UNIVERSITÉ DE MONTRÉAL

ÉTUDE DU POTENTIEL D'ATTENUATION NATURELLE DES CYANURES DANS L'EAU SOUTERRAINE À PROXIMITÉ D'UN SITE D'ENFOUISSEMENT DE BRASQUES USÉES

IAN GAGNON

DÉPARTEMENT DE GÉNIE CHIMIQUE

ÉCOLE POLYTECHNIQUE DE MONTRÉAL

MÉMOIRE PRÉSENTÉ EN VUE DE L'OBTENTION

DU DIPLÔME DE MAÎTRISE ÈS SCIENCES APPLIQUÉES

(GÉNIE CHIMIQUE)

AVRIL 2005

© Ian Gagnon, 2005.

Library and Archives Canada
Bibliothèque et Archives Canada

Published Heritage Branch
Direction du Patrimoine de l'édition

395 Wellington Street
Ottawa ON K1A 0N4
Canada

395, rue Wellington
Ottawa ON K1A 0N4
Canada

Your file Votre référence
ISBN: 0-494-01327-3
Our file Notre référence
ISBN: 0-494-01327-3

NOTICE:
The author has granted a non-exclusive license allowing Library and Archives Canada to reproduce, publish, archive, preserve, conserve, communicate to the public by telecommunication or on the Internet, loan, distribute and sell theses worldwide, for commercial or non-commercial purposes, in microform, paper, electronic and/or any other formats.

The author retains copyright ownership and moral rights in this thesis. Neither the thesis nor substantial extracts from it may be printed or otherwise reproduced without the author's permission.

AVIS:
L'auteur a accordé une licence non exclusive permettant à la Bibliothèque et Archives Canada de reproduire, publier, archiver, sauvegarder, conserver, transmettre au public par télécommunication ou par l'Internet, prêter, distribuer et vendre des thèses partout dans le monde, à des fins commerciales ou autres, sur support microforme, papier, électronique et/ou autres formats.

L'auteur conserve la propriété du droit d'auteur et des droits moraux qui protège cette thèse. Ni la thèse ni des extraits substantiels de celle-ci ne doivent être imprimés ou autrement reproduits sans son autorisation.

In compliance with the Canadian Privacy Act some supporting forms may have been removed from this thesis.

While these forms may be included in the document page count, their removal does not represent any loss of content from the thesis.

Conformément à la loi canadienne sur la protection de la vie privée, quelques formulaires secondaires ont été enlevés de cette thèse.

Bien que ces formulaires aient inclus dans la pagination, il n'y aura aucun contenu manquant.

Canada

UNIVERSITÉ DE MONTRÉAL

ÉCOLE POLYTECHNIQUE DE MONTRÉAL

Ce mémoire intitulé :

ÉTUDE DU POTENTIEL D'ATTÉNUATION NATURELLE DES CYANURES DANS L'EAU SOUTERRAINE À PROXIMITÉ D'UN SITE D'ENFOUISSEMENT DE BRASQUES USÉES

présenté par : GAGNON Ian

en vue de l'obtention du diplôme de : Maîtrise ès sciences appliquées

a été dûment acceptée par le jury d'examen constitué de :

M. KLVANA Danilo, Ph.D., président

M. ZAGURY Gérald J., Ph.D., membre et directeur de recherche

Mme DESCHÊNES Louise, Ph.D., membre et codirectrice de recherche

M. DESJARDINS Raymond, M.Ing., membre

Vas-y, fais-le pour toi !

Vasy, le bonhomme bleu

REMERCIEMENTS

Ce projet de recherche a été pour moi l'occasion de me développer tant au niveau scientifique, qu'humain. J'aimerais alors remercier le Pr Gérald Zagury de m'avoir offert ce projet et de m'avoir soutenu tout au long de celui-ci. Grâce à son expérience et à sa rigueur scientifique, M. Zagury m'a appris les bases de la recherche scientifique, ce qui me sera précieux dans le cadre de mes projets futurs.

J'aimerais aussi remercier le Pr Louise Deschênes pour son support et ses conseils. Ses multiples questions ont contribué à faire ce de ce mémoire un document d'une plus grande qualité.

Ce projet faisant partie d'un contrat industriel, je désire remercier la compagnie Alcan pour son support technique et financier. J'aimerais également remercier la chaire CRSNG en assainissement et gestion des sites, tout son personnel et mes collègues étudiants, pour leur encouragements et leur aide.

J'aimerais particulièrement souligner le travail de Manon Leduc qui, par sa révision des protocoles et par ses conseils judicieux m'a permis de mener à bien mes expériences de laboratoire.

Un merci spécial à mes collègues de la salle d'informatique où j'avais installé mon bureau. Merci pour les histoires, pour les rires et les pleurs, et pour les encouragements.

Et finalement, merci à Chloé, tu es mon inspiration. Je te dois cette maîtrise et bien plus encore.

RÉSUMÉ

Les brasques usées produites par l'industrie de l'aluminium représentent une importante problématique environnementale. Quelques 5,4 millions de tonnes ont été produites en Amérique du Nord en 2002 et, à cette production annuelle, il faut ajouter des centaines de milliers de tonnes entreposées dans des bâtiments en attente de traitement. Approximativement 427 000 tonnes de brasques usées étaient entreposées dans des bâtiments, au Canada en 1998. Ces brasques, qui contiennent entre autres des cyanures, ont par le passé été déposées dans des sites d'enfouissement, comme c'est le cas pour le site à l'étude dans cette recherche. Par lixiviation, les cyanures ont ensuite migré jusqu'à l'eau souterraine contaminant celle-ci. Les méthodes de traitement présentement utilisées pour décontaminer les sites contaminés aux cyanures sont coûteuses et entraînent à leur tour d'autres impacts sur l'environnement. L'atténuation naturelle est une méthode de gestion passive qui réduits les impacts secondaires sur l'environnement tout en diminuant les coûts.

Dans le but de mesurer un potentiel d'atténuation naturelle sur le site d'une aluminerie, le devenir des cyanures a été étudié. Puisqu'une diminution des concentrations en cyanure a été observée sur le site au cours des dernières années, l'hypothèse de recherche est que cette diminution est attribuée au phénomène d'atténuation naturelle. Les principaux objectifs de cette étude sont tout d'abord d'identifier les mécanismes d'atténuation naturelle susceptibles d'être présents dans l'eau souterraine sur le site étudié par une revue de la littérature ainsi qu'une caractérisation du site et de quantifier ces mécanismes par des expériences en laboratoire. Ces expériences en laboratoire ont été effectuées à l'aide d'échantillons d'eau souterraine et de matériel géologique provenant du site.

Les différents mécanismes d'atténuation naturelle pouvant se produire avec le cyanure sont : la biodégradation, l'adsorption, la précipitation, l'oxydation chimique, l'hydrolyse, la volatilisation, la dilution et la photolyse. La caractérisation des échantillons reçus provenant du site a permis, avec la revue de la littérature, d'identifier lesquels de ces mécanismes étaient les plus susceptibles d'être présents sur le site. Ces échantillons ont été prélevés à quatre endroits différents, soit près de la source de contamination (PN2A), dans le milieu du panache (PN3B), vers la fin du panache près du bras de mer (MW12A) et légèrement hors du panache (PZ3). Des analyses physico-chimiques détaillées (anions dissous, nutriments, cyanures, métaux, métaux dissous et paramètres organiques) de l'eau souterraine étaient également disponibles. La caractérisation microbiologique, réalisée dans notre laboratoire, consistait en un dénombrement dans les phases liquides et solides, par la méthode des comptes viables, des hétérotrophes totaux et des microorganismes tolérants aux cyanures.

Les résultats des ces caractérisations ont révélé plusieurs caractéristiques des cyanures sur le site. En mai 2003, les concentrations en cyanures totaux pour les puits PN2A, PN3B, MW12A et PZ3 étaient respectivement de 4,8 mg/L, 0,056 mg/L, 2,6 mg/L et 0,032 mg/L. De plus, le pH variait en 8,84 et 9,48 sauf au puits PZ3 où il était de 6,70. Le potentiel redox mesuré était de –72 mV (PN2A), 122,7 mV (PN3B), -188,3 (MW12A) et –36 mV (PZ3). Ainsi, il a été montré que la majorité des cyanures présents dans l'eau souterraine le sont sous forme de complexes forts et que ces complexes sont probablement formés avec le fer car il est le seul des métaux formant des complexes forts avec le cyanure à être présent en quantité significative sur le site. La caractérisation microbiologique a démontré l'existence dans l'eau et dans le matériel géologique de bactéries capables de croître en présence de cyanure. Ainsi, de 10^3 à 10^5 UFC/mL ont été dénombrées sur les pétris inoculés à l'aide de l'eau souterraine sur un milieu contenant du $K_4Fe(CN)_6$.

Suite à la caractérisation des échantillons d'eau souterraine et à la revue de la littérature, trois phénomènes d'atténuation naturelle ont été identifiés comme étant les plus susceptibles de se produire : la précipitation, l'adsorption et la biodégradation. Cinq protocoles expérimentaux détaillés (disponibles en annexe) ont été développés au laboratoire afin d'évaluer le potentiel d'atténuation naturelle par adsorption et par biodégradation.

Les travaux sur la précipitation ont nécessité l'utilisation d'un logiciel d'équilibre géochimique (VMinteq) pour prédire les concentrations à l'équilibre des différentes espèces. Ce logiciel a permis de confirmer que, pour les puits situés dans le panache, les complexes fer-cyanures sont l'espèce dominante. En effet, pour les puits PN2A, PN3B et MW12A, les valeurs des concentrations en cyanure total et en cyanure SAD dans l'eau souterraine sont respectivement de 4,8 mg/L, 0,056 mg/L, 2,6 mg/L et 4,80 mg/L, 0,052 mg/L, 2,59 mg/L. Par contre, la précipitation des cyanures demeure peu probable car les limites de saturation ne sont pas atteintes. Il serait étonnant qu'il y ait formation de complexes insolubles tels que le Bleu de Prusse ($Fe_4(Fe(CN)_6)_3(s)$) et le Bleu de Turnbull ($Fe_3(Fe(CN)_6)_2(s)$). Cependant, la spéciation des cyanures présents pourrait permettre une technique de traitement par voie de précipitation grâce à une barrière réactive de fer. De plus, les résultats de la modélisation sont stables de 2002 à 2003 alors que le $Na_2Fe(CN)_6^{-2}$ est l'espèce dominante aux puits PN2A, PN3B et MW12A sensiblement dans les mêmes proportions pour les deux années.

L'étude de l'adsorption a été effectuée à l'aide de tubes dans lesquels de l'eau et du matériel géologique, dans un rapport de 10 :1, étaient mis en contact pour environ 9 jours. Selon les essais, de l'eau synthétique ou du site était utilisée de même que l'ajout de cyanure sous forme de NaCN ou de $K_4Fe(CN)_6$ et de matériel géologique lavé ou non. Les échantillons prélevés par sacrifices étaient envoyés dans un laboratoire externe pour l'analyse de la concentration en CN total par colorimétrie alors que les analyses du pH et du potentiel redox étaient faites à notre laboratoire. Les résultats obtenus

indiquent que le matériel géologique du puits PN3B, situé au milieu du panache, possède un bon potentiel d'adsorption des cyanures (89% de réduction des cyanures totaux, 5 mg CN/L à 0,5 mg CN/L) dans l'eau souterraine. Le puits PZ3 (légèrement hors du panache) montre quant à lui un potentiel moyen (5 mg CN/L à 3 mg CN/L) alors que les puits PN2A (près de la source) et MW12A (à la fin du panache), situés respectivement près de la source de contamination et à la fin du panache, ne montrent aucun potentiel d'adsorption significatif, étant même parfois sujets à de la désorption. Il a été observé que plus une eau était chargée en ions, moins l'adsorption était efficace.

La présence d'un potentiel de biodégradation a été vérifiée par le suivi des concentrations en cyanure total dans des macrocosmes pendant plus de 2 mois. Les bioréacteurs, de 2L, contenaient de l'eau souterraine et du matériel géologique du site dans un ratio de 10 :1. Ils ont été conservés, tout au long de l'expérience, dans le noir à une température de 10°C, sans contact avec l'air et légèrement agités. L'échantillonnage se faisait sans ouvrir les réacteurs. Les échantillons prélevés ont été analysés à notre laboratoire pour les concentrations en NO_2 et NH_3 à l'aide d'un spectrophotomètre alors qu'ils ont été envoyés dans un laboratoire externe pour l'analyse du CN total par colorimétrie. Les résultats n'ont montré aucun potentiel de biodégradation. Les concentrations en cyanure total dans l'eau souterraine sont demeurées sensiblement identiques tout au long de l'expérience : PN2A de 4,4 mg/L à 5,0 mg/L, PN3B de 3,6 mg/L à 4,0 mg/L et MW12A de 2,6 mg/L à 2,8 mg/L. Ceci n'est pas le cas au puits PZ3, situé en dehors du panache, où les concentrations en CN total ont diminué fortement, probablement pas à cause d'un phénomène biologique mais plutôt à cause de la volatilisation (pH autour de 6,5).

En conclusion, les cyanures, lorsqu'ils sont majoritairement sous forme de complexes forts, sont donc stables dans l'eau souterraine. Sur le site étudié, il est peu probable qu'ils précipitent ou qu'ils soient dégradés. Il existe néanmoins un potentiel important

d'adsorption des ferrocyanures au milieu du panache. Plus d'essais sont nécessaires pour établir le potentiel global d'atténuation naturelle par adsorption.

ABSTRACT

The spent pot lining (SPL) produced by the aluminium industry constitutes a major environmental issue. In 2002, about 5,4 millions of tons of spent pot lining has been produced in North America. This production does not include the hundreds of thousands of tons stored in warehouses waiting for treatment. In 1998, in Canada, approximately 427 000 tons of spent pot lining were stored. The SPL, which contain cyanide, were in the past deposited in landfills. The site of this study holds a SPL landfill. Following leaching, the cyanide migrated from the landfill to the groundwater which is now contaminated. The available treatment methods for sites contaminated by cyanide are onerous and lead to secondary environmental impacts. Natural attenuation is a management method which reduces the secondary impacts on the environment while diminishing the costs.

The fate of cyanide in the groundwater near an aluminium smelter was investigated to assess the potential for natural attenuation. A diminution in the cyanide concentration in groundwater led to the following research hypothesis: in addition to capping, the reduction of cyanide concentration in groundwater near the spent pot lining landfill can be attributed to natural attenuation phenomena. The main objectives of the study are to identify the main natural attenuation phenomena susceptible to entail a decrease in cyanide concentration in groundwater based on a critical literature review and geochemical and microbiological characterization of the site, and to quantify the phenomena by laboratory experiments. These experiments were performed using groundwater and soil samples collected on the site.

Natural attenuation of cyanide phenomena such as volatilization, precipitation, chemical decomposition, adsorption, photolytic reactions and biodegradation with indigenous

micro organisms can occur in various environments. The characterization of received samples from the site and the literature review allowed us to identify which of these phenomena are most susceptible to occur. Samples were taken at four different locations on the site: near the source of contamination (PN2A), in the middle of the plume (PN3B), at the end of the plume near an arm of the sea (MW12A), and just off the plume (PZ3). Physico-chemical analysis data, such as dissolved ions, nutrients, cyanides, metals, dissolved metals and some organic parameters in groundwater were also available.

In May 2003, total cyanide concentrations at PN2A, PN3B, MW12A and PZ3 were 4.8 mg/L, 0.056 mg/L, 2.6 mg/L, and 0.032 mg/L respectively. The pH ranged from 8.84 to 9.48 except at PZ3 where it was 6.70. In-situ redox potential was low suggesting anoxic conditions (-72 mV (PN2A), 123 mV (PN3B), -188 (MW12A), and -36 mV (PZ3)). Most of the cyanide present in the groundwater was in the form of strong complexes and, of the four main metals forming strong metal complexes with cyanide (Fe, Co, Ag, Au), only Fe was present in significant concentrations in groundwater.

Using the characterization results and the findings of the literature review, three natural attenuation phenomena were identified as most susceptible to occur: precipitation, adsorption and biological degradation. Five detailed experimental protocols (available in the appendices) were developed in the laboratory to assess the natural attenuation potential by adsorption and biological degradation.

The use of a geochemical equilibrium software (VMinteq) was necessary to predict the concentrations at equilibrium of the different species in order to assess the potential of precipitation of cyanide. The results obtained with Vminteq showed that iron-cyanide complexes ($Na_2Fe(CN)_6^{-2}$ and $K_2Fe(CN)_6^{-2}$) were the dominant species within the plume. Total cyanide and cyanide SAD concentrations for PN2A, PN3B and MW12A were respectively of 4.8 mg/L, 0.056 mg/L, and 2.6 mg/L, and 4.80 mg/L, 0.052 mg/L,

and 2.59 mg/L. Off the plume (PZ3), free cyanide was the dominant species. Cyanide removal following precipitation is not likely to occur since the saturation limits are not reached. It would be surprising that, in a passive way, formation of insoluble complexes such as Prussian Blue ($Fe_4(Fe(CN)_6)_3(s)$) and Turnbull's Blue ($Fe_3(Fe(CN)_6)_2(s)$) occurs. However, the speciation of cyanide in the groundwater would allow the use of a cyanide precipitation method using an iron reactive barrier. Results are stable through 2002 and 2003 with $Na_2Fe(CN)_6^{-2}$ as the dominant species at PN2A, PN3B and MW12A within the same proportions.

Sorption experiments were performed using tubes in which groundwater and soil, in a 10:1 ratio, were inserted. The tubes were shaken for about 9 days. Depending on the essay, synthetic or site water, NaCN or $K_4Fe(CN)_6$ addition, and washed or non-washed soil were used. CN_{total} analysis was performed by colorimetry in an external laboratory. Results showed that the geological material at well PN3B, located in the middle of the plume, has a good potential for adsorption of cyanide in groundwater (89% of reduction of total cyanide, from 5 mg/L to 0.5 mg/L). PZ3 (off the plume) has a fair adsorption potential (from 5 mg CN/L to 3 mg CN/L) whereas PN2A (near the source, beginning of the plume) and MW12A (end of the plume) have a low potential and present a risk of CN desorption in groundwater. It was observed that cyanide in charged water was less adsorbed because of competition between the ions for the adsorption sites.

A microbial count of the field samples was conducted in our laboratory prior to the biological degradation experiments. The direct count method for cyanide resistant bacteria in groundwater showed the existence of 10^3 to 10^5 colony-forming unit per millilitres when $K_4Fe(CN)_6$ was added. Therefore, the biodegradation potential of iron-cyanide complexes was assessed with macrocosms during 2 months. Abiotic reactors were prepared by adding formaldehyde to the bioreactors. The total CN concentrations were analyzed periodically. The results showed no cyanide biodegradation since the total cyanide concentrations in groundwater from wells PN2A, PN3B, and MW12A

remained constant. At well PZ3, the concentrations decreased greatly in both biotic and abiotic microcosms. This was attributed to a physico-chemical process (probably due to volatilization (pH about 6.5)).

Since the cyanide present on the site is mostly strong complexes, they are stable in groundwater. They have a low natural potential for chemical precipitation or biological degradation. However, an important adsorption potential of iron-cyanide is present in the middle of the plume (PN3B sample). More experiments are necessary to accurately establish the natural attenuation potential via adsorption.

EXECUTIVE SUMMARY

Nature has this ability to remediate itself using a wide range of mechanisms. This research concerns the natural attenuation potential of cyanide in groundwater near a spent pot lining (SPL) landfill. This potential was investigated through the analysis of different mechanisms susceptible to occur on the site.

In the last few years, it was observed that the concentration of cyanide in groundwater under the site decreased with time. Since no treatment method was employed despite a capping of the landfill, natural attenuation was suspected to occur. The natural attenuation potential however had to be quantified. It led to the following research hypothesis: in addition to capping, the reduction of cyanide concentration in groundwater near the spent pot lining landfill can be attributed to natural attenuation phenomena such as adsorption, precipitation, and biodegradation.

The main objectives of the study were to:

- Identify the main natural attenuation phenomena susceptible to entail a decrease in cyanide concentration in groundwater based on a critical literature review;
- Perform a geochemical and microbiological characterization of soil and groundwater samples collected on the study site;
- Identify and quantify the various cyanide species present in the groundwater samples;
- Quantify the potential of the natural attenuation phenomena by laboratory experiments for adsorption and biological degradation;
- Assess the natural attenuation potential of cyanide in groundwater.

Cyanide is present in the wastes of various industries: electroplating, paint, aluminium, metallurgical, manufactured-gas, mines and petroleum refinery. In the present case, the occurrence of cyanide in groundwater is due to the leaching of the spent pot lining from a landfill. Cyanide is also produced naturally by some plants and micro organisms, but only human activities can generate enough cyanide to reach toxic concentrations. North-American industries reject more than 14 millions of kilograms per year of cyanide (ATSDR 1997).

Different treatment methods exist for soil and groundwater contaminated with cyanide. They mainly consist in chemical or thermal technologies, but also in biological processes. These methods can be effective, but are onerous and lead to secondary environmental impacts. Natural attenuation is a management method which reduces the secondary impacts on the environment while diminishing the costs.

