l'origine.

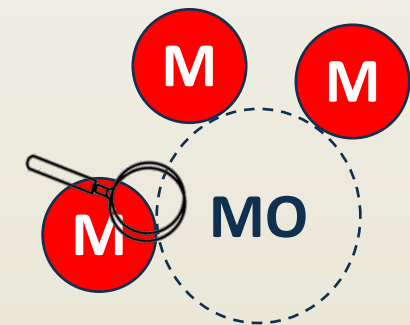
# Une multitude de techniques de caractérisation



# Groupements fonctionnels réagissant avec les métaux



Réactivité



# Objectifs

Mieux comprendre et prédire le comportement et le devenir des contaminants métalliques

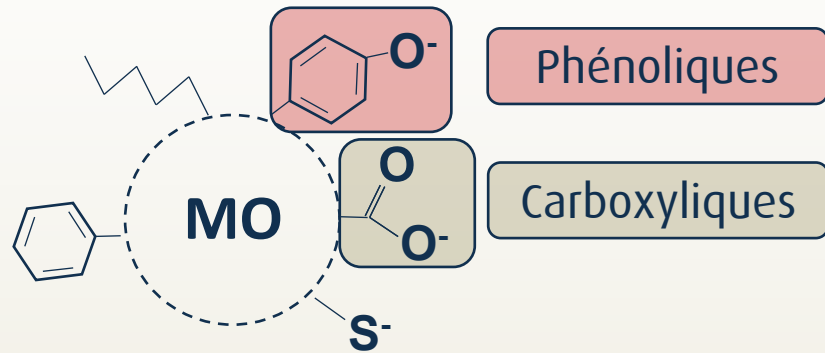
→ Nécessite une meilleure caractérisation et quantification des groupements réactifs de la MO



Développer de nouveaux protocoles pour doser les groupements  $\text{-COO}^-$ ,  $\text{-PhO}^-$  et  $\text{-S}^-$  de la MO dans des échantillons de terrain

# Plan

## 1) Dosage des groupements $-COO^-$ et $-PhO^-$

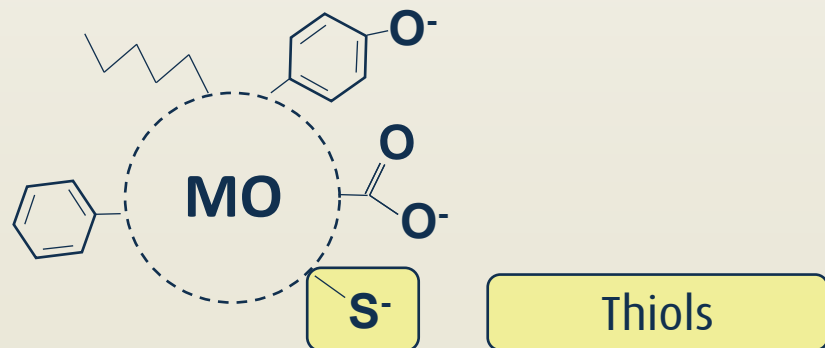


JCJC C-FACTOR  
(2018-2022)



DOMMINO  
(2022-2024)

## 2) Dosage des groupements $-S^-$



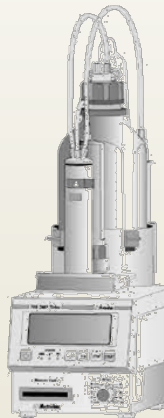
JCJC Me-Thiols  
(2026-2029)

# Dosage $\text{-COO}^-$ et $\text{-PhO}^-$

- $[\text{COOH}] + [\text{PhOH}] \approx \text{mmol gC}^{-1}$
- Principaux groupements complexant les métaux



Potentiométrie



**X**

$[\text{MO}] \sim 500 \text{ mg L}^{-1}$

Spectrophotométrie  
UV-vis

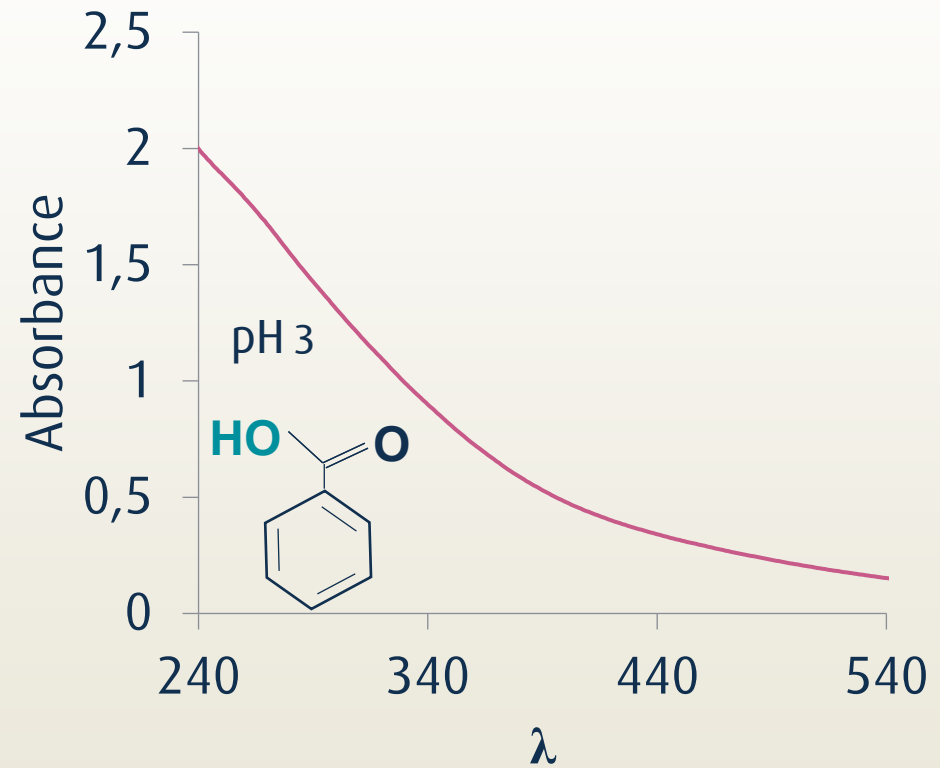
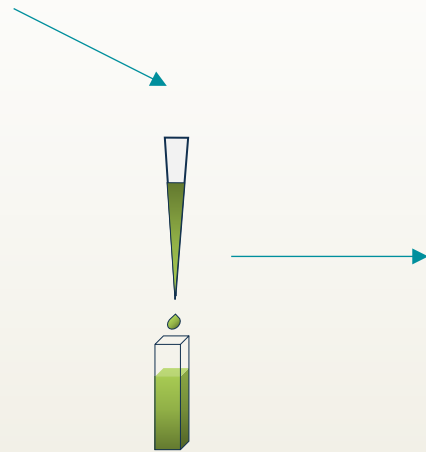
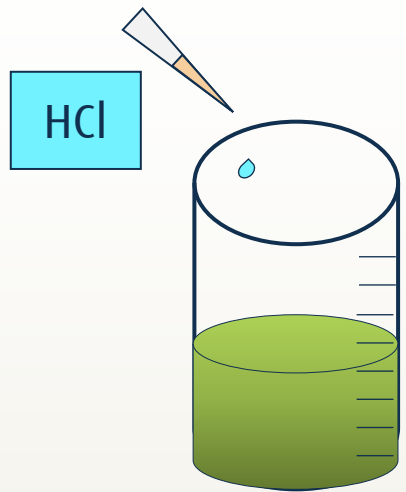