Few studies were made on natural attenuation potential of cyanide in the environment. Ghosh (1998) and Meehan (2000) studied the fate of cyanide in groundwater on manufactured-gas plant sites. The work previously performed at École Polytechnique (Oudjehani 2000; Oudjehani et al. 2002; Zagury et al. 2004) focused on natural attenuation of cyanide in mine tailings and suggested a strong attenuation potential in gold mine mine tailings. Other articles and thesis investigated the fate of cyanide in the environment (Smith and Mudder 1991; Kjeldsen 1999; Meeussen et al. 1992).

The main natural attenuation mechanisms for cyanide are: volatilization, precipitation, adsorption, chemical oxidation, chemical hydrolysis, dilution and biological degradation.

Prior to the late 1970s, SPL from the Kitimat smelter was deposited in the landfill located in proximity to the potlines. In 1980, landfilling operation was discontinued. It is estimated that the landfill holds about 460 000 m^3 of waste of which 100 000 m^3 are

spent pot lining. It has an area of approximately 58 936 m^2 and a maximum depth of 7m. Samples of four different wells were collected by Alcan and shipped to our laboratory. The wells were located near the source of contamination (PN2A), in the middle of the plume (PN3B), at the end of the plume (MW12A) and just off the plume (PZ3). The groundwater samples analysis was available. The average temperature of the groundwater was 10°C except for PN3B where it was about 13°C. Dissolved oxygen concentrations ranged from 0 to 3.5%. The main finding was that the cyanide present on the site was in the form of strong complexes, mostly iron-cyanide complexes. For PN2A, PN3B, MW12A and PZ3 wells, total cyanide and SAD cyanide concentrations in groundwater were respectively 4.8 mg/L, 0.056 mg/L, 2.6 mg/L, and 0.032 mg/L, and 4.72 mg/L, 0.042 mg/L, 2.58 mg/L, and 0.032 mg/L.

Using the characterization results and the findings of the literature review, three natural attenuation phenomena were identified as most susceptible to occur: precipitation, adsorption and biological degradation. The other phenomena, chemical oxidation, hydrolysis, volatilization and photolysis are less likely to occur in groundwater. Five detailed experimental protocols (available in appendices) were developed in the laboratory to assess the natural attenuation potential by adsorption and biological degradation.

To investigate the speciation of cyanide in the groundwater, a geochemical equilibrium software (VMinteq) was used. This software can predict the concentration of different species at equilibrium depending on the physico-chemical properties. It possesses a thermodynamic database suitable for a wide range of reactions. The database was enriched by adding some reactions with cyanide. The results showed that, at three of the four wells (PN2A, PN3B, MW12A), iron-cyanide was the dominant species, which confirms the conclusions of the groundwater samples characterization. Total cyanide and cyanide SAD concentrations for PN2A, PN3B and MW12A were respectively of 4.8 mg/L, 0.056 mg/L, 2.6 mg/L and 4.8 mg/L, 0.052 mg/L and 2,59 mg/L. Off the plume

(PZ3), free cyanide was the dominant species but total cyanide concentrations were very low (less than 0.05 mg/L) and pH was lower than 7 (compared to concentrations up to 4.8 mg/L and pH of 9 for the other wells). The subsequent experimental studies used iron-cyanide complexes to assess the natural attenuation potential accordingly to site specifications. The VMinteq software detailed results include a concentration table, a species distribution table and a saturation index table (see Appendix I to IV).

The analysis of the saturation index showed that precipitation is not likely to occur in groundwater because the concentration of the different species is not near the saturation limit. The saturation index values (log (IAP/K)) for Turnbull's Blue ranged from –316 to –332, when precipitation occurs at 0. To force the precipitation of cyanide, under the form of Prussian Blue or Turnbull's Blue, an addition of iron, for example via a reactive barrier, would be necessary.

Sorption experiments were performed using soil and groundwater from the site with a 10:1 ratio. These experiments lasted for approximately 9 days. Depending on the assay, synthetic or site water was used as well as washed or non-washed soil. The addition of cyanide was made using NaCN or $K_4Fe(CN)_6$. Sacrifice samples were taken during all the experiment and concentration of cyanide in the aqueous phase (external laboratory by colorimetry), pH and redox potential were measured. Results showed that the geological material at well PN3B, located in the middle of the contamination plume, has a very good potential for adsorption of cyanide in groundwater (89% of reduction of total cyanide, from 5 mg/L to 0.5 mg/L). It had a sorption ratio of 0.093 mg CN/g of dry soil when $K_4Fe(CN)_6$ was added. In comparison, at PN2A and MW12A, the adsorption potential was very low. The sorption potential for these two wells is lower than at PN3B with 0.054 mg CN/g of dry soil and 0.032 mg CN/g of dry soil respectively with cyanide added as $K_4Fe(CN)_6$. These two wells have a highly charged groundwater. PZ3 (off the plume) has a fair adsorption potential as concentration in cyanide decreased slightly

(from 5 mg/L to 3 mg/L). It was observed that cyanide in charged water was less adsorbed because of the competition between the ions for the adsorption sites.

A microbial count of the field samples was conducted in our laboratory prior to the biological degradation experiments. The direct count method was used for both soil and groundwater. It revealed that 10^3 to 10^5 colony-forming units per millilitre were present in the groundwater even when $K_4Fe(CN)_6$ was added to the substrate. Then, macrocosms were prepared using 2L bioreactors containing groundwater and soil in a 10:1 ratio. These bioreactors were placed in a shaker, in the dark, at 10°C, without contact with the atmosphere. Iron-cyanide complexes were added to PN3B and PZ3 to reach an appropriate cyanide concentration. The samples were taken using a syringe through a rubber cap during more than two months. Abiotic reactors were prepared by adding formaldehyde to the bioreactors. The results showed no potential for biological degradation of iron-cyanide complexes since cyanide concentrations in groundwater remained constant: PN2A from 4.4 mg/L to 5.0 mg/L, PN3B from 3.6 mg/L to 4.0 mg/L, MW12A from 2.6 mg/L to 2.8 mg/L. At well PZ3, the cyanide concentrations decreased greatly, but not because of a biological mechanism. This was attributed to a physico-chemical process (probably due to volatilization (pH about 6.5)).

CONCLUSIONS

Characterization

- The detailed chemical characterization revealed that cyanide in groundwater was mostly present as strong complexes (SAD), with iron.

- For wells PN2A, PN3B, MW12A and PZ3, total cyanide and SAD cyanide concentrations in groundwater were respectively 4.8 mg/L, 0.056 mg/L, 2.6 mg/L, and 0.032 mg/L and, 4.72 mg/L, 0.042 mg/L, 2.58 mg/L, and 0.032 mg/L.

Geochemical modeling

- The characterization of water samples and the modeling using VMinteq showed the predominance of iron-cyanide complexes ($Na_2Fe(CN)_6^{-2}$ and $K_2Fe(CN)_6^{-2}$) in the wells located within the plume (PN2A, PN3B, MW12A) and the potential for natural cyanide precipitation appears to be weak. Therefore, precipitation can't be considered as an important natural attenuation phenomena at this site.

Adsorption

- Well PN3B showed an important potential for adsorption in the middle of the plume; cyanide concentration dropped by 89% (5 mg/L to 0,5 mg/L) with site groundwater and NaCN added, and 99% (from 5 mg/L to 0,03 mg/L) with synthetic water and $K_4Fe(CN)_6$ added;

- Well PZ3 (off the plume) showed a fair potential for cyanide adsorption.

- Wells PN2A and MW12A, located respectively near the source and at the end of the plume, showed no adsorption potential. The groundwater and soil physico-chemical characteristics were the dominant factors explaining the adsorption levels observed in these samples.

Biological degradation

- Direct counts showed the existence of important indigenous bacterial populations in the groundwater (10^3 to 10^5 CFU/mL) and in the geological material (10^4 to 10^6 CFU/g) which were able to grow in presence of 5 mg CN/L (added under the form of iron-cyanide complexes).

- None of the tested samples showed a decrease in cyanide concentration which can be attributed to biodegradation.

- For wells PN2A, PN3B and MW12A, the most important factor for non-biological degradation was cyanide speciation; SAD cyanide is less degradable than free cyanide. Temperature, dissolved oxygen concentration and absence of light were other factors that could explain the weak biodegradation.

General conclusion

- It seems that the historic decrease in cyanide concentrations in groundwater at this site can't be attributed to precipitation nor to biological degradation. Geological material collected from well PN3B (located in the middle of the plume) showed, however, an important natural attenuation potential of iron-cyanide via adsorption.

MAIN RECOMMENDATIONS

- Conduct an ecotoxicological risk assessment to determine the potential risks associated with this iron-cyanide contamination.

- Conduct a detailed characterization of groundwater and soil in other locations within the contamination plume to quantify the global natural attenuation potential via adsorption.

- Perform additional geochemical equilibrium modeling with data generated yearly from sampling campaigns as field conditions (ex. pH, redox) can change.

- Conduct more hydrological studies to evaluate the natural attenuation potential via dilution. That potential could also be assessed in the laboratory using continuous column experiments.

Other recommendations

- If remediation is needed, prioritize *in-situ* restoration techniques causing less secondary environmental impacts than traditional remediation methods.

- Assess the potential for groundwater treatment using an iron reactive barrier. This step should be preceded by geochemical equilibrium modeling before starting laboratory experiments.

- Conduct more biological degradation experiments for strong complexes to verify if they degrade when complexed or if the cyanide only degrades when it has dissociated into free cyanide.

- Conduct more biological degradation experiments with free cyanide and complexed cyanide in unfavourable conditions (ex. anaerobic, low temperatures).

- Further investigate the role of organic matter in the adsorption of cyanide.

TABLE DES MATIÈRES

DÉDICACE IV

REMERCIEMENTS V

RÉSUMÉ VI

ABSTRACT XI

EXECUTIVE SUMMARY XV

TABLE DES MATIÈRES XXIII

LISTE DES TABLEAUX XXVII

LISTE DES FIGURES XXVIII

LISTE DES ANNEXES XXXI

LISTE DES NOTATIONS ET SYMBOLES XXXIII

INTRODUCTION ET ORGANISATION DU MÉMOIRE 1

CHAPITRE 1 - REVUE DE LA LITTÉRATURE 4

1.1 LES SOURCES DE CYANURES DANS L'ENVIRONNEMENT 4

1.1.1 Production naturelle des cyanures 4

1.1.2 Industrie aurifère 5

1.1.3 Industrie de plaquage de métaux 5

1.1.4 Production d'aluminium 6

1.2 Chimie des cyanures 8

1.2.1 Cyanures libres 9

1.2.2 Sels cyanurés 11

1.2.3 Cyanures complexés 11
1.2.4 Thiocyanates 13
1.2.5 Cyanates 13
1.2.6 Cyanures totaux 13

1.3 Toxicité des cyanures 14

1.4 Procédés de traitement des cyanures 15

1.4.1 Méthodes physiques 16
1.4.2 Méthodes de complexation 17
1.4.3 Méthodes d'adsorption 19
1.4.4 Les méthodes d'oxydation 19
1.4.5 Précipitation des complexes fer-cyanures 21
1.4.6 Combinaison chimique et biologique 22
1.4.7 L'atténuation naturelle 23

1.5 Atténuation naturelle des cyanures dans l'eau souterraine 23

1.5.1 La précipitation 23
1.5.2 L'adsorption 25
1.5.3 Biodégradation 26
1.5.4 L'oxydation chimique 31
1.5.5 L'hydrolyse 32
1.5.6 La volatilisation 32
1.5.7 La photolyse 33

1.6 Conclusion 33

CHAPITRE 2 - HYPOTHÈSE DE RECHERCHE ET OBJECTIFS 35

CHAPITRE 3 - CARACTÉRISTIQUES DU SITE ET CHOIX DES PROCESSUS D'ATTÉNUATION NATURELLE....36

3.1 Situation géographique du site....36

3.2 Historique du site....36

3.3 Plan du site....37

3.4 Hydrogéologie....38

3.5 Échantillonnage et caractérisation....39

3.5.1 Choix des puits....40

3.5.2 Échantillonnage....40

3.5.3 Résultats et discussion sur caractérisation de l'eau souterraine....41

3.6 Choix des processus d'atténuation naturelle....49

3.7 Plan expérimental général....51

CHAPITRE 4 - SPÉCIATION DES CYANURES DANS L'EAU SOUTERRAINE (MODÉLISATION D'ÉQUILIBRE GÉOCHIMIQUE)....53

4.1 VMINTEQ....53

4.2 Résultats des modélisations et analyse....56

4.3 Conclusion....62

CHAPITRE 5 - ÉTUDE DE L'ADSORPTION DES CYANURES....64

5.1 Méthodologie....64

5.1.1 Préparation des sols (Annexe V)....65

5.1.2 Préparation des eaux (Annexe VI)....66

5.1.3 Essais d'adsorption (Annexe VII)....66

5.2 Résultats et discussion 71

5.2.1 Adsorption en fonction de la masse sèche de matériel géologique 87
5.2.2 Effets de la spéciation du cyanure ajouté – NaCN ou $K_4Fe(CN)_6$ 92
5.2.3 Effets du lavage du sol 93
5.2.4 Effets de l'eau utilisée (du site ou synthétique) 93
5.2.5 Effets du matériel géologique 94

5.3 Conclusion 95

CHAPITRE 6 - ÉTUDE DE LA BIODÉGRADATION DES CYANURES 98

6.1 Dénombrement bactérien 99

6.1.1 Méthodologie 99
6.1.2 Résultats et discussion 102

6.2 Essais de biodégradation en macrocosmes 103

6.2.1 Méthodologie 104
6.2.2 Résultats et discussion 107

6.3 Conclusion 112

CONCLUSION GÉNÉRALE 115

RECOMMANDATIONS 118

RÉFÉRENCES BIBLIOGRAPHIQUES 120

ANNEXES 129

LISTE DES TABLEAUX

Tableau 1.1 : Espèces de cyanure (adapté de Kjeldsen 1999; Smith et Mudder 1991) 8

Tableau 3.1 : Paramètres de l'analyse détaillée 42

Tableau 3.2 : Résultats de l'analyse de mai 2002 de l'eau souterraine pour 4 puits 43

Tableau 3.3 : Résultats de l'analyse de mai 2003 de l'eau souterraine pour 4 puits 44

Tableau 3.4: Résultats des analyses de juillet et septembre 2003 45

Tableau 4.1 : Réactions chimiques et constantes de formation ajoutées à VMINTEQ ...55

Tableau 4.2 : Concentrations des espèces de cyanure 60

Tableau 5.1 : Mélanges sol-eau étudiés lors des tests d'adsorption 69

Tableau 5.2 : Concentrations maximales et minimales observées selon l'essai 87

Tableau 5.3 : Adsorption de cyanure par g de matériel géologique sec dans le temps (PN2A) 88

Tableau 5.4 : Adsorption de cyanure par g de matériel géologique sec dans le temps (PN3B) 89

Tableau 5.5 : Adsorption de cyanure par g de matériel géologique sec dans le temps (MW12A) 90

Tableau 5.6 : Adsorption de cyanure par g de matériel géologique sec dans le temps (PZ3) 91

Tableau 6.1 : Nombre de UFC dans les pétris sans cyanure ajouté 102

Tableau 6.2 : Nombre de UFC dans les pétris avec $K_4Fe(CN)_6$ ajouté 102

LISTE DES FIGURES

Figure 1.1 : Cuve électrolytique (Godin 2004) 6

Figure 1.2 : Spéciation du cyanure libre en fonction du pH (Smith et Mudder 1991)..... 10

Figure 1.3 : Constantes de stabilité de différents complexes (Ghosh et al. 2004) 12

Figure 1.4 : Concentration totale en $Fe(CN)_6$ (mol/L) en équilibre avec le Bleu de Prusse et les hydroxydes de fer en fonction du pH et du pe. 24

Figure 1.5 : Réactions de biodégradation des cyanures (Ebbs 2004) 27

Figure 3.1 : Plan du site et localisation des puits d'observation 37

Figure 3.2 : Vue en coupe d'une section géologique 39

Figure 3.3 : Schéma de la méthodologie employée 52

Figure 4.1 : Analyse de la distribution des espèces de cyanure - mai 2003 57

Figure 4.2 Analyse de la distribution des espèces de cyanure - 2002 59

Figure 5.1 : PN2A – Concentration en cyanure total en fonction du temps (Sol non lavé/eau synthétique/NaCN ajouté) 71

Figure 5.2 : PN2A - Concentration en cyanure total en fonction du temps (Sol non lavé/eau synthétique/$K_4Fe(CN)_6$ ajouté) 72

Figure 5.3 : PN2A - Concentration en cyanure total en fonction du temps (Sol non lavé/eau du site)..... 73

Figure 5.4 : PN2A - Concentration en cyanure total en fonction du temps (Sol lavé/ eau du site) 74

Figure 5.5 : PN3B - Concentration en cyanure total en fonction du temps (Sol non lavé/eau synthétique/NaCN ajouté) 75

Figure 5.6 : PN3B - Concentration en cyanure total en fonction du temps (Sol non lavé/eau synthétique/$K_4Fe(CN)_6$ ajouté) 76

Figure 5.7 : PN3B - Concentration en cyanure total en fonction du temps (Sol non lavé/eau du site/NaCN ajouté) 77

Figure 5.8 : PN3B - Concentration en cyanure total en fonction du temps (Sol lavé/ eau du site/NaCN ajouté) 78

Figure 5.9 : MW12A - Concentration en cyanure total en fonction du temps (Sol non lavé/eau synthétique/NaCN ajouté) 79

Figure 5.10 : MW12A - Concentration en cyanure total en fonction du temps (Sol non lavé/eau synthétique/$K_4Fe(CN)_6$ ajouté) 80

Figure 5.11 : MW12A - Concentration en cyanure total en fonction du temps (Sol non lavé/eau du site) 81

Figure 5.12 : MW12A - Concentration en cyanure total en fonction du temps (Sol lavé/eau du site) 82

Figure 5.13 : PZ3 - Concentration en cyanure total en fonction du temps (Sol non lavé/eau synthétique/NaCN ajouté) 83

Figure 5.14 : PZ3 - Concentration en cyanure total en fonction du temps (Sol non lavé/eau synthétique/$K_4Fe(CN)_6$ ajouté) 84

Figure 5.15 : PZ3 - Concentration en cyanure total en fonction du temps (Sol non lavé/eau du site/NaCN ajouté) 85

Figure 5.16 : PZ3 - Concentration en cyanure total en fonction du temps (Sol lavé/ eau du site/NaCN ajouté) 86

Figure 6.1 : Concentration en cyanure total en fonction du temps (PN2A) 107

Figure 6.2 : Concentration en cyanure total en fonction du temps (PN3B) 108

Figure 6.3 : Concentration en cyanure total en fonction du temps (MW12A) 109

Figure 6.4 : Concentration en cyanure total en fonction du temps (PZ3) 109

LISTE DES ANNEXES

Annexe I : Fichiers VMINTEQ pour PN2A 129

Annexe II : Fichiers VMINTEQ pour PN3B 156

Annexe III : Fichiers VMINTEQ pour MW12A 182

Annexe IV : Fichiers VMINTEQ pour PZ3 209

Annexe V : Protocole A - *Préparation de 4 sols en vue de réaliser des essais d'adsorption : récupération des sols des tubages d'échantillonnages et lavage du sol* 229

Annexe VI : Protocole B - *Préparation de trois eaux synthétiques pour des essais d'adsorption soit : eau déionisée, eau déionisée contaminée au NaCN et eau déionisée contaminée au* $K_4Fe(CN)_6^{-3}$ 237

Annexe VII : Protocole C - *Essais d'adsorption en «batch» des espèces de cyanure contenues dans de l'eau, synthétique et du site, contaminée au cyanure libre et aux complexes fer-cyanure sur du matériel géologique provenant du site étudié* ..243

Annexe VIII : Protocole E - *Dénombrement total de colonies bactériennes hétérotrophes et hétérotrophes résistantes au cyanure sous atmosphère d'azote en provenance d'échantillons d'eau et de sol provenant d'un site contaminé par la méthode du comptage sur pétris* 252

Annexe IX : Protocole D - *Essais de biodégradation en macrocosme du cyanure contenu dans l'eau souterraine d'un site contaminé* 261

Annexe X : Résultats – Macrocosmes 268

Annexe XI : Résultats – Adsorption 274

Annexe XII : Méthodologie – Analyse détaillée 279

LISTE DES NOTATIONS ET SYMBOLES

CN_{SAD} :	Complexes métal-cyanure fort (« strong acid dissociable »)
CN_{Tot} :	Cyanures totaux
CN_{WAD} :	Cyanures facilement dissociables (« weak acid dissociable »)
K_a :	Constante d'équilibre
pK_a :	pH où 50% d'un composé est sous forme non ionisée et 50% sous forme ionisée
rpm :	Rotations par minute
UFC :	Unités formatrices de colonies
USEPA :	United States Environmental Protection Agency
UV :	Ultraviolet
VMINTEQ :	Visual Minteq

INTRODUCTION ET ORGANISATION DU MÉMOIRE

La nature possède cette capacité intrinsèque de se décontaminer par elle-même, et cela peut se faire à travers une variété de mécanismes. La présente étude porte sur le potentiel d'atténuation naturelle des cyanures dans l'eau souterraine à proximité d'un site d'enfouissement de brasques usées. Ce potentiel a été étudié à travers les différents mécanismes d'atténuation naturelle pouvant se produire.

L'élément déclencheur à l'origine de ce projet fut la constatation faite que, dans de l'eau souterraine contaminée aux cyanures, la concentration de ces derniers diminuait dans le temps sans qu'il y ait une intervention humaine pour la décontamination. La projet a donc pour but d'identifier le potentiel réel d'atténuation naturelle pour ce site ainsi que les mécanismes contribuant à cette diminution.

Les cyanures sont présents dans les eaux usées des industries de plaquage des métaux, les producteurs de peinture, les alumineries, les métallurgies, les procédés de gazéification du charbon, les mines et les raffineries de pétrole. Dans le cas présent, leur présence dans l'eau souterraine résulte de la lixiviation des brasques enfouies dans un site d'enfouissement. Les cyanures sont également produits naturellement par certains végétaux et microorganismes, mais seules les activités humaines entraînent des concentrations pouvant être dangereuses pour la santé. Les rejets totaux de cyanures des industries nord-américaines sont estimés à plus de 14 millions de kilogrammes par année (ATSDR 1997).

Différents procédés de décontamination existent pour les sols et les eaux contaminés aux cyanures, essentiellement des méthodes chimiques ou thermiques, mais aussi des procédés biologiques. Ces méthodes, bien qu'elles puissent être efficaces, sont toutefois onéreuses et parfois polluantes. Or, l'atténuation naturelle est une méthode passive qui

offre l'avantage d'être peu coûteuse et de ne pas engendrer d'autres rejets dans l'environnement.

Peu d'études ont été faites sur le potentiel d'atténuation naturelle des cyanures dans leur milieu naturel. Ghosh (1998) et Meehan (2000) ont étudié le devenir des cyanures dans l'eau souterraine sur des sites d'usine de gaz manufacturé. Les travaux de Oudjehani (2000), qui a étudié l'atténuation naturelle des cyanures dans les résidus miniers, ont permis de constater que l'atténuation naturelle des cyanures était possible dans certains résidus miniers. Plusieurs autres articles et thèses se sont également penchés sur le devenir des cyanures dans l'environnement (Smith et Mudder 1991; Kjeldsen 1999; Meeussen et al 1992).

Lorsqu'on parle d'atténuation naturelle des cyanures, les principaux mécanismes potentiels sont : la volatilisation, la précipitation, l'adsorption, l'oxydation chimique, l'hydrolyse chimique, la dilution et la biodégradation. Ces mécanismes sont définis au chapitre 1.

Une meilleure compréhension des mécanismes naturels se produisant sur un site aura un impact sur la gestion future de ce dernier. Ainsi, l'étude fournira des pistes sur le devenir des cyanures, son potentiel d'atténuation naturelle et les différentes caractéristiques à privilégier si l'utilisation d'autres techniques de réhabilitation sont envisagées.

Ce mémoire est divisé en cinq chapitres. Le premier chapitre renferme la revue de la littérature et présentera les sources de cyanure dans l'environnement, la chimie des cyanures, leur toxicité, différentes méthodes de traitement existantes et l'évaluation des mécanismes d'atténuation naturelle potentiels. Cette revue a contribué au choix des mécanismes qui ont été étudiés de façon plus approfondie par des essais en laboratoire ou des modélisations.

Le deuxième chapitre présente l'hypothèse de recherche et les principaux objectifs du projet. Dans le troisième chapitre, les caractéristiques géographiques et historiques du site étudié sont exposées et le choix des processus d'atténuation naturelle y est décrit. Les chapitres subséquents, 4, 5 et 6 sont consacrés à l'étude des différents mécanismes retenus. Le chapitre quatre concerne la caractérisation et la modélisation d'équilibre de l'eau souterraine échantillonnée. Dans le chapitre 5, les essais d'adsorption sont décortiqués, notamment en y présentant la méthodologie employée de même que les principaux résultats obtenus. Et finalement, le chapitre 6 traite des essais de biodégradation en macrocosmes. Les conclusions de chaque section sont reprises lors d'une conclusion générale et suivis d'une série de recommandations pour la poursuite des travaux de recherche.

CHAPITRE 1 - REVUE DE LA LITTÉRATURE

1.1 LES SOURCES DE CYANURES DANS L'ENVIRONNEMENT

Les cyanures sont produits naturellement par certaines plantes et microorganismes cyanogéniques. Toutefois, leur présence dans l'environnement au-dessus des seuils de toxicité est attribuable aux activités industrielles (Meeussen et al. 1992). Ces activités varient de la production d'aluminium ou aurifère au placage des métaux et à la production de gaz. Ils sont utilisés par ces industries principalement pour leur habilité à former des complexes stables avec une grande variété de métaux. Qu'ils soient utilisés comme réactif ou générés comme sous-produit, les cyanures sont majoritairement introduits dans l'environnement lors de la dissolution de déchets solides (résidus miniers acides, brasques usées, etc.) (Smith et Mudder 1991).

1.1.1 Production naturelle des cyanures

Plusieurs plantes supérieures et un certain nombre de microorganismes (bactéries, champignons, algues) ont la capacité de produire de l'acide cyanhydrique (HCN). En tout, plus de 800 espèces de plantes peuvent synthétiser des composés cyanogéniques et libérer du HCN. Dans le cas des microorganismes, la première démonstration de formation de HCN a été réalisée par von Losecke en 1871 lorsqu'il a observé cette molécule chez le champignon *Marasimus oreades*.

Par contre, les concentrations dépassant les niveaux toxiques ne sont retrouvées que sur des sites contaminés par l'activité humaine, la production naturelle de cyanure ne constituant pas alors un risque pour la santé humaine, de la faune et de la flore.

1.1.2 Industrie aurifère

Le principe de la cyanuration, utilisé depuis la fin du 19e siècle, consiste à mélanger le minerai broyé avec une solution alcaline de cyanure de sodium. Le cyanure dissout l'or et le maintien en solution sous forme d'un sel complexe soluble. Cette solution sera ensuite séparée du solide par filtration et l'or est récupéré (Libaude 1994). Trois types de processus d'extraction de l'or par les cyanures sont utilisés : le procédé Merill Crowe, le procédé Zadra et la cyanuration en tas.

Le procédé Merill Crowe est le plus utilisé. Environ 0,2 à 1 kg de cyanure de sodium y est nécessaire par tonne de minerai. Le mécanisme global de cyanuration est le suivant, décrit par la réaction d'Elsner :

$$4\ Au + 8\ NaCN + O_2 + 2\ H_2O \rightarrow 4\ Na(Au(CN)_2)\ (aq) + 4\ NaOH \qquad (1.1)$$

La récupération de l'or se fait ensuite à l'aide du zinc, qui remplace l'or pour former un nouveau complexe :

$$2\ Na(Au(CN)_2) + Zn \rightarrow Na_2Zn(CN)_4 + 2\ Au \qquad (1.2)$$

Les résidus engendrés par ce procédé sont appelés résidus miniers. Ils contiennent du cyanure qui est ainsi relâché dans l'environnement.

1.1.3 Industrie de plaquage de métaux

Les procédés de trempe, de finissage et de plaquage des métaux produisent la plus grande proportion de rejets cyanurés rejetés dans l'environnement. Le cyanure est utilisé lors d'un procédé de décapage préalable au plaquage pour retirer les substances

étrangères indésirables de la surface des métaux. Le cyanure de sodium est principalement utilisé. Les électrolytes employés dans la cellule d'électrolyse lors du procédé de placage, où le métal à plaquer constitue la cathode, sont des complexes cyanurés de cuivre, de cadmium, de zinc ou d'argent (Dumestre 1995).

1.1.4 Production d'aluminium

La contamination en cyanures des eaux souterraines sur les sites des alumineries provient de la lixiviation de ceux-ci à partir des brasques usées enfouies sur un site d'enfouissement. En 2002, la production nord-américaine de brasques usées a atteint 5,4 millions de tonnes (International Aluminium Institut 2002). Celles-ci forment le revêtement intérieur des cuves d'électrolyse (voir figure 1.1) où l'aluminium est produit par la réduction de l'alumine (Al_2O_3) en aluminium par le passage d'un courant électrique circulant de l'anode à la cathode. Ce procédé s'appelle procédé de Hall-Héroult.

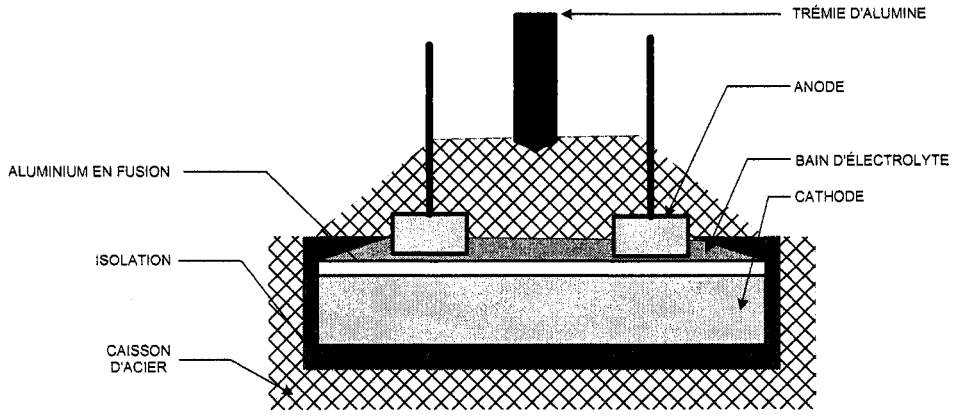


Figure 1.1 : Cuve électrolytique (Godin 2004)

Ces cuves mesurent habituellement 9m de long par 4m de large pour environ 1,5m de profond et consistent en un caisson d'acier ayant un revêtement formé de briques réfractaires sur lesquelles viennent se déposer des blocs de carbone précuit. Ces blocs

de carbone constituent la cathode (électrode positive) alors que les briques isolent thermiquement la cuve.

L'alumine introduite dans les cuves y est dissoute dans un bain de cryolithe (Na_3AlF_6) à environ 950°C (International Aluminium Institut 2002). Du fluorure d'aluminium est ajouté régulièrement afin de maintenir la composition chimique du bain constante. L'aluminium formé se dépose dans la cuve puis est acheminé vers le centre de coulée (Godin 2004).

Tout au long du procédé, la cathode de carbone accumule différents produits chimiques dont les cyanures. Ce faisant, elle se dégrade, est brisée par les composés en fusion et se lie aux briques. La cathode doit alors être remplacée. Pour ce faire, les cellules doivent être vidées, refroidies et les couches intérieures retirées et, finalement, remplacées. Le remplacement des brasques est nécessaire en moyenne à tous les 5 ans (Bureau d'audiences publiques sur l'environnement 1997). Ces rejets, appelé brasques usées, sont composés principalement de carbone, fluor, aluminium et sodium, avec une petite quantité de calcium, silicate, fer et cyanure (Dillon 2001; Golder Associates 2001).

Pour chaque tonne d'aluminium produite, de 20 à 35 kg de brasques usées sont générées, dépendamment de la technologie utilisée et de l'âge des installations de production (Paradis 1998). La concentration en cyanure des brasques est d'environ 400 ppm. Jusqu'aux années 1980, ces brasques étaient généralement enfouies dans un site d'enfouissement à proximité du site de production. Puis, les brasques usées ont été désignées *matière dangereuse résiduelle* en vertu du *Règlement sur les matières dangereuses* adopté en 1997 au Québec, et selon un règlement équivalent en Colombie-Britannique. Au Canada, depuis la modification de la réglementation, l'enfouissement des brasques a cessé et les compagnies ont majoritairement opté pour un entreposage dans des bâtiments aérés ou encore pour un traitement thermique ou physico-chimique préalable à un enfouissement sécuritaire.

1.2 CHIMIE DES CYANURES

Cyanure est un terme général faisant référence à tous les composés contenant le groupe cyanure –CN. Les cyanures existent dans l'environnement sous différentes phases : gazeuse, aqueuse et solide. Le tableau suivant résume les principales formes de cyanure rencontrées dans l'environnement.

Tableau 1.1 : Espèces de cyanure (adapté de Kjeldsen 1999; Smith et Mudder 1991)

Formule chimique	Nom	Phase	Description
CN^-	Ion cyanure	Aqueuse	Composant de base
HCN	Acide cyanhydrique	Gazeuse, aqueuse	Forme acide
NaCN, KCN, $Ca(CN)_2$	Cyanure de sodium, cyanure de potassium...	Solide	Sels Très soluble
$Fe(II)(CN)_6^{-4}$	Ferrocyanure	Complexe aqueux	Complexe stable en solution, conditions réductrices
$Fe(III)(CN)_6^{-3}$	Ferricyanure	Complexe aqueux	Complexe stable en solution, conditions oxydantes
$Me(CN)_N^{-N}$	Complexes métallocyanures	Complexes aqueux	Complexes formés avec les métaux de transition
$Fe(III)_4(Fe(II)(CN)_6)_3$	Ferri-ferrocyanure, Bleu de Prusse	Solide	Produit de précipitation insoluble, conditions oxydantes
$Fe(II)_3(Fe(III)(CN)_6)_2$	Ferro-ferricyanure, Bleu de Turnbull	Solide	Produit de précipitation insoluble, conditions réductrices
$Me(Fe(CN)_6)$	ex. Ferrocyanure de cuivre, de nickel, etc.	Solide	Produit de précipitation insoluble
CNO^-	Cyanate	Anion aqueux	Forme oxydée du cyanure, réaction catalysée
SCN^-	Thiocyanate	Complexe aqueux	Produit de complexation avec le soufre

La spéciation des cyanures varie selon leur source. Les formes les plus communes de cyanure dans l'environnement sont les cyanures libres, les complexes métallocyanures (incluant les complexes fer-cyanures), les cyanates, les thiocyanates et les nitriles synthétiques.

1.2.1 Cyanures libres

Cette catégorie comprend l'acide cyanhydrique (HCN) et l'ion cyanure (CN^-). Ces derniers forment l'espèce de cyanure la plus réactive et également la plus toxique.

La spéciation du cyanure libre dépend du pH. Ainsi, dans une solution aqueuse, les proportions relatives d'ions CN^- et d'acide cyanhydrique (HCN) changeront en fonction du pH (voir fig. 1.2) et peuvent être calculées théoriquement à partir de l'équation 1.3.1 et 1.3.2. À un pH équivalent à la valeur du pK_a, les molécules CN^- et HCN sont en quantité égales à l'équilibre tandis qu'à un pH plus élevé, la proportion d'ions CN^- sera plus importante, et inversement à pH plus faible, la solution sera dominé par la forme acide (HCN).

$$HCN \rightarrow H^+ + CN^- \qquad (1.3.1)$$

$$K_a = [H^+][CN^-]/[HCN] = 2.03E\text{-}10 \; ; \; pK_a = 9,2 \qquad (1.3.2)$$

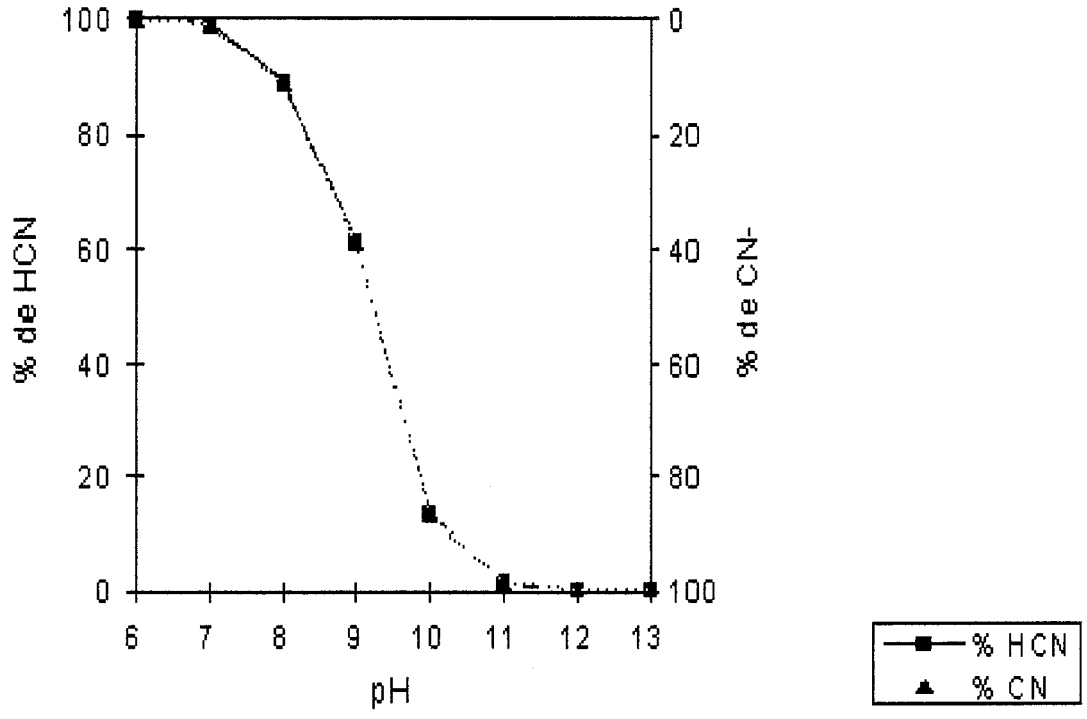


Figure 1.2 : Spéciation du cyanure libre en fonction du pH (Smith et Mudder 1991)

Les ions de cyanures libres (CN^-) sont extrêmement mobiles se comportant comme un halogène en solution (ex. Cl^-) (Ghosh et al. 1999a). De plus, ceux-ci formeront aisément des complexes avec les ions métalliques présents en solution (voir sels cyanurés, cyanures complexés).

L'acide cyanhydrique est très volatil et possède une constante de Henry de 0,11 atm*L/mol à 25°C (ATSDR 1997). Cette caractéristique est très importante à considérer pendant la réalisation d'étude portant sur le devenir du cyanure.

1.2.2 Sels cyanurés

Les cyanures peuvent former des sels en créant des liens avec des cations métalliques, tels le sodium et le potassium (NaCN, KCN). Ils sont électriquement neutres et se solubilisent complètement en solution, entraînant la libération d'ions CN^-, ce qui en augmente d'autant la toxicité.

Les sels sont très réactifs, ainsi l'oxygène les oxyde en cyanates, les acides en libèrent l'acide cyanhydrique et l'acide nitrique les transforme en nitrates en libérant l'azote et en oxydant le carbone en gaz carbonique (CO_2) (Brun 1925).

1.2.3 Cyanures complexés

Des liens peuvent également se former avec des métaux de transition (Zn, Cd, Cu, Ni, Ag), mais ces derniers sont très peu solubles et n'entraînent pas la libération d'ions CN^- en solution puisque le métal de transition et les cyanures demeurent liés, comme par exemple dans l'équation 1.4, le potassium de ferricyanure (Smith et Mudder 1991).

$$K_3Fe(CN)_6 \Longleftrightarrow 3\ K^+ + Fe(CN)_6^{-3} \qquad (1.4)$$

La figure 1.3 donne les valeurs des constantes de stabilité des principaux métallocyanures. Plus la constante est élevée, plus le complexe est stable.

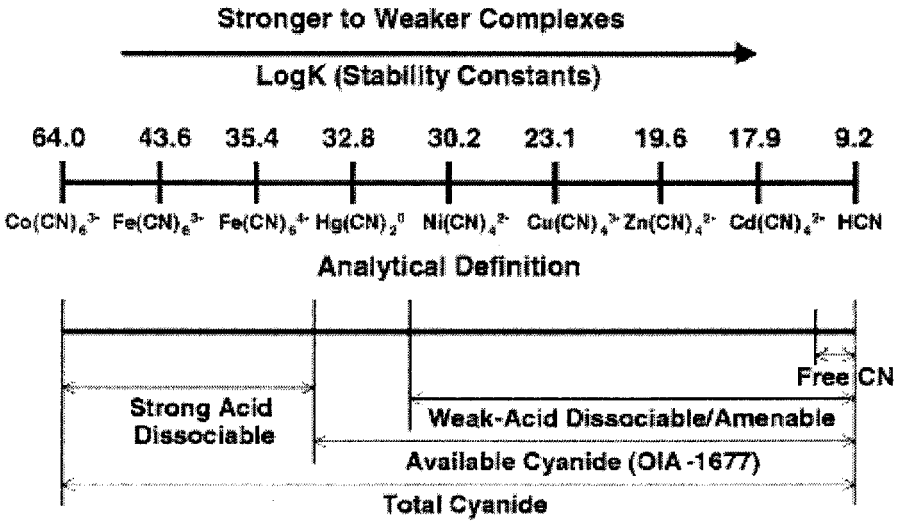


Figure 1.3 : Constantes de stabilité de différents complexes (Ghosh et al. 2004)

Les complexes sont classifiés comme «forts» ou (*Strong acid dissociable*, CN_{SAD}) ou de «facilement dissociables» (*Weak acid dissociable*, CN_{WAD}) selon la valeur de leur constante de stabilité. Parmi les CN_{WAD}, on retrouve le $Cd(CN)_4^{-2}$, le $Zn(CN)_4^{-2}$ et le $Ni(CN)_4^{-2}$ alors que les complexes formés avec le fer ($Fe(CN)_6^{-3}$ et $Fe(CN)_6^{-4}$), l'or ($Au(CN)_4^-$) et le cobalt ($Co(CN)_6^{-4}$) sont des CN_{SAD}.