**✓**

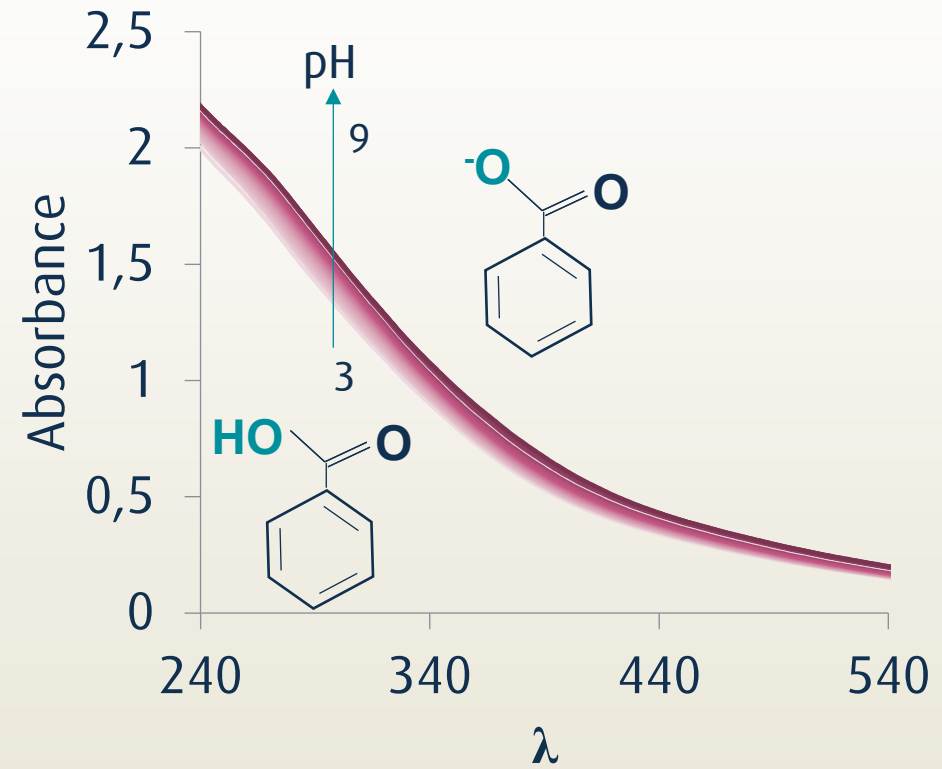
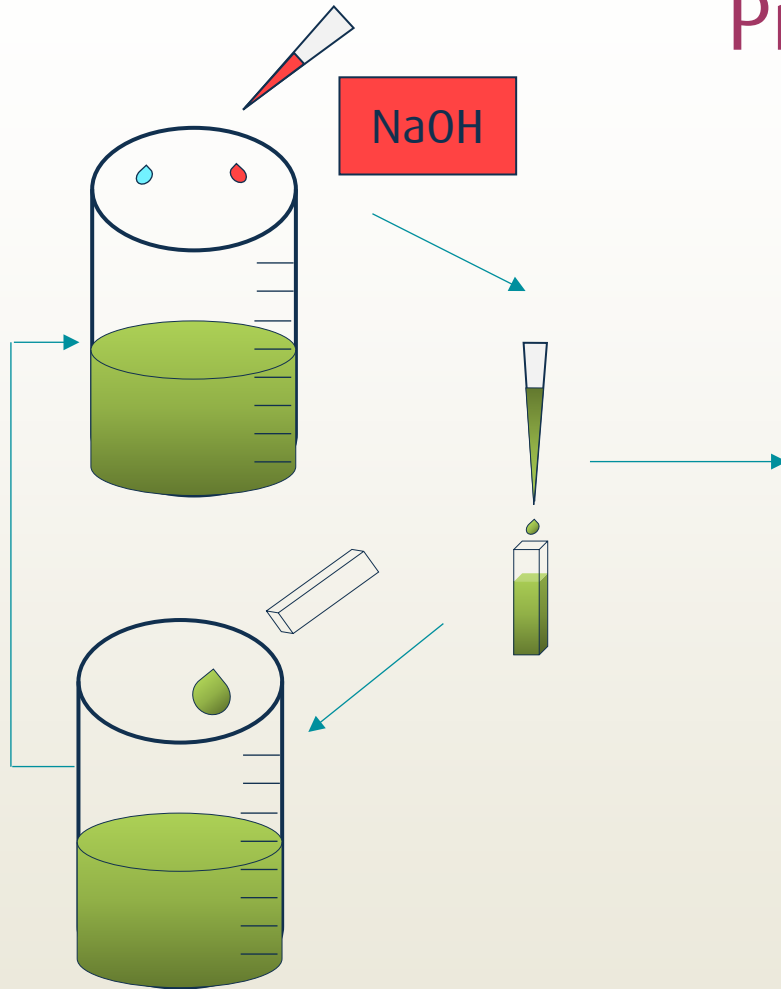
*Janot et al. (2010)*