Les complexes formés avec le fer (ferrocyanure $Fe(CN)_6^{-4}$ et ferricyanure $Fe(CN)_6^{-3}$) sont parmi les plus forts et les plus abondants. Ils sont reconnus pour leur extrême stabilité en absence de lumière (Smith et Mudder 1991) et représentent souvent l'espèce dominante dans l'eau souterraine (Ghosh 1998, Meeussen et al. 1992, Zagury et al. 2004, Theis et al. 1994). Cela peut indiquer que la spéciation du cyanure est déterminée par des cinétiques de décomposition et non pas par l'équilibre chimique (Meeusen et al. 1992). Plus le pH et le potentiel redox sont élevés, plus la demi-vie des ferrocyanures augmente, et ce de façon exponentielle. Celle-ci varie de quelques jours à quelques dizaines de milliers d'années (Raybuck 1992, Meeussen et al. 1992, Dzombak et al. 1997, Ghosh et al. 1999a,b)

1.2.4 Thiocyanates

En présence de soufre en solution, les cyanures peuvent également former des thiocyanates (SCN^-), moins toxiques que les cyanures libres. L'ion thiocyanate a un comportement similaire à l'ion cyanure et se comporte comme un halogène, donc est peu adsorbé. Les thiocyanates sont dégradables par voies biologiques et chimiques (Smith et Mudder 1991).

1.2.5 Cyanates

Lorsque le cyanure est en présence d'un oxydant, tel que le chlore, l'hypochlorite, l'ozone, l'oxygène et le peroxyde d'hydrogène, il s'oxyde en cyanate (CNO^-). Ces réactions constituent la base des traitements chimiques conventionnels de dépollution des cyanures car les cyanates sont moins toxiques que les cyanures libres et peuvent se dégrader davantage en dioxyde de carbone et en ammoniac en milieu acide ou en présence d'agents oxydants résiduels.

1.2.6 Cyanures totaux

La nomenclature «cyanures totaux», CN_{TOT}, comprend tous les composés contenants du cyanure, c'est-à-dire les cyanures libres, les complexes avec les métaux (les simples et les forts) et les cyanoglycosides, mais n'inclut pas les thiocyanates, quelques nitriles et les complexes avec Au et Pt. Il est possible d'obtenir la concentration en CN_{SAD} en soustrayant de la valeur de la concentration en CN_{TOT} obtenue les concentrations en cyanures libres et en CN_{WAD}.

1.3 TOXICITÉ DES CYANURES

La toxicité des cyanures est liée au blocage des fonctions respiratoires cellulaires puisqu'il se lie au cytochrome c oxidase (Smith et Mudder 1991). Chez l'humain, la dose quotidienne de cyanures libres sans risque pour la santé est de 20 µg/kg de masse corporelle (ATSDR 1997).

Les effets possibles d'une intoxication aux cyanures sont aigus et chroniques. Les effets aigus sont normalement associés avec une mortalité immédiate observée chez les organismes exposés à des concentrations élevées. La toxicité chronique quant à elle inclut également la mort, mais aussi une limitation de la croissance, une reproduction réduite et d'autres déformations physiques. En raison des effets aigus, les cyanures ne s'accumulent pas ou très peu dans les tissus. À l'heure actuelle, il n'y a pas d'évidence d'effet tératogène, mutagène ou cancérigène (ATSDR 1997; USEPA 1992).

Les études indiquent que la toxicité des cyanures augmente avec la température (Smith et Mudder 1991) et avec la salinité (Scott et Ingles 1987). Par exemple, les truites et les saumons sont très sensibles à une température élevée (20°C et plus).

La spéciation joue un très grand rôle dans la toxicité des cyanures. Le cyanure libre sous forme de HCN ou de CN^- est facilement est rapidement absorbé par inhalation, ingestion ou contact cutané. La dose mortelle est estimée à 0,5-3,5 mg/kg de masse corporelle (Meehan et al. 1999). Le niveau de dosage par ingestion jugé sans effet par le USEPA est de 0,06 mg par kg de masse corporelle. En comparaison, la dose mortelle pour les thiocyanates se situe autour de 50 à 80 mg par kg de masse corporelle. Dans le cas des complexes de fer-cyanures, ils sont peu toxiques (Shifrin et al 1996). Ceci s'explique par le fait qu'ils sont peu absorbés dans le corps humain. Des doses allant jusqu'à 2 g de ferrocyanure par jour pour un adulte n'est pas considéré dommageable (Nielsen et al. 1990).

Par contre, puisque la dissociation des complexes métallocyanures entraîne généralement un dégagement de cyanures libres, très toxiques, ils doivent être considérés dans l'analyse de risque. Par exemple, les complexes fer-cyanures se dissocient en présence de la lumière (rayons UV) pour former des cyanures libres.

1.4 PROCÉDÉS DE TRAITEMENT DES CYANURES

Le choix de la technologie la plus appropriée pour la décontamination de l'eau souterraine contaminée aux cyanures peut dépendre de plusieurs facteurs tels la présence d'une contamination mixte, de conditions hydrauliques et stratigraphiques complexes ainsi que de volumes imposants à traiter. Par exemple, la stratigraphie d'un site comporte souvent des incertitudes qui se reflètent dans l'efficacité potentielle de l'assainissement.

Plusieurs méthodes physiques, d'adsorption, de complexation et/ou d'oxydation existent pour traiter le cyanure. Ces méthodes impliquent surtout des procédés de séparation ou de destruction et peuvent parfois se produire de façon naturelle. Les procédés de séparation incluent les méthodes physiques, d'adsorption et de complexation utilisées pour concentrer et récupérer le cyanure alors que les procédés de destruction sont souvent associés aux méthodes d'oxydation et sont largement plus utilisés. Ces dernières sont utilisées pour briser le lien triple entre le carbone et l'azote, produisant ainsi des espèces moins toxiques (Young et Jordan 1995).

En plus de ces techniques classiques, l'utilisation de barrières réactives, de combinaison de traitement chimique et biologique ainsi que l'atténuation naturelle sont de nouvelles voies envisagées pour le traitement des sites contaminés aux cyanures.

1.4.1 Méthodes physiques

Les méthodes physiques pour le traitement des cyanures en phase aqueuse se divisent en sous-catégories : la dilution, les membranes, l'électro-réduction et la distillation.

Dilution

La dilution est un procédé relativement simple et peu onéreux, mais est habituellement considérée comme inacceptable puisque la quantité totale de cyanures n'est pas modifiée par ce traitement. Il implique la combinaison d'un rejet de cyanure toxique avec un effluent avec peu ou pas de cyanure pour produire un rejet liquide respectant les normes.

Membranes

Les cyanures peuvent être séparés de l'eau par l'entremise d'une membrane d'osmose inverse ou une membrane d'électrodialyse. Dans le premier cas, une pression est appliquée à la solution contenant le cyanure forçant l'eau de l'autre côté de la membrane qui est imperméable au cyanure. Dans le deuxième cas, un potentiel électrique est appliqué entre 2 électrodes séparés par une membrane perméable au cyanure, celui-ci passant de la cellule négative à la cellule positive puisqu'il est chargé négativement. Cette méthode est applicable pour des solutions contenant des cyanures libres et des complexes métallocyanures.

Électro-réduction

L'électro-réduction réduit les complexes métallocyanures par l'implantation d'un potentiel électrique entre deux électrodes immergées dans la même solution selon la réaction 1.5.

$$M(CN)_x^{y-x} + y\acute{e}^- \rightarrow M^0 + x\ CN^- \qquad (1.5)$$

La production de cyanure libre induit cependant des méthodes de traitement subséquentes.

Distillation

La distillation est possible puisque l'acide cyanhydrique (HCN) possède une pression de vapeur à 26°C de 100 kPa (comparativement à 34 kPa pour l'eau) et possède une température d'ébullition de 79°C (comparativement à 100°C pour l'eau). Le HCN peut être, lors d'une distillation, capturé et récupéré dans une tour d'adsorption par une solution alcaline d'hydroxyde de sodium selon les réactions suivantes (Goldstonee et Mudder 1998; Botz et al 1995; Omofona et Hampton 1992) :

$2\ CN^- + H_2SO_4 \rightarrow 2\ HCN(aq) + 2\ SO_4^{-2}$	(acidification)	(1.6)
$HCN(aq) \rightarrow HCN(g)$	(«stripping»)	(1.7)
$HCN(g) + NaOH \rightarrow NaCN + H_2O$	(absorption)	(1.8)

Cette méthode a été utilisé aux installations de Golconda C.R.P. et a permis de réduire les niveaux de cyanure total de 200 mg/L et 10-30 mg/L à moins de 5 mg/L et de 0,50 mg/L respectivement. La distillation se produit de façon naturelle dans les résidus miniers. Par contre, les cyanures SAD, WAD et les thiocyanates ne peuvent être éliminés par cette méthode.

1.4.2 Méthodes de complexation

Parmi les méthodes de complexation, se retrouve : l'acidification, l'addition de métaux, la flottation et l'extraction par solvant.

Acidification

Selon l'équation 1.3, le HCN prédomine sur le CN^- à un pH inférieur à 9,2. L'acidification consiste à abaisser le pH à environ 1,5 à 2 de sorte que les cyanures CN_{WAD} se dissocient en cyanure libre et que tout le cyanure libre présent soit sous la forme gazeuse (HCN). La volatilisation réduit ensuite progressivement la concentration. Cette technologie a été implantée à la mine Real del Monte au Mexique et chez CANMET au Canada.

Addition de métaux

Globalement, l'addition de métaux consiste à transformer un complexe fort (CN_{SAD}) par un complexe faible (CN_{WAD}) plus facilement décomposable par d'autres procédés, tel que l'acidification. Par exemple, à l'équation 1.9, le procédé Merrill-Crowe, utilisé pour l'extraction de l'or :

$$2\ Au(CN)_2^- + Zn^0 \rightarrow 2\ Au^0 + Zn(CN)_4^- \qquad (1.9)$$

L'addition de métaux n'est pas une méthode pouvant être utilisée seule.

Flottation

La flottation a été développée en 1880 dans le but de concentrer les minéraux. Lors de la flottation, une amine cationique est ajoutée au complexe CN_{SAD} pour que ces derniers réagissent et forment un précipité organique qui peut être séparé ensuite par l'injection de bulles d'air dans le système. Ce procédé est peu efficace pour les CN_{WAD}.

Extraction par solvant

L'extraction par solvant consiste à transférer de la phase aqueuse à la phase organique les cyanures par l'ajout d'un solvant organique immiscible. La phase aqueuse et la phase organique sont ensuite séparées. Également, cette méthode d'extraction par

solvant fait partie de la procédure de détection analytique de cyanure utilisée en colorimétrie.

1.4.3 Méthodes d'adsorption

Les cyanures sont adsorbés de leur solution par des minéraux, le charbon activé et des résines. L'adsorption peut se produire dans différents types de réservoirs tels que les colonnes d'élutriation, les cellules d'agitation, les colonnes garnies, etc. Une fois le cyanure adsorbé, le matériel est séparé de la solution par le tamisage, la gravité ou la flottation. Il est ensuite placé dans un autre contenant où le cyanure est désorbé dans une solution à plus petit volume, donc concentrée. Finalement, l'adsorbant est séparé à nouveau et habituellement réactivé et recyclé pour usage futur.

Des concentrations en cyanure de moins de 0,50 mg/L ont été obtenues à l'aide de colonnes d'adsorption avec un affluent de cyanure de cuivre de 75 mg/L. Cependant, les coûts associés au procédé limite ce dernier à une utilisation pour des faibles niveaux de concentration en cyanure, de l'ordre de 2 mg/L, provenant souvent d'un traitement antérieur (Smith et Mudder 1991) .

1.4.4 Les méthodes d'oxydation

Sauf dans le cas de la dilution, tous les procédés ci-haut mentionnés génèrent un rejet à haute concentration qui doit être traité car les espèces toxiques de cyanures y sont toujours présentes. Pour traiter les effluents liquides contaminés aux cyanures, une méthode subséquente d'oxydation est nécessaire. Voici quelques réactions d'oxydation (Botz 2001):

Procédé INCO – Soufre et air

$$SO_2 + O_2 + H_2O + CN^- \xrightarrow{Cu2+ - Catalyseur} OCN^- + SO_4^{-2} + 2\ H^+ \quad (1.10)$$

Le procédé INCO a été appliqué avec succès pour le traitement de plus de 70 effluents différents contenant du cyanure et des métaux et est très utilisé en Amérique du Nord.

Peroxyde d'hydrogène

$$H_2O_2 + CN^- \xrightarrow{Cu2+ - Catalyseur} OCN^- + H_2O \quad (1.11)$$

Le niveau de traitement dépend de la concentration initiale en cyanure et en métaux de l'eau usée. Par exemple, des effluents avec des concentration en CN_{WAD} de 250 mg/L, 100 mg/L, 50 mg/L et 10 mg/L ont été traités jusqu'à des niveaux de 2,0 mg/L, 0,5 mg/L, 0,30 mg/L et 0,04 mg/L respectivement (Smith et Mudder, 1991). Ce procédé est utilisé présentement comme traitement primaire dans plusieurs mines en Amérique du Nord et ailleurs.

L'acide de Caro – Peroxymonosulfurique

$$H_2SO_5 + CN^- \rightarrow OCN^- + SO_4^{-2} + 2\ H^+ \quad (1.12)$$

L'acide de Caro est utilisé dans un procédé développé récemment et utilisé à quelques sites. Il est utilisé lorsque l'utilisation d'un catalyseur de cuivre n'est pas souhaitée.

Chloration alcaline

$$Cl_2 + CN^- \rightarrow CNCl + Cl^- \quad (1.13)$$

$$CNCl + H_2O \rightarrow OCN^- + Cl^- + 2\ H^+ \quad (1.14)$$

$$OCN^- + 3\ H_2O \xrightarrow{Cl2\text{-}Catalyseur} NH_4^+ + HCO_3^- + OH^- \quad (1.15)$$

La chloration alcaline a déjà été le procédé utilisé à plus grande échelle mais a graduellement été remplacé par d'autres procédés et n'est maintenant utilisé qu'occasionnellement. Le procédé permet d'obtenir de bas niveaux de cyanures mais les réactifs utilisés le rendent très coûteux.

De nos jours, l'oxydation avec du peroxyde d'hydrogène ou de l'ozone est préférée. Toutefois, cette méthode n'est pas économique si l'eau souterraine contient d'autres substances pouvant être oxydées tes que les sulfates, les nitrites, les ions ferreux et les composés organiques. Ces substances consomment l'agent oxydant ce qui augmente la quantité nécessaire d'agent pour le traitement (Morper 1999).

1.4.5 Précipitation des complexes fer-cyanures

Les cyanures libres et les CN_{WAD} réagiront tous avec le fer pour former une variété de composés soluble et insoluble, principalement de l'hexacyanoferrate (III) ($Fe(CN)_6^{-3}$), du Bleu de Prusse ($Fe_4(Fe(CN)_6)_3$) et d'autres métallocyanures insolubles ($M_xFe_y(CN)_6$) comme par exemple avec le cuivre ou le zinc (Adams 1992). La formation de complexes de ferrocyanure et de ferricyanure réduit la quantité de cyanures libres dans l'eau et en diminue ainsi la toxicité (Ghosh 1998). Ces complexes sont caractérisés par une faible solubilité et une grande stabilité en absence de lumière et à pH neutre.

$$Fe^{2+} + 6\ CN^- + \tfrac{1}{4}\ O_2 + H^+ \rightarrow Fe(CN)_6^{-3} + \tfrac{1}{2}\ H_2O \qquad (1.16)$$

$$4\ Fe^{2+} + 3\ Fe(CN)_6^{-3} + \tfrac{1}{4}\ O_2 + H^+ \rightarrow Fe_4(Fe(CN)_6)_3 + \tfrac{1}{2}\ H_2O \qquad (1.17)$$

Ce procédé de précipitation a été étudié pour la première fois à grande échelle à la mine d'or Cominco Ltd située près du Grand Lac de l'Esclave. Des concentrations de 750 mg/L ont pu être réduites à 0,7 mg/L (Smith et Mudder 1991).

Par contre, le procédé de précipitation des complexes fer-cyanures est limité dans son utilisation aux situations où la réaction de précipitation peut être contrôlée et où les solides précipités peuvent être séparés et disposés correctement. Ce procédé est optimal lorsqu'il est effectué à un pH entre 5,0 et 6,0 et que le fer est ajouté sous forme de sulfate ferreux ($FeSO_4$-7 H_2O) (Dzombak et al 1996). Il est également possible de créer

des barrières réactives de fer qui complexera les cyanures la traversant, entraînant la précipitation de complexes (Ghosh 1998).

1.4.6 Combinaison chimique et biologique

L'élimination d'importantes concentrations en cyanures peut se faire à température ambiante par la combinaison de réactions chimiques et biologiques. Tout d'abord, il est possible d'obtenir un cyanohydrine par la réaction entre le cyanure et un aldéhyde ou un cétone (Morper 1999). Le formaldéhyde est l'aldéhyde le plus simple et forme du glyconitrile (formaldéhyde-cyanohydrin) lorsqu'il réagit avec le cyanure. L'élimination complète des cyanures s'effectue alors par une chaîne de réactions chimiques et biologiques. Les réactions chimiques 1.18, 1.21et 1.26 sont combinées avec les réactions biologiques 1.19, 1.20, 1.22, 1.23, 1.24, 1.25. L'équation de synthèse 1.27 montre que l'oxygène est le seul réactif qui doit être ajouté.

$$6\ CN^- + 6\ CH_2O + 6\ H_2O \rightarrow 6\ HOCH_2CN + 6\ OH^- \quad (1.18)$$

$$6\ HOCH_2CN + 6\ H_2O \rightarrow 6\ HOCH_2C(O)NH_2 \quad (1.19)$$

$$6\ HOCH_2C(O)NH_2 + 6\ H_2O \rightarrow 6\ HOCH_2CO_2H + 6\ NH_3 \quad (1.20)$$

$$6\ NH_3 + 6\ H_2O \rightarrow 6\ NH_4^+ + 6\ OH^- \quad (1.21)$$

$$6\ NH_4^+ + 9\ O_2 \rightarrow 6\ NO_2^- + 12\ H^+ + 6\ H_2O \quad (1.22)$$

$$6\ NO_2^- + 3\ O_2 \rightarrow 6\ NO_3^- \quad (1.23)$$

$$5\ HOCH_2CO_2H + 6\ NO_3^- \rightarrow 10\ CO_2 + 3\ N_2 + 7\ H_2O + 6\ OH^- \quad (1.24)$$

$$HOCH_2\text{-}CO_2H + 1{,}5\ O_2 \rightarrow 2\ CO_2 + 2\ H_2O \quad (1.25)$$

$$\underline{6\ OH^- + 6\ CO_2 \rightarrow 6\ HCO_3^-} \quad (1.26)$$

$$6\ CN^- + 6\ CH_2O + 13{,}5\ O_2 \rightarrow 6\ CO_2 + 3\ N_2 + 3\ H_2O + 6\ HCO_3^- \quad (1.27)$$

1.4.7 L'atténuation naturelle

La gestion par l'atténuation naturelle est de plus en plus considérée comme une alternative économique aux procédés d'ingénierie pour l'assainissement des aquifères contaminés. Une revue des différents mécanismes d'atténuation naturelle des cyanures dans l'eau souterraine est présentée à la section suivante.

1.5 ATTÉNUATION NATURELLE DES CYANURES DANS L'EAU SOUTERRAINE

Plusieurs phénomènes physiques, chimiques et biologiques peuvent entraîner une diminution naturelle de la concentration en cyanure dans l'eau souterraine. Parmi eux, les plus importants sont la biodégradation, l'adsorption, la précipitation, l'oxydation chimique, l'hydrolyse, la volatilisation et la photolyse. L'atténuation naturelle offre une alternative intéressante aux méthodes traditionnelles de pompage et traitement de l'eau souterraine.

Par contre, selon Christensen et al (2000), il est indispensable de démontrer quantitativement, lorsque l'atténuation naturelle doit être employée, que les polluants du panache sont sujets à une réduction de masse.

1.5.1 La précipitation

Les complexes fer-cyanures sont généralement peu solubles. Les conditions de pH et de redox (voir figure 1.4), qui peuvent varier dans le temps, dicteront la solubilité du Bleu

de Prusse et du Bleu de Turnbull, les deux principaux solides de cyanures qui sont retrouvés.

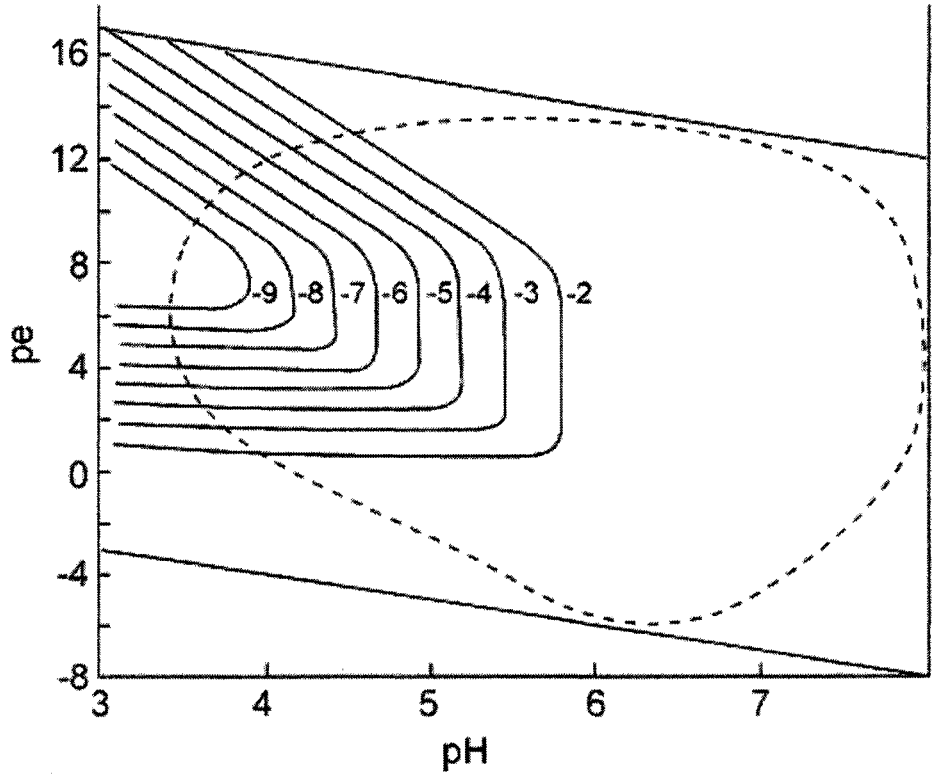


Figure 1.4 : Concentration totale en $Fe(CN)_6$ (mol/L) en équilibre avec le Bleu de Prusse et les hydroxydes de fer en fonction du pH et du pe.