$[\text{MO}] \sim 1 \text{ mg L}^{-1}$

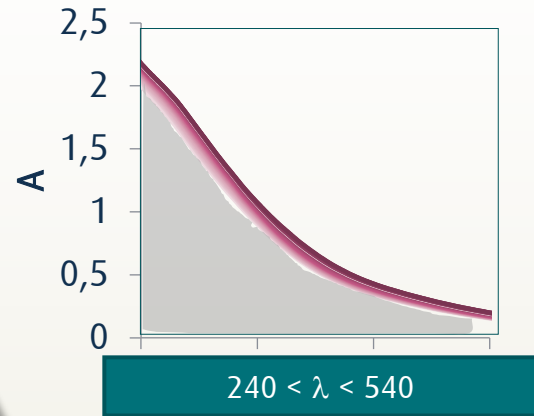
# Dosage $\text{-COO}^-$ et $\text{-PhO}^-$ Principe



# Dosage $\text{-COO}^-$ et $\text{-PhO}^-$ Principe

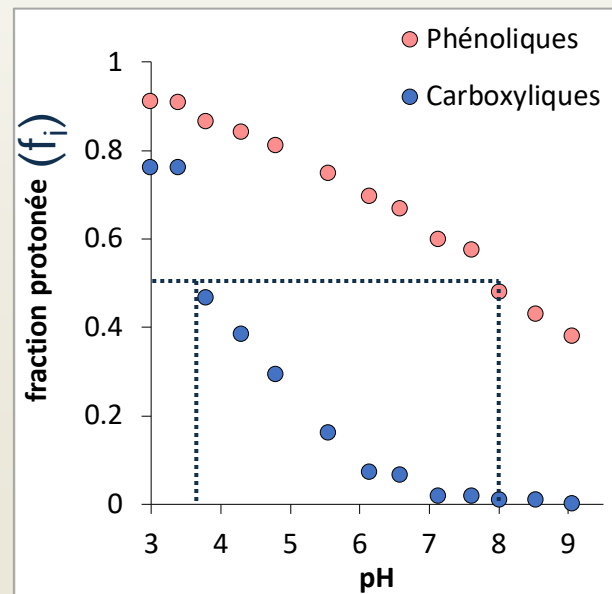


# Dosage $-COO^-$ et $-PhO^-$ Détermination des constantes d'acidité (pKa)



$$A_{(\lambda,pH)} = A_0(\lambda) + f_1(pH) * A_1(\lambda) + f_2(pH) * A_2(\lambda)$$