(Basé sur une concentration totale de fer-cyanures de 0,1M et une concentration en fer total de 1M et une force ionique de 0,03M. Les lignes diagonales indiquent les conditions de stabilité thermodynamique de l'eau tandis que la ligne pointillée définie les conditions environnementalement pertinentes. (Meeussen et al 1994))

Dans des sols peu réduits ou oxydés, la réaction de dissolution du Bleu de Prusse est définie par :

$$Fe_4(Fe(CN)_6)_3(s) + 12\ H_2O + 3é \longrightarrow 4\ Fe(OH)_3(s) + 3\ Fe(CN)_6^{3-} + 12\ H^+ \quad (1.28)$$

1.5.2 L'adsorption

Les espèces aqueuses de cyanure sont toutes anioniques (à l'exception du HCN) et s'adsorberont alors seulement sur les sols possédant une grande capacité d'échange anionique. La majorité des particules de sols ont par contre une faible capacité d'échange anionique. Selon Ghosh (1998), les cyanures se comportent comme des espèces non réactives dans l'eau souterraine et ne s'adsorbent pas dans un milieu sableux, à pH neutre. Toutefois, plusieurs surfaces peuvent fournir des sites d'échange d'anions lorsque le pH est faible (McLean et Bledsoe 1992) :

- oxydes (fer, manganèse et aluminium)
- carbonates
- minéraux argileux
- matière organique

Alesii et Fuller (1976) ont réalisé des tests d'adsorption pour étudier la mobilité des cyanures dans 5 types de sol. Les résultats de cette étude montrent que les sols avec de fortes concentrations en manganèse et en hydroxydes de fer possèdent une plus grande capacité de rétention des cyanures. Les auteurs concluent que les sols chargés positivement (ex. kaolinite, chlorite, gibbsite, fer, oxydes d'aluminium) adsorbent mieux les cyanures que ceux chargés négativement (ex. montmorillonite). Bushey et Dzombak (2003) ainsi que Cheng et Huang (1995) ont étudié l'adsorption des ferrocyanures sur les oxydes d'aluminium et montrent que les ferrocyanures peuvent s'adsorber de façon significative sur ces surfaces lorsque le pH est acide. Rennert et Manfeldt (2002) affirment cependant que l'adsorption sur les oxydes d'aluminium et de fer, bien qu'elle ne peut être exclue, est faible à pH faiblement alcalin, tandis que Theis et West (1986) ont remarqué peu d'adsorption sur des oxydes de fer à pH neutre.

L'adsorption des cyanures sur les sols fait aussi en sorte que ces derniers accumulent des quantités pouvant devenir importante de cyanures. Ce cyanure peut, si les conditions géochimiques se modifient, être désorbés et dès lors ces sols agissent comme une source de cyanure pour l'eau souterraine (Meehan 2000).

1.5.3 Biodégradation

Des études ont démontré que la biodégradation des différentes espèces de cyanures est un mécanisme d'atténuation naturelle qui peut avoir lieu en conditions aérobies et anaérobies et en présence de plusieurs espèces bactériennes différentes (Dubey et Holmes 1995; Cherryholmes et al 1985; Wang et al 1996). Dans le cas des conditions anaérobies, les cyanures constituent une source d'azote ou de carbone pour les microorganismes.

Meehan (2000) a étudié la biodégradation des cyanures en conditions aérobies et anaérobies dans l'eau souterraine à l'aide de colonnes et Oudjehani et al (2002) a démontré un potentiel pour des microorganismes indigènes de minéraliser le cyanure libre, suggérant ainsi un rôle au métabolisme microbien dans l'atténuation naturelle de résidus miniers contaminés aux cyanures.

La figure 1.5 résume les réactions de biodégradation possible pour les cyanures.

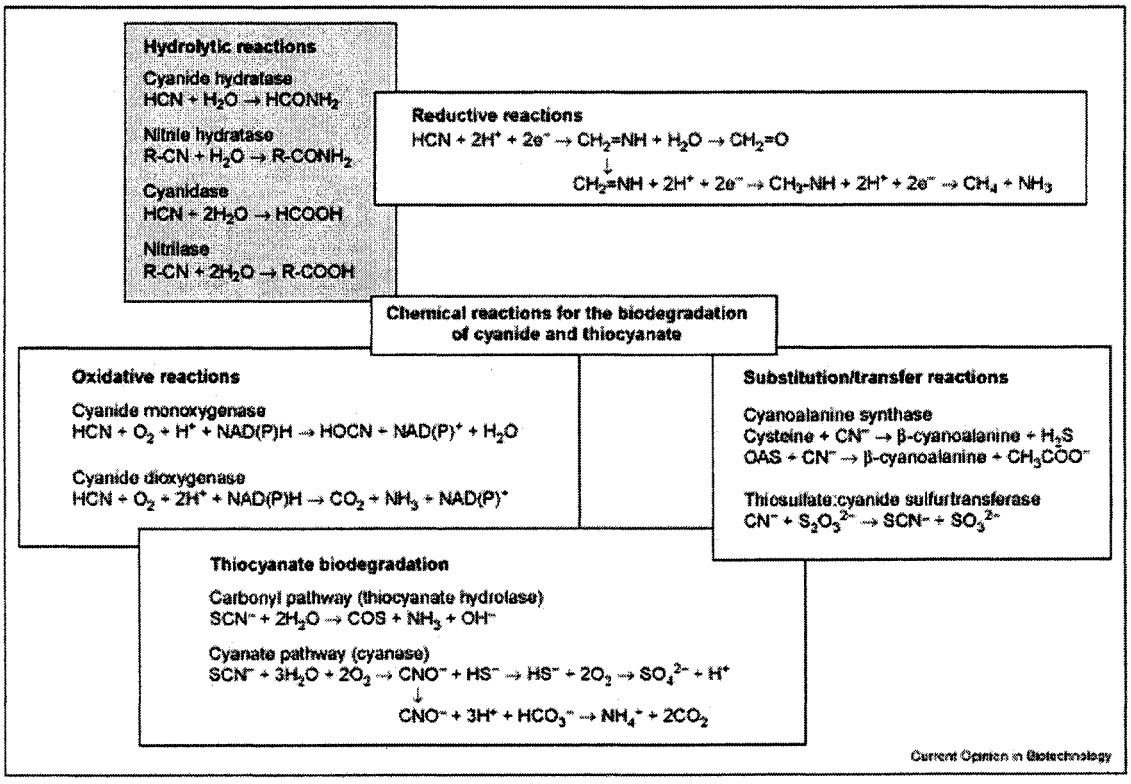


Figure 1.5 : Réactions de biodégradation des cyanures (Ebbs 2004)

Note : «R» représente le groupe aromatique ou aliphatique

Biodégradation aérobie des cyanures libres

Trois types de réactions en condition aérobie ont été observés : l'hydrolyse, l'oxydation et la substitution/addition. Un microorganisme peut utiliser plus d'une voie pour la biodégradation des cyanures, celle-ci étant dictée par les conditions externes tels que la concentration en oxygène, le pH et la concentration en cyanure.

Hydrolyse

Les réactions d'hydrolyse peuvent se produire en présence ou en absence d'oxygène. Elles sont catalysées par les enzymes *cyanidase*, *cyanide hydratase*, *nitrilase* et *nitrile hydratase*. Un pH entre 7 et 9 constitue le niveau optimal pour favoriser l'hydrolyse du

cyanure. Lors de cette réaction, les produits formés sont le formamide ($HCONH_2$) , le formate (HCOOH) et l'ammoniac (NH_3).

Lors de la réaction d'hydrolyse suivante, deux molécules d'eau réagissent avec le cyanure pour former du formate et de l'ammoniac.

$$HCN + 2\ H_2O \xrightarrow{\text{cyanidase}} HCOOH + NH_3 \qquad (1.29)$$

L'enzyme ci-dessus responsable de l'hydrolyse du HCN en formate et ammoniac est appelé *cyanidase*.

Un enzyme, le *cyanide hydratase*, produit par plusieurs champignons pour combattre la toxicité du HCN convertit les cyanures en formamide (Raybuck 1992). Ce formamide peut ensuite être transformé en formate par l'enzyme *formamidase* :

$$HCN + H_2O \xrightarrow{\text{cyanide hydratase}} HCONH_2 \qquad (1.30)$$

$$HCONH_2 + H_2O \xrightarrow[\text{formamidase}]{} HCOOH + NH_3 \qquad (1.31)$$

Oxydation

La dégradation des cyanures en ammoniac et CO_2 nécessite une addition stœchiométrique de NADPH et d'oxygène. Elle se fait donc en condition aérobie seulement. Les principaux enzymes impliqués sont le *oxygenase* et le *cyanase*.

La réaction d'oxydation des cyanures, par différents *Pseudomonas*, proposée par Harris et Knowles (1983) est la suivante :

$$NADH + H^+ + HCN + O_2 \xrightarrow{\text{OXYGÉNASE}} HNCO + H_2O + NAD^+ \quad (1.32)$$

$$HNCO + H_2O \xrightarrow{\text{CYANASE}} CO_2 + NH_3 \quad (1.33)$$

$$NADH + H^+ + HCN + O_2 \longrightarrow CO_2 + NH_3 + NAD^+ \quad (1.34)$$

Substitution/Addition

Plusieurs enzymes sont susceptibles de détoxiquer les cyanures grâce à une réaction de substitution et addition. Par exemple, la *Rhodanese* catalyse la réaction suivante :

$$CN^- + S_2O_3^{2-} \xrightarrow{\text{rhodanese}} SCN^- + SO_3^{2-} \quad (1.35)$$

Le SO_3^{2-} formé selon la réaction ci-dessus peut réagir ensuite avec l'oxygène pour former des sulfates (SO_4^{2-}) (Smith et Struhsacker 1987).

La *cyanoalanine synthase* quant à elle transforme le cyanure en cyanoalanine qui est par la suite convertit en asparagine par *cyanoalanine hydrolase* ou *asparaginase*.

Biodégradation anaérobie des cyanures libres

Garcia et al. (1995) a étudié le cas de la biodégradation anaérobie du NaCN par *Pseudomonas* et *Alcaligenes*. Il conclut que la réaction de biodégradation dans ces conditions est la suivante :

$$HCN + H_2O \rightarrow HCOOH + NH_3 \quad (1.36)$$

Ce qui concorde avec les travaux de Fallon (1991) qui a prouvé l'existence d'une voie hydrolytique pour la biodégradation anaérobie des cyanures.

Réduction

Un procédé effectuant la biodégradation des cyanures libres en condition anaérobie via des réactions réductives de méthanogénèses a été étudié (Annachhatre et Amornkaew 2000). Un des avantages de ce procédé est d'engendrer la production de biogaz. Les principaux produits de réaction sont le méthane (CH_4) et l'ammoniac (NH_3).

$$HCN + 2\ H^+ + 2é \rightarrow CH_2{=}NH + H_2O \rightarrow CH_2{=}O \quad (1.37)$$

$$\swarrow$$

$$CH_2{=}NH + 2\ H^+ + 2é \rightarrow CH_3NH + 2\ H^+ + 2é \rightarrow CH_4 + NH_3$$

Sulfato-réduction

En conditions sulfato-réductrices, la décomposition des cyanures par des bactéries forme des thiocyanates qui, suivit d'une hydrolyse, génèrent des NH_3, H_2S et CO_2 (Smith et Mudder 1991). Voici les réactions se produisant en conditions sulfato-réductrices :

$$CN^- + H_2S\ (aq) \rightarrow HCNS + H^+ \quad (1.38)$$

$$HCN + HS^- \rightarrow \quad HCNS + H^+ \quad (1.39)$$

Biodégradation des cyanures complexés

Les cyanures complexés sont plus résistants à la biodégradation que les cyanures libres (Aronstein et al 1994; Laha et Luthy 1991). Néanmoins, certaines études (Barclay et al 1998; Dursun et al 1999) suggèrent que des organismes connus, tels que *P.fluorescens* et *F.solani,* qui peuvent dégrader les cyanures libres, dégradent également les complexes métallocyanures en conditions aérobies.

Les rapports indiquent que les produits de biodégradation des complexes sont formés, entre autres, d'ammoniac (NH_3) et de formamide ($HCONH_2$). Cependant, il est encore impossible de discerner si les organismes présents utilisent les complexes

métallocyanures directement ou encore si la biodégradation n'agit que sur des cyanures libres dissociés.

Hommelgaard et al (1998) a démontré la biodégradation aérobie de complexes de ferrocyanure de potassium ($K_4Fe(CN)_6$) à l'aide d'essais en microcosmes. De façon générale, les complexes métallocyanures se dégradent selon cette réaction :

$$M(CN)_x^{y-x} + 3x\ H_2O + x/2\ O_2(aq) \rightarrow M^{y+} + x\ NH_4^+ + x\ HCO_3^- + x\ OH^- \quad (1.40)$$

Cette réaction peut également se produire en condition anaérobie avec des molécules d'eau et sans oxygène (Young et Jordan 1995). Par contre, la dégradation des fer-cyanures sous des conditions anaérobie n'a pas encore été étudiée (Kjeldsen 1999).

1.5.4 L'oxydation chimique

L'oxydation des cyanures en cyanates joue un rôle très important dans la détoxication des cyanures puisque ces derniers sont beaucoup moins nocifs que les premiers. L'oxydation du HCN et du CN^- se produit ainsi (Owenback 1978) :

$$2\ HCN + O_2 \rightarrow 2\ HCNO \quad (1.41)$$

$$2\ CN^- + O_2 + \text{catalyseur} \rightarrow 2\ CNO^- \quad (1.42)$$

Cette dernière réaction nécessite un catalyseur bactériologique, minéralogique ou photochimique (rayons UV).

L'hydrogène de cyanate (HCNO) est ensuite hydrolysé pour former de l'ammoniac et du dioxyde de carbone.

$$HCNO + H_2O \rightarrow NH_3(g) + CO_2(g) \quad (1.43)$$

Dans le cas de l'eau souterraine, l'oxydation chimique sera limitée par une faible concentration d'oxygène dissous. Les milieux en contact avec l'air ambiant sont beaucoup plus sujets à cette réaction.

1.5.5 L'hydrolyse

Le HCN peut également être hydrolysé pour former du formate d'ammonium ou du formate lorsque le pH est suffisamment faible et que les températures sont élevées. L'hydrolyse des cyanures en formate d'ammonium se réalise très lentement à 25°C mais s'accélère à des températures élevées (Madersan et House 1992). Cette contrainte fait en sorte que ce mécanisme sera peu présent dans l'eau souterraine.

$$HCN + 2\ H_2O \rightarrow NH_4COOH \text{ (formate d'ammonium)} \quad (1.44)$$

$$HCN + 2\ H_2O \rightarrow NH_3 + HCOOH \text{ (formate)} \quad (1.45)$$

1.5.6 La volatilisation

L'acide cyanhydrique étant très volatil (pression de vapeur de 84 kPa à 20°C), la volatilisation peut être un facteur extrêmement important de l'atténuation naturelle des cyanures. Cependant, puisque les eaux souterraines se retrouvent sous une couche plus ou moins étanche de sol, cette volatilisation y est minimisée. Ce phénomène sera surtout étudié dans le cas d'eaux de surface ou de résidus exposés à l'air libre.

$$HCN(aq) \rightarrow HCN(g) \quad (1.46)$$

1.5.7 La photolyse

L'exposition à la lumière augmente de façon importante la vitesse de décomposition de complexes fer-cyanures. Un échantillon contenant originalement que des fer-cyanures, exposés à la lumière du jour, produit du cyanure libre (Meeussen et al 1992). Lors de la décomposition, la vitesse de réaction peut atteindre environ 8% par heure. Par contre, en raison de la faible quantité de rayons UV y pénétrant, la photodécomposition est lente dans les eaux souterraines (Turkman 1998).

$$Fe(CN)_6^{-4} \xrightarrow{UV} Fe^{2+} + 6\ CN^- \qquad (1.47)$$

1.6 CONCLUSION

L'activité humaine génère d'importantes quantités de cyanures dans l'environnement, l'industrie canadienne de l'aluminium seule générant annuellement plusieurs dizaines de milliers de tonnes de brasques usées contenant des cyanures (ATSDR 1997). À ces quantités, il faut ajouter des centaines de milliers de tonnes entreposées dans des bâtiments en attente de traitement. Approximativement 427 000 tonnes de brasques usées étaient entreposées dans des bâtiments, au Canada en 1998 (Godin 2004).

Qu'ils soient utilisés comme réactif ou générés comme sous-produits, les cyanures sont majoritairement introduits dans les eaux souterraines lors de la dissolution de déchets solides (résidus miniers acides, brasques usées, etc.). Puisque ceux-ci sont dangereux pour la santé humaine et de l'environnement, les sols et les eaux contaminés doivent être traités. Or, plusieurs technologies de traitement des cyanures dans les effluents liquides sont disponibles, mais elles sont soit onéreuses, soit elles génèrent à leur tour des

émissions secondaires tout aussi dommageables pour l'environnement, tels que des rejets de gaz à effet de serre, l'utilisation de solvants et d'acides.

Plusieurs recherches suggèrent que l'atténuation naturelle des cyanures, par différents mécanismes, peut s'avérer une solution de rechange efficace aux technologies déjà existantes. Ces mécanismes se basent sur des phénomènes physiques et biologiques qui dépendent des conditions intrinsèques à chaque site étudié. Dans le cas des cyanures, les principaux mécanismes sont: la biodégradation, l'adsorption, la précipitation, l'oxydation chimique, l'hydrolyse, la volatilisation et la photolyse.

La présente étude se penche sur le potentiel d'atténuation naturelle des cyanures dans l'eau souterraine sur un site de production d'aluminium où des brasques usées ont déjà été enfouies.

CHAPITRE 2 - HYPOTHÈSE DE RECHERCHE ET OBJECTIFS

L'hypothèse de recherche sur laquelle se base ce projet de recherche est la suivante :

> **En plus du recouvrement, la réduction de la concentration en cyanure dans l'eau souterraine à proximité du site d'enfouissement de brasques usées à l'étude est attribuable à des mécanismes d'atténuation naturelle notamment la précipitation, l'adsorption et la biodégradation.**

Les objectifs de ce travail de recherche sont :

- Identifier le(s) mécanisme(s) d'atténuation naturelle susceptible d'entraîner une diminution de la concentration en cyanure dans l'eau souterraine à l'aide d'une revue de littérature critique;
- Effectuer une caractérisation géochimique et microbiologique des échantillons de sol et d'eau souterraine prélevés sur le site à l'étude;
- Identifier et quantifier les différentes espèces de cyanures présentes dans les échantillons d'eau souterraine par une modélisation et des expériences en laboratoire;
- Quantifier le potentiel des processus d'atténuation naturelle identifiés au préalable par des expériences en laboratoire;
- Conclure sur le potentiel d'atténuation naturelle des cyanures dans l'eau souterraine sur le site étudié.

CHAPITRE 3 - CARACTÉRISTIQUES DU SITE ET CHOIX DES PROCESSUS D'ATTÉNUATION NATURELLE

3.1 SITUATION GÉOGRAPHIQUE DU SITE

L'aluminerie faisant l'objet de cette étude se trouve sur un terrain industriel localisé dans un bras de mer, près de la côte, en Colombie-Britannique au Canada. Le climat y est caractérisé par des périodes de grandes précipitations (pluie et neige), atteignant en moyenne 2500 mm par année et par une température annuelle moyenne de 7°C (Dillon 2001). Le site d'enfouissement de brasques usées est situé tout juste au sud de l'emplacement des cuves en fonction.

3.2 HISTORIQUE DU SITE

L'usine a été construite entre 1951 et 1954. Elle possède maintenant une capacité de 272 000 tonnes par années.

Avant la fin des années 1970, les brasques usées étaient enfouies dans un site d'enfouissement situé à proximité des opérations. L'opération du site d'enfouissement de brasques usées a cessée en 1980. Il est considéré que le site d'enfouissement contient environ 460 000 m^3 de déchets dont 100 000 m^3 de brasques usées. Il couvre une superficie approximative de 58 936 m^2 et atteint une profondeur maximale de 7m.

À la suite de la découverte d'un panache de contamination dans l'eau souterraine, dans le but de réduire la lixiviation des contaminants du site d'enfouissement, ce dernier a été recouvert d'une membrane géosynthétique (1988-1989). Depuis ce recouvrement, les

concentrations en cyanures dans l'eau souterraine ont chuté de 95% (entre 1989 et 1999). Le suivi environnemental effectué depuis le recouvrement est fait à l'aide de plus d'une vingtaine de puits d'échantillonnage répartis sur le site.

Malgré l'importante diminution de la concentration en cyanure, cette dernière demeure supérieure aux normes imposées sur la qualité des eaux souterraines. Cette contamination est due aux 200 000m^3 de sol contaminé présent avant le recouvrement et qui agit maintenant comme source de contamination secondaire.

3.3 PLAN DU SITE

La figure 3.1 montre un plan du site :

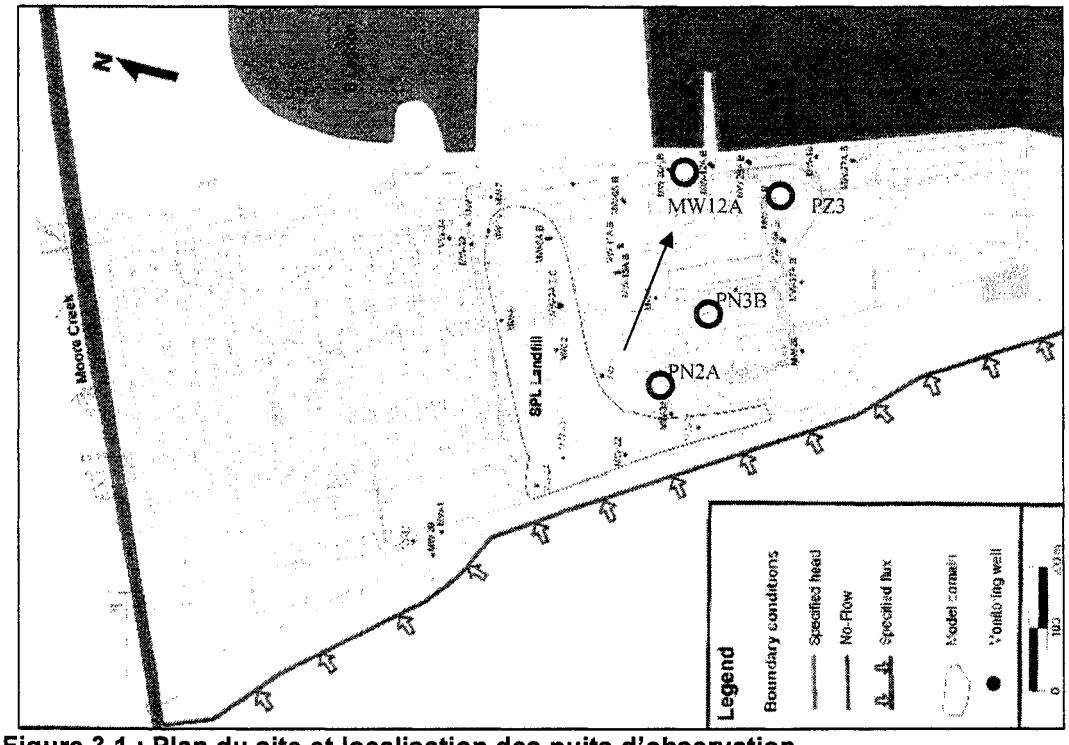


Figure 3.1 : Plan du site et localisation des puits d'observation

La zone identifiée «SPL Landfill» au centre représente le site d'enfouissement de brasques usées tandis que l'espace en haut à droite de l'image correspond au bras de mer. L'eau souterraine, donc le panache de contamination, se déplace du site d'enfouissement jusqu'au bras de mer. Les points dispersés sur l'image représentent les différents puits présent sur le site. Les puits identifiés en rouge sont ceux qui ont été échantillonnés. La flèches au bas de l'image montrent le flux de recharge qui arrive sur le site tandis que la flèche au milieu montre la direction de l'écoulement de l'eau souterraine.

3.4 HYDROGÉOLOGIE

L'eau souterraine s'écoule dans un aquifère de sable et de gravier d'une épaisseur variable, entrecoupé de couches de silt à faible perméabilité. Sa vitesse maximale, dans la couche de sable la plus basse, est de 2,7 x 10^{-4} m/s. L'aquifère est confiné par une couche basale de silt d'une profondeur de 25m. Il est bordé à l'ouest par un substratum rocheux et au sud et à l'est par l'océan. Un ruisseau constitue la barrière nord de cet aquifère.

La recharge en eau souterraine se fait à partir d'infiltration d'eau le long du substratum rocheux. La recharge sur le site d'enfouissement en tant que tel est considérablement réduite depuis l'installation sur celui-ci de surfaces imperméables. L'écoulement de l'eau souterraine à travers le site se fait principalement dans la direction est sud-est jusqu'au bras de mer.

La figure 3.2 présente une vue en coupe d'une section géologique représentant les différentes couches de sol du substratum rocheux jusqu'au bras de mer. La section identifiée «SPL Landfill» constitue le site d'enfouissement.

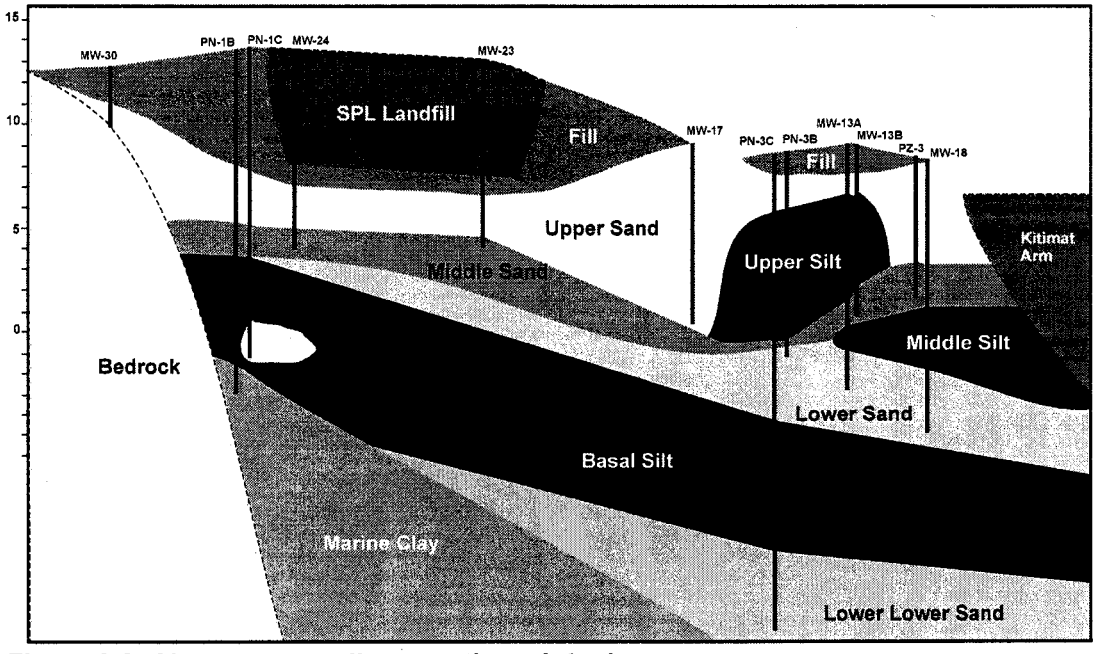


Figure 3.2 : Vue en coupe d'une section géologique

3.5 ÉCHANTILLONNAGE ET CARACTÉRISATION

L'échantillonnage de l'eau souterraine et du matériel géologique est indispensable pour être en mesure d'effectuer la caractérisation de l'eau souterraine ainsi que les différents essais en laboratoire. Les principaux résultats de la caractérisation sont présentés dans les sections qui suivent. Une discussion sur les résultats d'analyse permet ensuite de bien cerner les conditions présentes sur le site. Vu la vaste étendue de ce site et du grand nombre de puits existants, seulement quatre puits ont été retenus pour l'échantillonnage : MW12A, PN2A, PN3B et PZ3.

3.5.1 Choix des puits

Sur la figure 3.1, les puits identifiés (MW12A, PN2A, PN3B et PZ3) sont ceux qui ont été sélectionnés pour la réalisation des différents tests.

Il est important que les puits choisis soient représentatifs de l'ensemble des conditions hydrogéologiques et physico-chimiques du terrain et du panache de contamination. Ainsi, les puits retenus sont situés soit près de la source de contamination au début du panache (PN2A), soit au milieu du panache de contamination (PN3B), soit à la fin du panache, près du bras de mer (MW12A) ou légèrement en retrait du panache (PZ3). Ces puits présentent des niveaux de contamination et des caractéristiques physico-chimiques suffisamment différentes pour assurer une bonne représentativité.

3.5.2 Échantillonnage

Il est très important que l'échantillonnage soit effectué en s'assurant de conserver autant que possible les conditions de terrain. Également, dans le but d'assurer une plus grande continuité entre les tests, toutes les quantités d'eau souterraine nécessaire ont été recueillies en une seule session d'échantillonnage.

Ainsi, quatre tubages de matériel géologique, soit un par puits, ont été prélevés sous la supervision d'Alcan et envoyés dans notre laboratoire. Ces tubages sont scellés de telle sorte que le sol à l'intérieur n'interagit en aucune façon avec l'extérieur, préservant ainsi les conditions dans lesquelles il a été échantillonné. Ils ont ensuite été conservés dans un réfrigérateur, à 4°C, dans le noir jusqu'à leur utilisation dans les essais en laboratoire.

De la même façon, l'eau souterraine prélevée sous la supervision d'Alcan a été envoyée à notre laboratoire. Pour chaque puits, quatre litres d'eau souterraine ont été recueillis.

Lors de l'échantillonnage, cette eau a été filtrée à l'aide d'un filtre 0,45µm et introduite dans des contenants opaques de 4L chacun. Une fois reçus, ils ont été conservés dans le réfrigérateur, à 4°C, dans le noir.

Des échantillons d'eau souterraine de ces mêmes puits ont également été envoyés dans un laboratoire externe pour obtenir une caractérisation chimique dont les résultats sont présentés à la prochaine section.

Les protocoles pour l'échantillonnage de l'eau souterraine et du matériel géologique se retrouvent dans Samson et al. (2002).

3.5.3 Résultats et discussion sur caractérisation de l'eau souterraine

Le tableau 3.1 donne la liste des paramètres analysés tandis que l'annexe XII donne la méthodologie employée pour les analyses.

Des échantillons de chacun des quatre puits à l'étude ont été analysés pour obtenir différentes données physico-chimiques. Les résultats, fournis par Alcan, obtenus en mai et juin 2002 sont présentés au tableau 3.2 tandis que les résultats obtenus en mai 2003 sont présentés au tableau 3.3 et les résultats obtenus en juillet et septembre 2003 sont au tableau 3.4.

Ces tableaux montrent les résultats les plus significatifs pour cette étude. Aux tableaux 3.2 et 3.3, les résultats pour les quatre puits sont indiqués dans le même ordre que le sens de l'écoulement, c'est-à-dire en commençant par un puits près de la source de contamination, puis un autre au milieu du panache, celui à la fin du panache et, finalement, celui légèrement en retrait du panache. Ceci permet de suivre une certaine évolution en fonction de la situation géographique du puits dans le panache.

Tableau 3.1 : Paramètres de l'analyse détaillée

Paramètre	**Sur le site**	**Laboratoire externe** (ALS Env.)
Paramètres de base		
Cyanure total		X
F Total		X
COD		X
Al Total		X
Fe Total		X
S Total		X
Alcalinité		X
Bromure		X
NO_3^-		X
NH_4^+		X
Mn^{4+}		X
CH_4		X
Redox (potentiel)	X	
Oxygène dissous	X	
pH	X	
Conductivité	X	
Température	X	
Paramètres détaillés		
F-		X
Cyanide libre (HCN)		X
Cyanure SAD		X
Cyanate		X
Thiocyanate		X
Al Dissous		X
Al^{3+}		X
Fe Dissous		X
Fe^{3+}		X
Fe^{2+}		X
Mn^{4+}		X
Ca^{2+}		X
Mg^{2+}		X
Na^+		X
K^+		X
Métaux traces (Cu, Pb, Zn, Cd, Ni)		X
SO_4^{2-}		X
Cl^-		X
PO_4^{3-}		X

Les mesures pour le potentiel redox ont été prises à l'aide d'une sonde (électrode de platine combinée à une électrode de référence Ag/AgCl), *in situ*. Il s'agit donc d'une mesure du potentiel d'oxydoréduction relatif. Pour obtenir le potentiel d'oxydoréduction absolu, il faut ajouter environ 217 mV aux valeurs indiquées dans les tableaux (entre 215 mV et 220 mV en fonction de la température, entre 6°C et 14°C).

Tableau 3.2 : Résultats de l'analyse de mai 2002 de l'eau souterraine pour 4 puits

SENS DE L'ÉCOULEMENT →

LOCATION			PN2A	PN3 B	MW12A	PZ3
SAMPLING DATE			2002-05-28	2002-05-31	2002-06-01	002-05-30
	Max. Conc*	UNITS				
DISSOLVED OXYGEN (on-site)	-	%	0.2	0	0	3.5
ON-SITE PH	6.5 to 8.5[a]		9.42	8.72	9.17	6.21 (lab)
REDOX (on-site, inst. mea.)	-	mV	42	8.8	-67.7	186.1
ON-SITE TEMPERATURE	30[b]	°C	10.57	13.29	9.52	10
DISSOLVED ANIONS						
ALKALINITY-TOTAL	-	mg/l	4980	234	546	46
CHLORIDE	250[c]	mg/l	140	64	410	4850
FLUORIDE	1.5[d]	mg/l	762	143	370	17.8
SULPHATE	500[a]	mg/l	130	15	32	678
NUTRIENTS						
NITRATE NITROGEN	-	mg/l	0.4	0.205	<0.005	<0.005
DISSOLVED PO_4	-	mg/l	1.86	0.92	5.06	<0.001
CYANIDES						
TOTAL CYANIDE	0.2[a]	mg/l	8.9	0.584	3.2	0.02
FREE CYANIDE CN	-	mg/l	IP	IP	IP	IP
THIOCYANATE	-	mg/l	185	<5	17	<0.5
WAD CYANIDE	-	mg/l	0.07	0.008	0.024	<0.005
TOTAL METALS						
SULPHUR	-	mg/l	59	IP	IP	205
DISSOLVED METALS						
ALUMINIUM	-	mg/l	18.8	1	3.5	61
CALCIUM	-	mg/l	22.7	1.79	3.56	146
IRON	0.3[a]	mg/l	12.3	0.75	2.21	14
MAGNESIUM	500[c]	mg/l	3.4	0.6	4	285
POTASSIUM	-	mg/l	55	6	19	112
SODIUM	200[a]	mg/l	2890	281	576	2190
ORGANIC PARAMETERS						
DOC	-	mg/l	946	IP	IP	1.6

* According to British Columbia Approved Water Quality Guidelines

a drinking water b recreation c drinking (dissolved) d marine aquatic life IP in progress / not available

Les valeurs pour le cyanure total incluent les cyanures libres («free cyanide»), les cyanures complexés simples (CN_{WAD}) et les complexes forts (CN_{SAD}). Pour obtenir la concentration de cette dernière catégorie, les complexes forts, il suffit de soustraire aux

valeurs pour le cyanure total celles pour les cyanures libres et pour les complexes simples. Il est à noter que les thiocyanates ne font pas parties des valeurs en cyanure total. Leurs concentrations sont indiquées à la suite.

Tableau 3.3 : Résultats de l'analyse de mai 2003 de l'eau souterraine pour 4 puits

SENS DE L'ÉCOULEMENT →

LOCATION			PN2A	PN3 B	MW12A	PZ3
SAMPLING DATE			2003-05-12	2003-05-12	2003-05-12	2003-05-12
	Max. Conc*	UNITS				
DISSOLVED OXYGEN (on-site)	-	%	0.85	1.09	0.63	1.52
ON-SITE PH	6.5 to 8.5[a]		9.48	8.84	8.91	6.70
REDOX (on-site, inst. mea.)	-	mV	-72	122.7	-188.3	-36
ON-SITE TEMPERATURE	30[b]	°C	9.27	13.4	9.3	11.2
DISSOLVED ANIONS						
ALKALINITY-TOTAL	-	mg/l	3340	288	455	218
CHLORIDE	250[c]	mg/l	101	65	90	5
FLUORIDE	1.5[d]	mg/l	640	140	282	35.5
SULPHATE	500[a]	mg/l	300	24	48	3
NUTRIENTS						
NITRATE NITROGEN	-	mg/l	<0.1	<0.03	<0.03	<0.005
DISSOLVED PO_4	-	mg/l	13.5	1.01	4.52	0.017
CYANIDES						
TOTAL CYANIDE	0.2[a]	mg/l	4.8	0.056	2.6	0.032
FREE CYANIDE CN	-	mg/l	<0.005	<0.005	<0.005	<0.005
THIOCYANATE	-	mg/l	98	<6	14	<3
WAD CYANIDE	-	mg/l	0.08	0.014	0.02	<0.006
TOTAL METALS						
SULPHUR	-	mg/l	43	3	7	0.9
DISSOLVED METALS						
ALUMINUM	-	mg/l	6	1.1	3.1	6.8
CALCIUM	-	mg/l	15.6	1.39	3.1	3.6
IRON	0.3[a]	mg/l	9.6	0.92	2.73	0.52
MAGNESIUM	500[c]	mg/l	3	0.8	3.2	8.5
POTASSIUM	-	mg/l	38	4	13	9
SODIUM	200[a]	mg/l	2530	303	528	108
ORGANIC PARAMETERS						
DOC	-	mg/l	751	30.9	81.2	12.8

* According to British Columbia Approved Water Quality Guidelines
a drinking water b recreation c drinking (dissolved) d marine aquatic life IP in progress / not available

Il n'est pas possible, avec les résultats des tableaux 3.2 et 3.3 de dresser un portrait de l'évolution de la concentration en fonction de l'écoulement. Ce constat est fait parce que les données des différents puits ne sont pas en continuité, la contamination affectant un puits n'affectant pas nécessairement de façon directe les autres puits.

Des campagnes d'échantillonnages périodiques se produisant sur le site, d'autres données, quoique pas aussi détaillées, sont disponibles pour une période postérieure au précédents résultats exposés. Par contre, puisque les campagnes d'échantillonnage de juillet et septembre 2003 ne faisaient pas parties du présent projet, moins de résultats sont disponibles et le puits PZ3 n'était pas échantillonné. Alors seules les données de mai 2002 et mai 2003 ont été utilisées pour faire les principales observations et pour préparer les différents essais de laboratoire.

Tableau 3.4: Résultats des analyses de juillet et septembre 2003

Location	PN2-A	PN3-B	MW - 12A	PN2-A	PN3-B	MW - 12A
Field Measurements						
Date	10-juil-03	11-juil-03	05-juil-03	05-sept-03	09-sept-03	10-sept-03
Groundwater Field Variables						
Redox, mV	-147	-107	-118	-137	32	6
Temperature, degrees C	11,3	14,3	9,5	10,0	14,0	9,7
Acidity, pH units	9,62	9,02	9,22	9,33	8,92	9,17
Electrical Conductivity, mS/cm	7650	1347	2 430	-	-	2 120
Dissolved Oxygen, mg/L	0,09	0,04	0,17	0,21	0,27	0,00
Parameters						
Fluoride, mg/L	616	143	287	607	140	274
SAD (Total) Cyanide, mg/L	3,1	0,019	3,2	3	0,91	3,06
Dissolved Aluminum, mg/L	5,6	0,11	3,5	6	1,3	3,9
Dissolved Iron, mg/L	9,2	54,2	2,24	7,7	1,12	2,1

Les résultats présentés au tableau 3.4 font états d'une concentration toujours au-dessus du critère pour l'eau de consommation. Par contre, les puits PN2A et MW12A enregistrent une baisse de la contamination au cyanures SAD entre 2002 et 2003. Ainsi, en mai 2002, la concentration au puits PN2A était de 8,8 mg/L et au puits MW12A de

3,2 mg/L alors qu'en septembre 2003, ces concentrations étaient de 3 mg/L et 3,06 mg/L respectivement. La diminution de la concentration en cyanure dans l'eau souterraine semble donc se poursuivre.

Toujours selon le tableau 3.4, les concentrations en oxygène dissous varient, à l'été 2003, de 0 à 0,21 mg/L et le potentiel d'oxydo-réduction de –147 mV à 32 mV (avant correction). Les températures moyennes à ce moment étaient de 10°C pour les puits PN2A et MW12A et de 14°C pour PN3B. Les concentrations en fer dissout sont également encore assez importante pour que les complexes CN_{SAD} présents soient des complexes fer-cyanure.

En utilisant les données présentées aux tableaux 3.2 et 3.3 ainsi que les conclusions apportées par la revue de la littérature présentée au chapitre 1, il est possible de déterminer les espèces de cyanures qui devraient être présentes dans l'eau souterraine ainsi que les différents mécanismes d'atténuation naturelle qui sont les plus susceptibles de se produire. Les principales observations en fonction du mécanisme sont présentées ci-après.