Aromatiques      Carboxyliques      Phénoliques

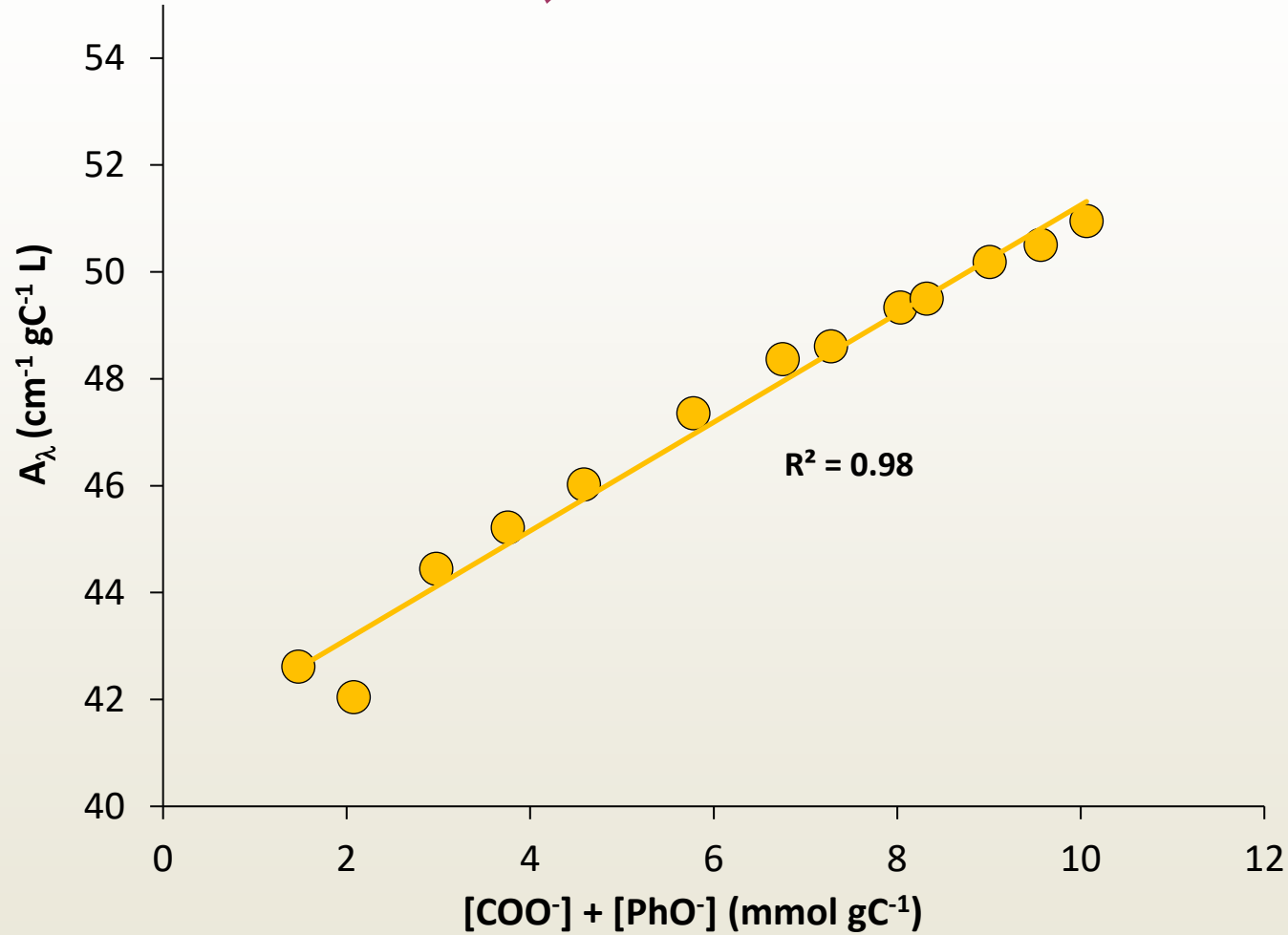


$$pH = pKa + \log [(1-f_i)/f_i]$$

*Tesfa et al.  
ES&T (2023)*

# Dosage $\text{-COO}^-$ et $\text{-PhO}^-$ Quantification

Spectrophotométrie  
UV-vis