Adsorption/Précipitation

Comme il a été démontré dans la revue de la littérature, les conditions du site et la distribution des espèces présentes peuvent jouer un rôle déterminant dans le potentiel d'adsorption et de précipitation des cyanures. Par exemple, le pH influence la capacité d'adsorption des sols en créant des surfaces chargées positivement ou négativement selon sa valeur et le potentiel redox détermine l'état d'oxydation de certaines espèces (ex. Fe^{2+} / Fe^{3+}) ce qui joue sur la nature des complexes pouvant se former. Voici les observations faites lors de l'analyse des données obtenues de la caractérisation de l'eau souterraine.

- Dans chacun des puits, le contenu en CN_{Total} est de beaucoup supérieur à celui obtenu pour le CN_{WAD}, indiquant que la majorité des cyanures dans l'eau souterraine est sous forme de complexes forts (CN_{SAD});
- De tous les métaux formant des complexes forts avec le cyanure (Fe, Co, Ag, Au), seul le fer est présent en quantité significative sur le site;
- Deux des quatre puits (PN2A et MW12A) possèdent des concentrations de carbone organique dissous fortes et d'oxygène dissous faibles comparativement aux autres puits. De plus, le potentiel d'oxydoréduction de ces puits est négatif dans les données de mai 2003.
- Les concentrations en CN_{Total} pour mai 2002 et mai 2003 sont du même ordre de grandeur même si ces valeurs sont significativement plus basses pour mai 2003 dans le cas de 3 des 4 puits;
- Le pH de l'eau souterraine est alcalin à l'intérieur du panache et demeure relativement stable entre les campagnes d'échantillonnages de mai 2002 et de mai 2003. Cette valeur est près de la neutralité dans le cas du puits hors du panache (PZ3).

D'après les observations énoncées ci-dessus ainsi que l'analyse physico-chimique de l'eau, il est possible d'affirmer que la majorité du cyanure présent dans l'eau souterraine aux quatre puits étudiés est sous la forme de complexes métallo-cyanures forts puisque les quantités de cyanure libre et de complexes simples sont relativement faibles. De plus, l'analyse des métaux dissous montre que ces complexes sont plus susceptibles de se former avec le fer puisque ce dernier est le seul métal pouvant former des complexes forts présent en quantité significative.

L'analyse de ces données permet de supposer des conditions favorables à l'activité des bactéries sulfato-réductrices pour les puits MW12A et PN2A. En effet, ces 2 puits affichent des concentrations de sulfate dissous et de carbone organique dissous élevées

tout en affichant des concentrations faibles d'oxygène dissous. Également, ce carbone organique dissous peut agir de substrat pour l'activité microbienne.

Les données de 2003 sont comparables avec celles obtenues de 2002. Les concentrations en CN_{Total} et CN_{WAD}, de même que le pH et le carbone organique dissous sont du même ordre de grandeur. Toutefois, il est à noter que les concentrations en cyanure total étaient moins élevées en mai 2003.

De l'eau souterraine provenant de cette même campagne d'échantillonnage de mai 2003 sera utilisée avec du matériel géologique provenant de ces puits pour les études subséquentes d'adsorption et de biodégradation qui seront alors représentatives de conditions de terrain rencontrées.

Biodégradation

Les caractéristiques physico-chimiques de l'eau souterraine influencent directement l'activité microbienne à l'intérieur de celle-ci. Comme il a été mentionné dans la revue de la littérature, les voies métaboliques de biodégradation du cyanure diffèrent en conditions aérobies ou anaérobies. La biodégradation en condition aérobie se produit à une vitesse beaucoup plus grande qu'en condition anaérobie. Voici les observations supplémentaires en relation avec la biodégradation faites à partir de l'analyse des données obtenues de la caractérisation de l'eau souterraine.

- Le pourcentage de la saturation atteint par l'oxygène dissous dans le panache varie de 0% et 1,1%;
- Le puits à l'écart du panache de contamination (PZ3) possède un pourcentage de saturation en oxygène dissous élevée (1,52% et 3,5% en mai 2003 et mai 2002 respectivement) pour de l'eau souterraine (habituellement < 2%);

- De la section précédente : CN_{SAD} est l'espèce de cyanure dominante retrouvée dans l'eau souterraine.

Ainsi, il sera intéressant d'étudier la biodégradation des complexes fer-cyanure puisque ceux-ci forment l'espèce dominante sur le site étudié. Ce résultat est conforme aux études de Meeussen et al. (1992). Les puits présentant les plus faibles valeurs de potentiel redox en mai 2003 (PN2A et MW12A) possèdent des conditions favorables pour l'activité des bactéries sulfato-réductrices dans l'eau souterraine. Ici aussi, l'utilisation d'échantillons d'eau souterraine et de matériel géologique provenant du site permettra une étude de la biodégradation fidèle aux éléments présents sur le site.

3.6 CHOIX DES PROCESSUS D'ATTÉNUATION NATURELLE

En se basant sur la revue de la littérature et les caractéristiques du site énoncées ci-haut, il est maintenant possible de déterminer les mécanismes d'atténuation naturelle qui sont susceptibles d'avoir un impact significatif sur le site étudié. Ces mécanismes se basent sur des phénomènes physiques et biologiques qui dépendent des conditions intrinsèques à chaque site étudié. Dans le cas des cyanures, les principaux mécanismes sont: la biodégradation, l'adsorption, la précipitation, l'oxydation chimique, l'hydrolyse, la volatilisation, la dilution et la photolyse.

D'abord, il a été montré qu'il est possible qu'il y ait de la biodégradation des cyanures, en conditions réductrices dans l'eau souterraine (Meehan 2000). Plusieurs microorganismes sont capables de dégrader les cyanures en des espèces moins toxiques. Des comptes microbiens et des essais de biodégradation seront menés dans le but de prouver l'occurrence de ce phénomène.

Également, les cyanures peuvent s'adsorber sur différentes surfaces (McLean et Bledsoe 1992) présentes dans les aquifères. Cette adsorption dépend énormément des

conditions du site, principalement du pH. Ce mécanisme a été étudié entre autre par Ghosh (1998). Son importance doit être mesurée par des essais en laboratoire fidèles aux conditions du terrain.

Finalement, la formation de complexes insolubles dans l'eau souterraine peut mener à une précipitation de composés contenant du cyanure. Ces complexes, principalement le Bleu de Prusse et le Bleu de Turnbull, se forment avec le fer selon les conditions physico-chimiques rencontrées. Lorsque la constante d'équilibre de ces composés divisée par la constante de solubilité dépasse un, les complexes précipitent. Le cyanure n'est alors pas détruit, mais il est retiré de la phase aqueuse et sa mobilité s'en trouve grandement réduite. La connaissance de l'équilibre géochimique de l'eau souterraine est utile pour être capable d'évaluer cette possibilité.

Dans le cas de l'oxydation chimique, de l'hydrolyse, de la volatilisation et de la photolyse, ces mécanismes sont jugés peu probables dans l'eau souterraine sous les conditions connues. Premièrement, l'oxydation chimique ne pourrait s'y produire car l 'eau est sous des conditions réductrices. Pour ce qui est de l'hydrolyse, puisqu'elle est lente à 25°C, son impact dans la chimie d'une eau à moins de 10°C est assurément faible, ce qui est le cas pour l'eau du site étudié. Finalement, parce que le transfert à l'atmosphère est très difficile pour les molécules gazeuses, la volatilisation y est également inhibée tout comme la photolyse qui se produit peu puisque les rayons UV n'arrivent pas à atteindre les cyanures dans l'eau souterraine. La dilution n'est pas étudiée car elle n'entraîne ni la destruction ni la stabilisation des cyanures.

Cette recherche s'oriente donc vers l'étude du potentiel d'atténuation naturelle des cyanures selon les trois mécanismes suivants : biodégradation, adsorption, précipitation. Ces phénomènes ont été retenus en fonction de la revue de la littérature effectuée et des conditions physico-chimiques présentes.

3.7 PLAN EXPÉRIMENTAL GÉNÉRAL

La figure 3.3 expose schématiquement la méthodologie employée pour le présent projet. Suite à la revue de la littérature et à la caractérisation du site, le choix des principaux mécanismes d'atténuation naturelle potentiels peut être fait. Le travail de modélisation d'équilibre géochimique apporte une vision complète des principales espèces de cyanures présentes en solution dans l'eau souterraine. Ces données, qui complètent la caractérisation en laboratoire, permettent de préparer les essais de laboratoire sur l'adsorption et la biodégradation tout en fournissant une réponse sur le potentiel de précipitation des complexes métaux-cyanures. Le tout a pour but d'apporter une réponse au sujet du potentiel d'atténuation naturelle des cyanures sur le site étudié.

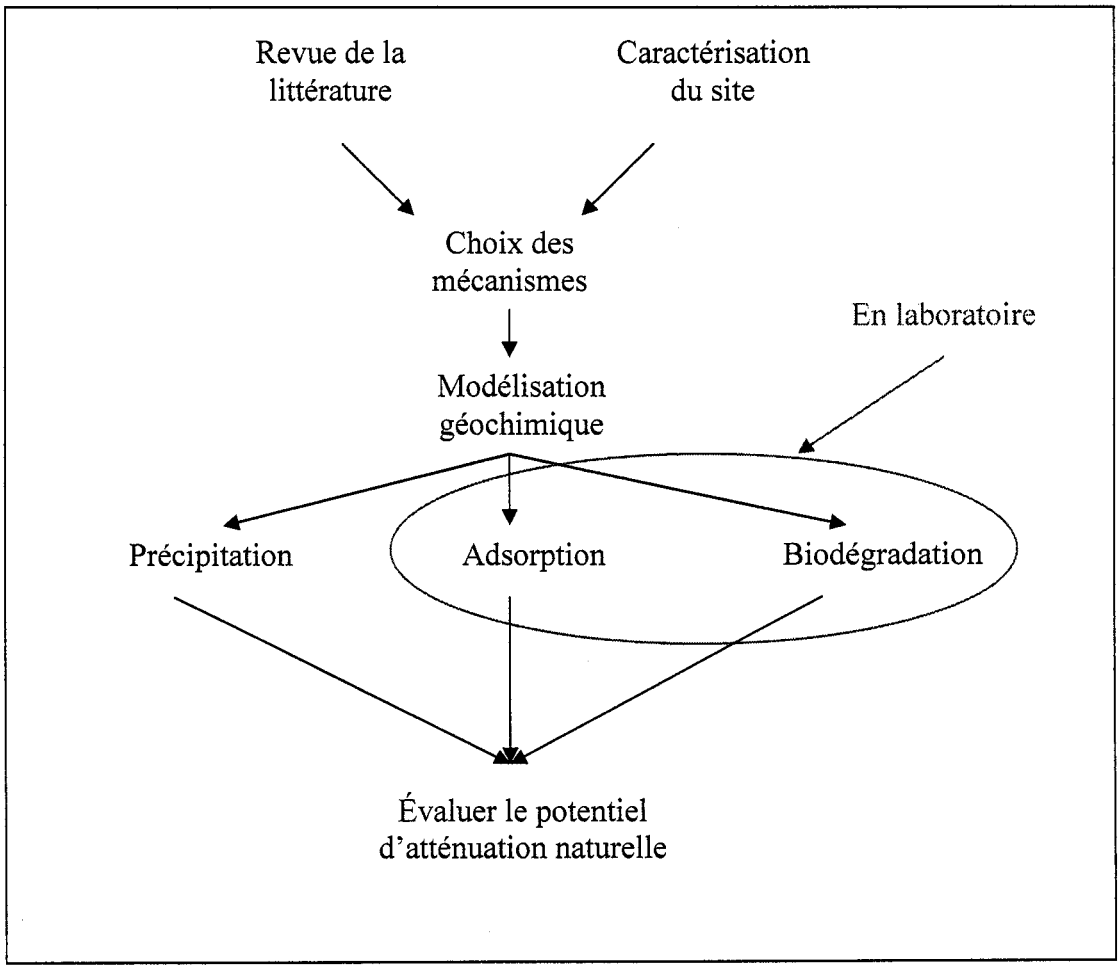


Figure 3.3 : Schéma de la méthodologie employée

CHAPITRE 4 - SPÉCIATION DES CYANURES DANS L'EAU SOUTERRAINE (MODÉLISATION D'ÉQUILIBRE GÉOCHIMIQUE)

Ce chapitre porte sur les études menées pour définir l'équilibre géochimique de l'eau souterraine du site et analyser le potentiel de précipitation de complexes cyanurés, un des mécanismes d'atténuation naturelle retenus à la suite de la revue de la littérature et de la caractérisation du site. Pour être en mesure de prédire les concentrations à l'équilibre des différentes espèces en solution dans l'eau souterraine, l'emploi d'un logiciel de modélisation d'équilibre est nécessaire. Dans le cadre de ce projet, c'est le logiciel VMINTEQ qui a été retenu.

L'utilisation de logiciel de modélisation d'équilibre géochimique a pour objectif de prédire les concentrations des différentes espèces présentes dans l'eau souterraine en y calculant les valeurs théoriques à l'équilibre en fonction des concentrations déjà connues. Les résultats obtenus à l'aide de ces logiciels sont principalement : la concentration de chaque ion en solution, la distribution de chaque espèce et le niveau de saturation (sous-saturé ou sursaturé). La prochaine section détaille la méthodologie et les résultats obtenus dans le cadre de la présente étude sur l'équilibre et le potentiel de précipitation de certaines espèces de cyanures.

4.1 VMINTEQ

VMINTEQ (version 2.30) est un logiciel de modélisation d'équilibre de spéciation géochimique capable de calculer l'équilibre parmi les phases dissoutes, adsorbées, solides et gazeuses dans un environnement défini. Il possède une vaste banque de

données thermodynamiques qui est adéquate pour solutionner un large éventail de problématiques sans la nécessité d'ajouter d'autres données de constantes d'équilibre. Toutefois, il est possible à l'usager de modifier cette banque de données pour l'ajuster à un problème en particulier.

Pour effectuer une modélisation, il faut tout d'abord entrer des données entre autres sur la concentration des espèces en solution, la température de l'eau, le pH, le potentiel redox et lancer le programme. Alors, VMINTEQ utilisera, par exemple, la valeur du pH de départ de la solution en conjonction avec les constantes d'équilibre thermodynamiques enregistrées dans la base de données est utilisée pour calculer la spéciation des acides et bases. De la même façon, le potentiel redox est utilisé pour distribuer les membres des couples redox selon les constantes thermodynamiques de demi-réactions (Dudal et Gérard 2004).

Entrée des données

Les données utilisées pour effectuer les modélisations sont celles retrouvées dans les tableaux 3.2 et 3.3. Les couples redox qui ont été spécifiés sont : Fe^{2+}/Fe^{3+} et Mn^{2+}/Mn^{3+}.

Ajouts

Pour cette étude, il était important que le logiciel tienne compte de toutes les réactions impliquant des cyanures, spécialement les complexes susceptibles de se former et de précipiter. Pour respecter cette contrainte, de nouvelles réactions ont été ajoutées à la base de données (tableau 4.1) :

Tableau 4.1 : Réactions chimiques et constantes de formation ajoutées à VMINTEQ

Réaction	Constante de formation* log K
$Fe^{3+} + 3\ H_2O \leftrightarrow Fe(OH)_3(s) + 3\ H^+$	-3,2
$3\ Fe^{2+} + 2\ Fe^{3+} + 12\ CN^- \leftrightarrow Fe_3(Fe(CN)_6)_2(s)$	173
$3\ Fe^{2+} + 4\ Fe^{3+} + 18\ CN^- \leftrightarrow Fe_4(Fe(CN)_6)_3(s)$	257
$3\ Fe^{3+} + 4\ H_2O \leftrightarrow Fe_3(OH)_4^{5+} + 4\ H^+$	-6,3
$Fe^{2+} + 6\ CN^- + 2\ K^+ + 2\ H^+ \leftrightarrow K_2H_2Fe(CN)_6$	52,306
$Fe^{2+} + 6\ CN^- + 3\ K^+ + H^+ \leftrightarrow K_3HFe(CN)_6$	50,224
$Fe^{2+} + 6\ CN^- + K^+ + H^+ \leftrightarrow KHFe(CN)_6^{2-}$	51,47
$Fe^{2+} + 6\ CN^- + Na^+ + H^+ \leftrightarrow NaHFe(CN)_6^{2-}$	51,434
$Fe^{2+} + Cl^- \leftrightarrow FeCl^+$	0,9
$Fe^{2+} + 2\ K^+ + 6\ CN^- \leftrightarrow K_2Fe(CN)_6^{2-}$	48,978
$Fe^{2+} + 2\ Na^+ + 6\ CN^- \leftrightarrow Na_2Fe(CN)_6^{2-}$	48,743

* Constantes tirées de Ghosh (1998)

Sans l'ajout de ces réactions, certains complexes ne peuvent être comptabilisés par le logiciel. Par exemple, pour le Bleu de Prusse ($Fe_4(Fe(CN)_6)_3(s)$), il faut tout d'abord entrer la stoechiométrie ($3xFe^{2+}$, $4xFe^{3+}$, $18xCN^-$) et la constante de formation. Ensuite, le logiciel utilise ces équations d'équilibre pour calculer, pour chaque espèce, sa concentration finale. Le travail consistait à dresser la liste des réactions d'équilibre impliquant les différentes espèces de cyanure et de s'assurer que chacune d'elle se retrouvait dans la base de données. Lorsqu'une des réactions était absente, il était nécessaire de procéder à l'ajout par une fonction faisant partie de VMINTEQ.

Jumelé aux réactions déjà présentes dans la base de données du logiciel, le présent ajout permet de s'assurer que les résultats de la modélisation sont les plus représentatifs possibles.

4.2 Résultats des modélisations et analyse

Le but de ces modélisations était de connaître les concentrations à l'équilibre pour chaque espèce et, s'il y a lieu, les espèces sursaturées dans l'eau souterraine donc susceptibles de précipiter.

Trois catégories de résultats de VMINTEQ ont été retenues pour chaque puits, voir annexes I à IV. Il s'agit de la table des concentrations, de la table de distribution des espèces et de l'index de saturation. La première donne la concentration dans l'eau souterraine de chaque composé en mol/L tandis que la deuxième montre la distribution de chaque espèce (ex. Na : 99,678% Na^+; 0,072% NaF; 0,011% $NaSO_4^-$; 0,229% $NaHCO_3$) et que la dernière donne l'indice de saturation.

En utilisant la table de distribution des espèces et la table des concentrations, il est possible de créer des graphiques montrant la distribution des espèces de cyanure à chaque puits (voir figure 4.1) ainsi que le tableau de la concentration des espèces (voir tableau 4.2).

Les résultats donnant l'indice de saturation montrent qu'aucune des espèces de cyanure ne précipitera à l'équilibre si les conditions du milieu demeurent inchangées. Toutes les valeurs, à tous les puits, se situent sous le seuil de saturation. Par exemple, les valeurs de l'indice de saturation (log (PAI/K)) pour le Bleu de Turnbull varient de –316 à –332, alors que la précipitation se produit à 0.

Distribution des espèces de cyanure mai 2003

La représentation graphique de la distribution des espèces de cyanures en fonction du puits pour les données de mai 2003 est présentée à la figure 4.1.

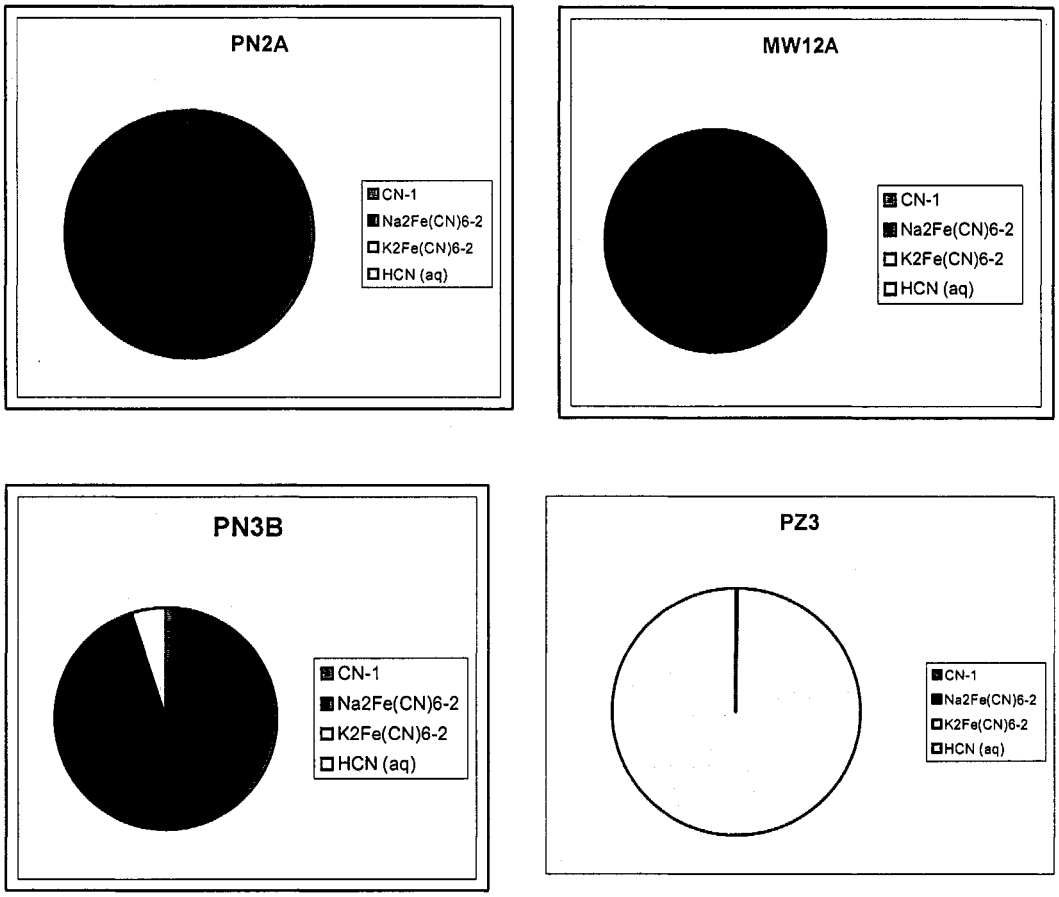


Figure 4.1 : Analyse de la distribution des espèces de cyanure - mai 2003

L'analyse de la distribution du cyanure montre de façon visuellement très nette que, dans trois des quatre puits à l'étude, ceux situés dans le panache de contamination, c'est une espèce de complexe fer-cyanure ($Na_2Fe(CN)_6^{-2}$) qui domine largement la composition à l'équilibre. Ces trois puits (PN2A, MW12A, PN3B) contiennent plus de 93% de ces complexes, les autres espèces de cyanures présentes étant principalement le cyanure libre (CN^-) et l'acide cyanhydrique (HCN). L'autre puits, le PZ3, celui qui est situé légèrement hors du panache en aval, est le seul à ne pas contenir de complexes fer-cyanures à l'équilibre. Il est dominé, selon les résultats de la modélisation par l'acide

cyanhydrique (HCN) à plus de 99% le reste étant du cyanure libre (CN^-). Selon les données d'analyses de mai 2003, la concentration en cyanure total au puits PZ3 était de 0,032 mg/L. Cela s'explique principalement par le fait que le pH de ce puits est sensiblement plus faible que pour les autres puits (6,70 pour PZ3, 9,48 pour PN2A, 8,84 pour PN3B et 8,91 pour MW12A) ce qui favorise la formation de cyanures libres et dissocie quelques complexes. Il faut rappeler que le HCN est très volatil et que, si jamais il était exposé à l'air libre, il se volatiliserait.