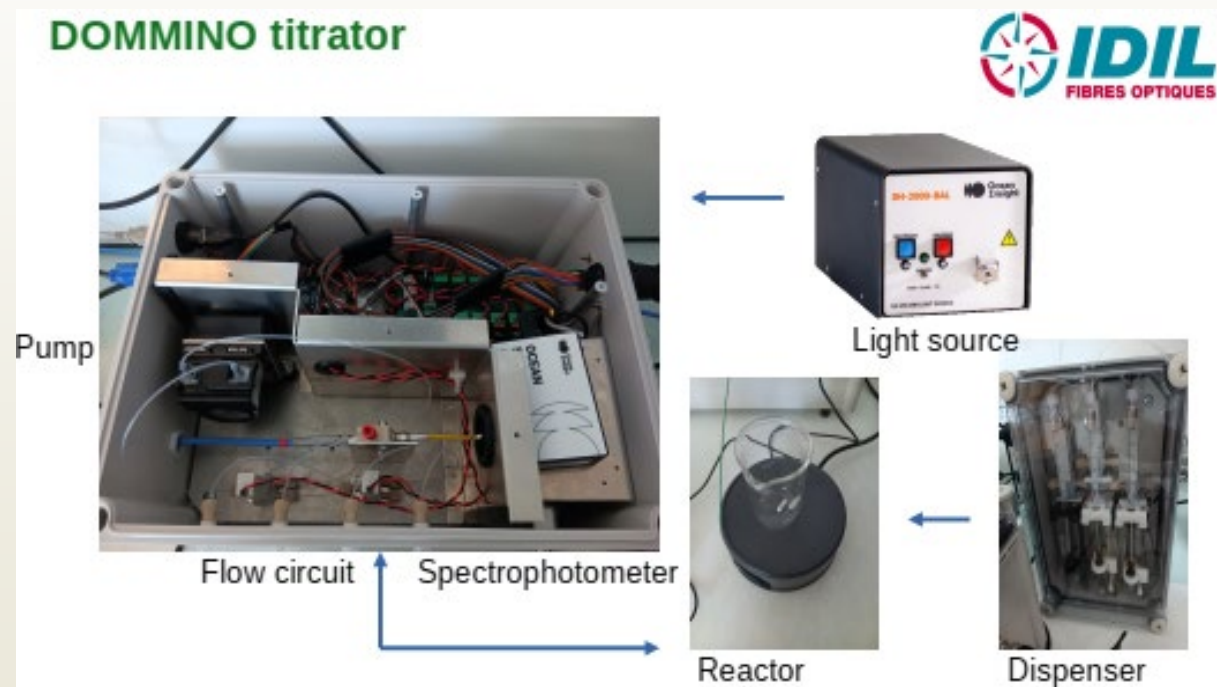
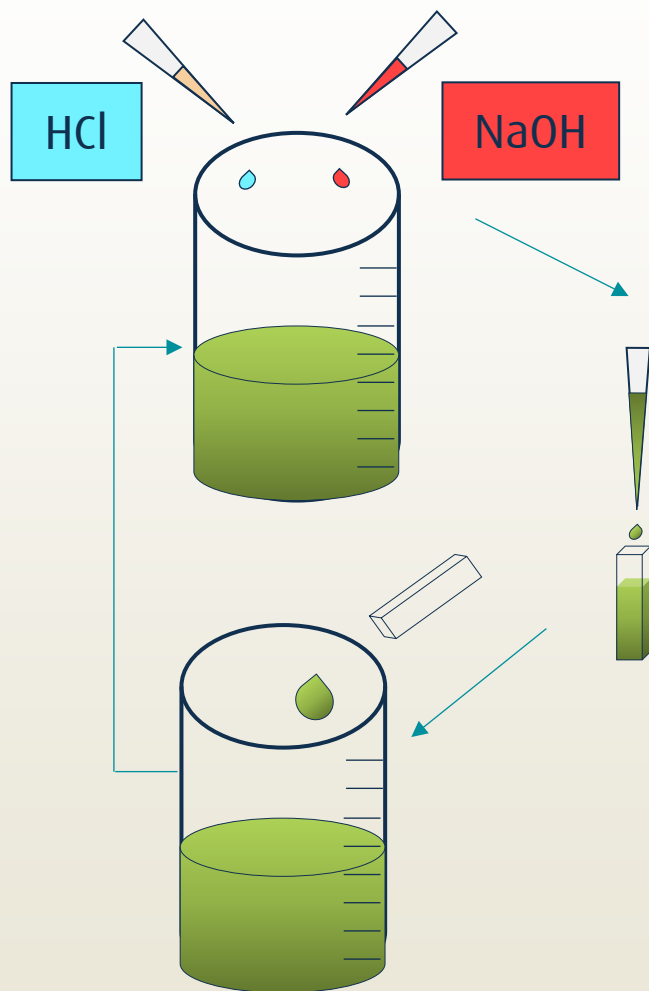
Potentiométrie

*Tesfa et al.*  
*ES&T (2023)*

# Dosage $\text{-COO}^-$ et $\text{-PhO}^-$ Automatisation : titrage et mesure



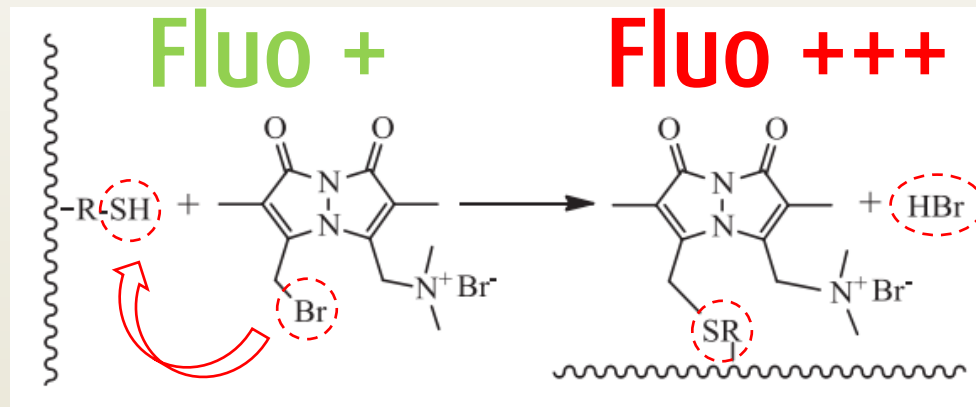
DOMMINO  
(2022-2024)



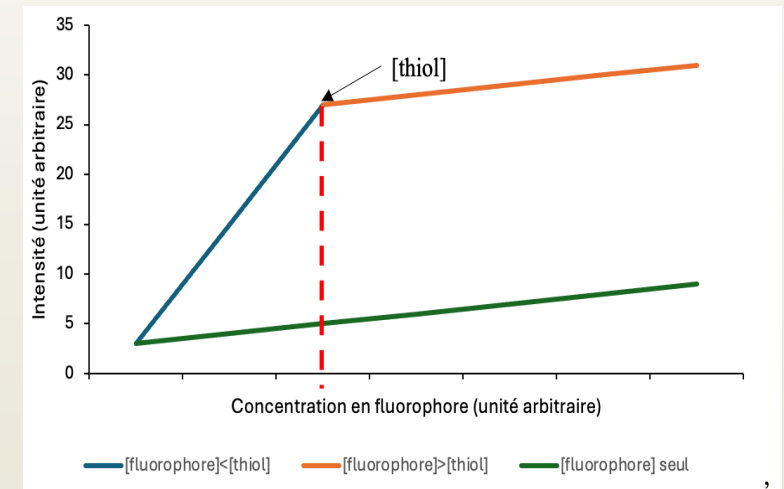
# Dosage -SH

- [Thiols] :  $\mu\text{mol gC}^{-1}$  –  $\text{mmol gC}^{-1}$
- Essentiel à étudier car affinité: Cd, Hg (très toxiques)
- Utilisation d'un sonde fluorescente

Exemple du qBBr  
(largement utilisé en biologie)



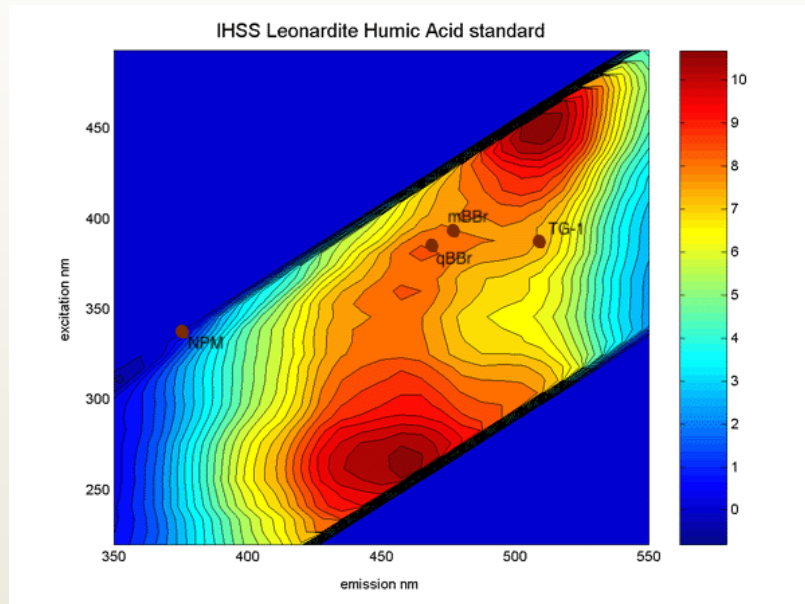
*Yu et al. (2014)*



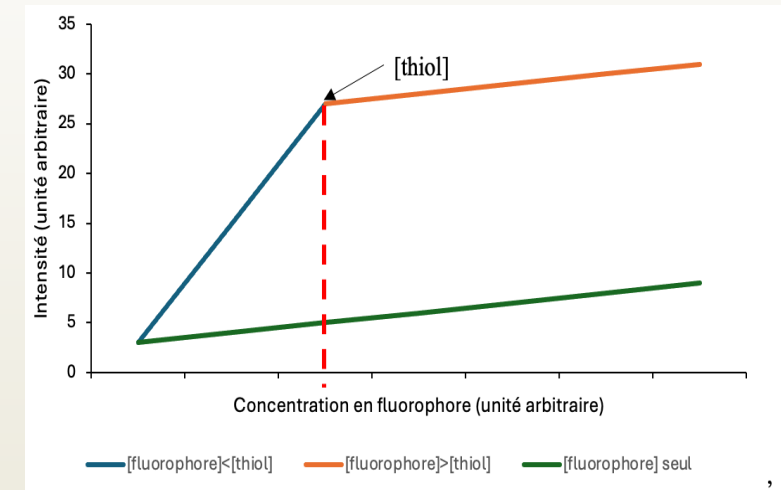
# Dosage -SH

## Limites des méthodes actuelles?

Incompatible avec la fluo de la MO ?



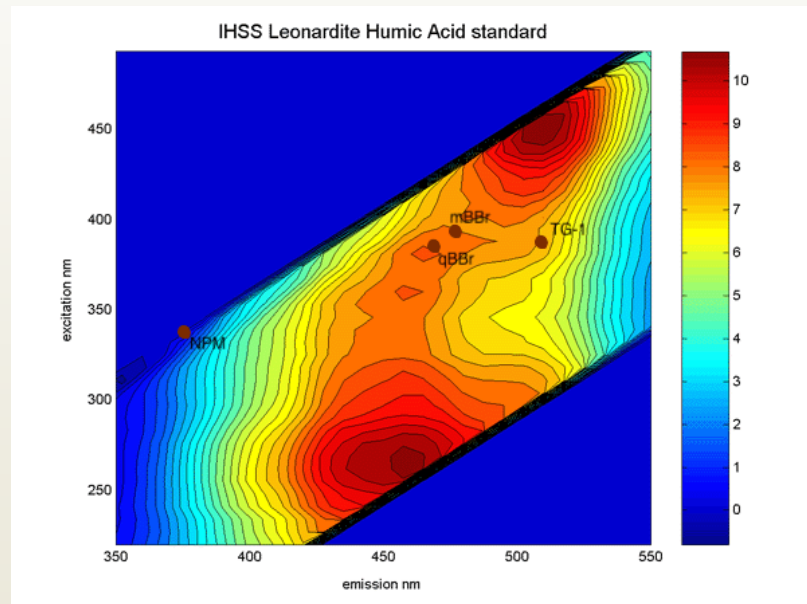
Intersection entre 2 droites de titrage :  
Mathématiquement hasardeux



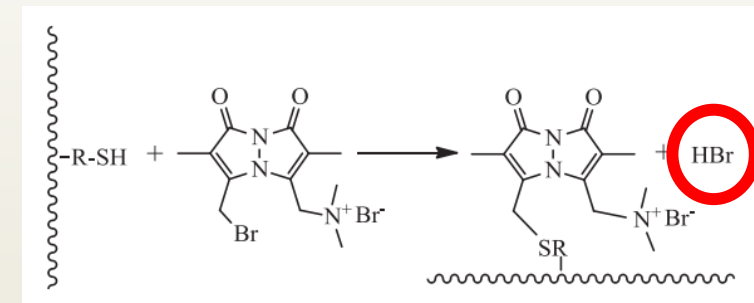
# Dosage -SH

## Pistes d'amélioration envisagées

Choix d'une autre sonde fluorescente ?



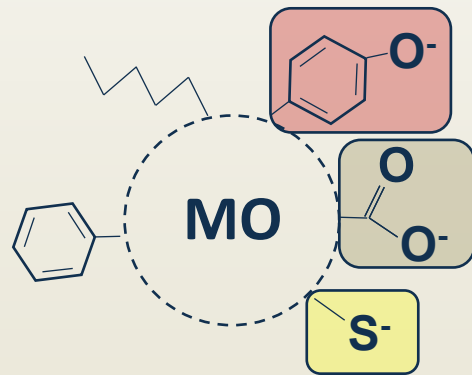
Dosage du Br<sup>-</sup> par electrode selective ?



# Perspectives

Lien entre qualité de la MO et spéciation des métaux ?

Modèles actuels : utilisation de paramètres moyens à partir de [DOC]



Concentrations  
pKa



Données d'entrées  
inédites pour les modèles  
de complexation métaux-  
MO

→ Prédiction plus précise  
de la spéciation



Merci à toutes et tous  
pour cette opportunité  
de faire de nouvelles collaborations !