Distribution des espèces de cyanure 2002

Voici la représentation graphique de la distribution des espèces de cyanures en fonction du puits pour les données de 2002, présentée à la figure 4.2.

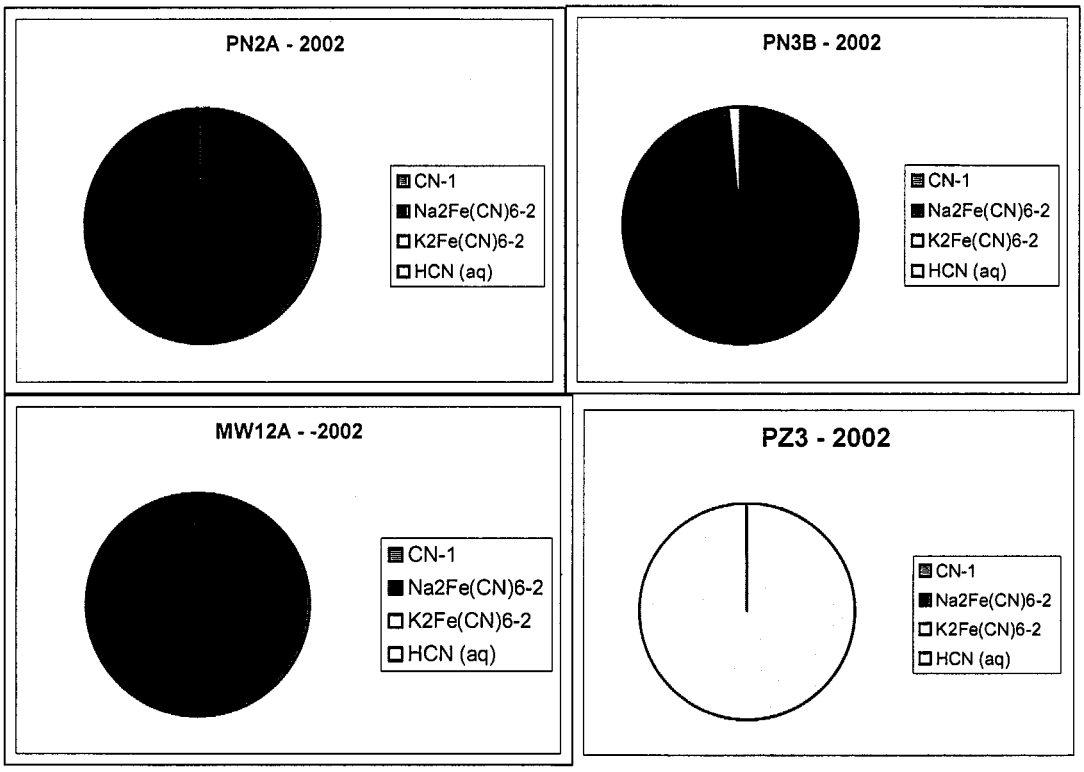


Figure 4.2 Analyse de la distribution des espèces de cyanure - 2002

Les résultats de la modélisation géochimique à l'équilibre faite avec les données de 2002 sont très semblables à ceux obtenus avec les données de mai 2003. Ici aussi le $Na_2Fe(CN)_6^{-2}$ domine largement la spéciation du cyanure à trois des quatre puits étudiés. Comme pour 2003, les autres espèces de cyanures présentes sont principalement le cyanure libre (CN^-) et l'acide cyanhydrique (HCN). Au puits PZ3 se retrouve encore une majorité de HCN et de CN^- sans présence de complexes. Ces deux séries de modélisation indiquent une certaine continuité dans la composition de l'eau souterraine, les différentes espèces à l'équilibre étant sensiblement identiques.

Ces deux séries de résultats sont également conformes à ce qui était attendu selon la littérature. Meeussen et al.(1992) entre autres a identifié que les complexes fer-cyanures sont souvent dominant dans l'eau souterraine. Cette hypothèse se vérifie sur le site étudié dans cette étude. Ces complexes sont dominants parce qu'ils sont stables en absence de lumière.

Comparaison : Analyse détaillée – Modélisation à l'équilibre

Pour faciliter la comparaison entre les valeurs obtenues de la caractérisation physico-chimique en laboratoire et les résultats de la modélisation géochimique, le tableau 4.2 donne les concentrations des différentes espèces de cyanure selon les deux méthodes :

Tableau 4.2 : Concentrations des espèces de cyanure

Contenu en CN à différents puits	Analyse détaillée de mai 2003		Modélisation avec VMINTEQ (données de mai 2003)	
	CN_{Total}	*CN_{SAD}	**CN_{Total}	Complexes fer-cyanures
	(mg CN/l)	(mg CN/l)	(mg CN/l)	(mg CN/l)
PN2A	4,8	4,72	4,8	4,8
PN3B	0,056	0,042	0,056	0,052
MW12A	2,6	2,58	2,6	2,59
PZ3	0,032	0,032	0,032	$< 10^{-5}$

* Calculé comme la différence entre le CN_{Total} et le CN_{WAD}

** Calculé en additionnant les valeurs des concentrations des cyanures WAD, SAD et libres du tableau des concentrations des espèces en solution

Ce tableau montre que la modélisation vient confirmer les concentrations recueillies lors de l'analyse détaillée, notamment au niveau de la concentration totale en cyanure et de la dominance des espèces complexées. La seule différence se situe au niveau du puits PZ3 qui, selon la modélisation n'est pas dominé par des espèces de complexes fer-cyanure mais plutôt par le cyanure libre.

Le fait que les résultats de la modélisation sont du même ordre de grandeur que ceux de l'analyse détaillée, surtout pour les complexes fer-cyanure, démontre que ceux-ci sont chimiquement stable. L'atténuation naturelle des complexes fer-cyanure ne se fera pas par des réactions chimiques naturelles sauf par la précipitation si ils rencontrent une quantité importante de fer entraînant la formation de Bleu de Prusse ou de Bleu de Turnbull.

Il faut cependant faire attention aux résultats provenant de la modélisation car si les conditions du terrain à l'étude venaient à changer (ex. pH, redox), cela aurait une grande incidence sur l'équilibre géochimique. Un changement dans la température, par exemple, aurait pour effet de modifier les constantes d'équilibre de toutes les réactions entraînant un changement certain dans les concentrations finales. De même, il a été montré dans la revue de la littérature que le pH influence grandement la spéciation des cyanures.

Précipitation

L'analyse des données de saturation indique qu'aucune des espèces solides de complexes contenant du cyanure n'a dépassé sa limite de solubilité ni ne l'approche contrairement à certaines autres espèces en solution telles que la goethite, la magnetite et le ferrihydrite (voir Annexes I à IV). Il est donc possible d'en conclure que, à moins que les conditions du site changent ou que de nouvelles substances soient ajoutées à l'eau souterraine, il y a peu de chances pour qu'il y ait une précipitation des cyanures.

Le traitement des contaminations en cyanure de l'eau souterraine par précipitation peut néanmoins être intéressant. Les résultats obtenus par Ghosh (1998) montrent qu'il est possible, en créant une barrière réactive, d'entraîner la précipitation des cyanures. Cette précipitation affectera les complexes fer-cyanures qui sont ceux qui, en contact avec le fer, entraîneront la formation des complexes Bleu de Prusse et Bleu de Turnbull. Cette

méthode, bien qu'elle ne constitue pas de l'atténuation naturelle, découle de l'une des caractéristiques des cyanures, la formation de complexe insoluble, étudiée lors du devenir des cyanures dans l'eau souterraine.

4.3 Conclusion

La précipitation n'a donc pas une influence importante sur le devenir du cyanure dans l'eau souterraine au site étudié. Par contre, il pourrait être intéressant d'étudier la possibilité de faire précipiter des complexes, en ajoutant du fer par exemple, puisque la majorité des cyanures se trouvent déjà sous une forme complexée, donc possèdent une solubilité limitée et peuvent former des complexes insolubles. Les principales espèces présentes sur le site sont des ferricyanures et des ferrocyanures (complexés avec Na ou K), complexes qui possèdent une solubilité moyenne alors que, si l'on ajoute du fer, les complexes présents seront du Bleu de Prusse ($Fe_4(Fe(CN)_6)_3$) ou du Bleu de Turnbull ($Fe_3(Fe(CN)_6)_2$). Le Bleu de Prusse sera dominant à pH faible et pE élevé alors que le Bleu de Turnbull aura préséance à pH faible à élevé sous des conditions anoxiques.

L'évolution des résultats entre 2002 et mai 2003 fait état d'une grande stabilité dans la spéciation des espèces. En somme, cela est le cas car les propriétés physico-chimiques ont peu évoluées entre les deux années. De même, ceci prouve la stabilité des complexes fer-cyanures dans l'eau souterraine.

Les résultats de cette section, notamment la dominance des complexes fer-cyanures, seront pris en compte dans les expérimentations suivantes, sur la biodégradation et l'adsorption. En effet, à la lumière des conclusions faites à partir de la modélisation, il sera suggéré, par exemple, d'utiliser des complexes fer-cyanures dans l'étude des autres phénomènes dans le but de représenter le plus fidèlement possible les véritables conditions du site.

Il est à noter que la modélisation ne tient pas compte des autres phénomènes possibles tels que l'adsorption et la biodégradation. Ces derniers seront étudiés dans les chapitres suivants.

CHAPITRE 5 - ÉTUDE DE L'ADSORPTION DES CYANURES

Lors de la revue de la littérature, il a été relevé que plusieurs études suggèrent que les cyanures peuvent s'adsorber sur différentes surfaces, notamment les oxydes de fer, de manganèse et d'aluminium, les carbonates, les minéraux argileux et sur la matière organique. Les essais en laboratoire et leurs résultats présentés dans la présente section ont pour but de déterminer s'il existe un potentiel d'atténuation naturelle des cyanures par un mécanisme d'adsorption pouvant expliquer la diminution de la concentration en cyanure le long du panache. Ces essais ont été effectués avec de l'eau souterraine et du matériel géologique provenant du site. Le principe est de mettre en contact de l'eau et du sol pendant un certain temps et d'analyser la répartition à l'équilibre des cyanures entre les deux phases. Des protocoles ont été développés pour assurer l'intégrité ainsi que la reproductibilité de l'expérience. Ils sont disponibles en annexe (voir annexes V, VI, VII) et sont résumés dans les prochaines sections.

Précédemment, les études de modélisation géochimique ont démontré que l'espèce dominante dans les puis situés à l'intérieur du panache consiste en un complexe fer-cyanure. Des essais ont donc été menés avec du ferrocyanure de potassium pour tenir compte de cette caractéristique. De façon générale, les essais ont été conduits de sorte à refléter le plus fidèlement possible les vraies conditions de terrain rencontrées.

5.1 MÉTHODOLOGIE

Pour simplifier la structure et la réalisation des essais en laboratoire et par la même occasion diminuer les risques d'erreurs et d'omissions, ceux-ci ont été divisés en trois

parties associées chacune à un protocole : préparation des sols, préparation des eaux et essais d'adsorption.

5.1.1 Préparation des sols (Annexe V)

Le protocole P61-A. (voir Annexe V), *Préparation de 4 sols en vue de réaliser des essais d'adsorption : récupération des sols des tubages d'échantillonnages et lavage du sol*, concerne, tel que son nom l'indique, la préparation du matériel géologique qui a été utilisé dans les essais d'adsorption qui suivent.

Ses principaux objectifs sont de permettre la récupération du matériel géologique des quatre puits provenant du site étudié pour utilisation dans les expériences à venir ainsi que de les préparer aux tests d'adsorption en les pesant, lavant et entreposant jusqu'à la réalisation des tests.

Les tubages remplis de sol sont d'abord pesés puis introduits dans un sac à gants où ils sont ouverts sous conditions anaérobies. Les quantités désirées sont alors distribuées dans des contenants pré-identifiés. Les contenants sont ensuite scellés et entreposés dans le noir, à 4°C, jusqu'à leur utilisation. Cette démarche est effectuée un puits à la fois.

Une portion des sols extraits doit être lavée (voir le protocole pour les détails). De l'eau déionisée est alors ajoutée au sol dans une proportion 5:1, le contenant est agité puis le mélange filtré, le tout répété trois fois. Ensuite, le matériel géologique est séché et utilisé dans les tests d'adsorption ainsi que du sol non lavé. Le lavage du sol a pour but de vérifier l'effet de celui-ci sur le potentiel d'adsorption.

5.1.2 Préparation des eaux (Annexe VI)

De la même façon que le protocole P61-A est spécifique à la préparation des sols, le protocole P61-B (voir Annexe VI), *Préparation de trois eaux synthétiques pour des essais d'adsorption soit : eau déionisée, eau déionisée contaminée au NaCN et eau déionisée contaminée au* $KFe(CN)_6^{-3}$, est consacré à la technique de préparation des eaux utilisées pendant les tests d'adsorption.

Son principal objectif est de préparer deux solutions d'eau synthétique à partir d'eau déionisée et des solutions d'eau synthétique contaminée. Les deux types d'eau synthétique contaminée produites sont soit contaminée au cyanure libre (NaCN), soit au complexe ferrocyanure ($K_4Fe(CN)_6$) dans le but de vérifier l'effet de la spéciation du cyanure sur son potentiel d'adsorption.

La première étape consiste à fabriquer deux solutions concentrées d'eau contaminée aux cyanures, l'un à 250 mg CN/L de NaCN et l'autre à 250 mg CN/L de $K_4Fe(CN)_6$. Ces solutions servent à ajouter ponctuellement une quantité définie de cyanure lors des essais.

Ensuite, il est traité de la préparation des eaux synthétiques. Ces eaux sont faites à base d'eau déionisée. Elles sont ajustées pour détenir une force ionique de 0,01M (avec l'ajout de NaCl) ainsi qu'un pH sensiblement identique à celui réel du puits correspondant.

5.1.3 Essais d'adsorption (Annexe VII)

Le protocole P61-C (voir Annexe VII), *Essais d'adsorption en «batch» des espèces de cyanure contenues dans de l'eau, synthétique et du site, contaminée au cyanure libre et*

aux complexes fer-cyanure sur du matériel géologique provenant du site étudié, suit les protocoles 61-A et 61-B et comporte toutes les étapes nécessaires à la réalisation des essais une fois les sols et les eaux préparés. Son objectif est d'évaluer le potentiel d'adsorption du cyanure sur le site. Les essais sont faits à l'aide d'eau souterraine recueillie sur le site ainsi que d'une eau synthétique contaminée (voir protocole P61-B). Ceci, jumelé avec l'utilisation de matériel géologique provenant du site (voir protocole P61-A), permet de simuler fidèlement le devenir du cyanure dans le panache.

Le tableau 5.1, tiré du protocole, expose les principaux mélanges effectués dans les essais d'adsorption. Pour chaque mélange, 11 ou 12 échantillons, en duplicata, sont prélevés. Vu le grand nombre d'échantillons que cette expérience implique, celle-ci a été effectuée puits par puits.

Pour chaque puits, quatre types de mélange ont été effectués : 1) sol du site non lavé avec de l'eau synthétique et l'ajout d'une contamination au cyanure libre (NaCN), 2) sol du site non lavé avec de l'eau synthétique et l'ajout d'une contamination au ferrocyanure ($K_4Fe(CN)_6$), 3) sol du site non lavé avec de l'eau souterraine du site et l'ajout de NaCN (puits PZ3 et PN3B), 4) sol du site lavé avec de l'eau souterraine du site et l'ajout de NaCN (puits PZ3 et PN3B). Ces mélanges permettent de séparer l'influence qu'ont sur l'adsorption des cyanures les différents paramètres tels que : sol lavé ou non, eau synthétique et eau souterraine du site, spéciation des cyanures et matériel géologique utilisé. Dans un premier temps, la différence entre les résultats des sols lavés et des sols non-lavés permet de conclure si le lavage du sol engendre une plus grande capacité d'adsorption par la libération de sites d'adsorption autrement occupés. L'utilisation d'une eau synthétique quant à elle permet de déterminer l'influence des autres espèces en solution dans l'eau souterraine du site sur le potentiel d'adsorption. Puis, l'ajout de cyanure libre ou de cyanure complexé indique si la spéciation du cyanure a un impact important sur le degré d'adsorption et, si oui, quels sont les espèces possédant le plus grand potentiel. Finalement, l'influence du matériel géologique a été étudié en

employant du sol provenant de plusieurs puits différents et ayant, par conséquent, des propriétés différentes.

Le tableau 5.1 spécifie également quelle est l'eau synthétique associée à chaque puits ainsi que la concentration en cyanure qui doit être ajouté, à partir des solutions concentrées à 250 mg/L. L'ajout de cyanure a été effectué dans le but d'assurer une concentration significative à l'intérieur des échantillons. Il a été nécessaire pour les puits PZ3 et PN3B car la concentration en cyanure total y était faible au départ et lorsque de l'eau synthétique était utilisée. De plus, l'eau synthétique a été ajustée de sorte que son pH correspond au pH de l'eau souterraine du puits correspondant pour reproduire les caractéristiques du terrain.

Tableau 5.1 : Mélanges sol-eau étudiés lors des tests d'adsorption

Sol	Lavage	Eau utilisée	Ajout à 48h
PN2A	Non-lavé	Eau synthétique déionisée (0,01 M NaCl, pH = 9)	NaCN (5 mg/L CN^-)
	Non-lavé	Eau synthétique déionisée (0,01 M NaCl, pH = 9)	$K_4Fe(CN)_6$ (5 mg/L CN^-)
	Non-lavé	Eau souterraine du site	Aucun
	Lavé	Eau souterraine du site	Aucun
PN3B	Non-lavé	Eau synthétique déionisée (0,01 M NaCl, pH = 9)	NaCN (5 mg/L CN^-)
	Non-lavé	Eau synthétique déionisée (0,01 M NaCl, pH = 9)	$K_4Fe(CN)_6$ (5 mg/L CN^-)
	Non-lavé	Eau souterraine du site	NaCN (5 mg/L CN^-)
	Lavé	Eau souterraine du site	NaCN (5 mg/L CN^-)
MW12A	Non-lavé	Eau synthétique déionisée (0,01 M NaCl, pH = 9)	NaCN (5 mg/L CN^-)
	Non-lavé	Eau synthétique déionisée (0,01 M NaCl, pH = 9)	$K_4Fe(CN)_6$ (5 mg/L CN^-)
	Non-lavé	Eau souterraine du site	Aucun
	Lavé	Eau souterraine du site	Aucun
PZ3	Non-lavé	Eau synthétique déionisée (0,01 M NaCl, pH = 6,5)	NaCN (5 mg/L CN^-)
	Non-lavé	Eau synthétique déionisée (0,01 M NaCl, pH = 6,5)	$K_4Fe(CN)_6$ (5 mg/L CN^-)
	Non-lavé	Eau souterraine du site	NaCN (5 mg/L CN^-)
	Lavé	Eau souterraine du site	NaCN (5 mg/L CN^-)

Utilisant des tubes à centrifugeuse (40 mL) et respectant les mélanges identifiés au tableau ci-dessus, 3,5 g de sol humide ont été incorporés dans chaque tube et 35 mL

d'eau (ratio 1 :10) ont par la suite été ajoutés. Les tubes ainsi préparés ont ensuite été mis sur un mélangeur de type «wrist-action» où ils ont été brassés jusqu'à leur échantillonnage ou à leur retrait pour l'ajout de la solution concentrée en cyanure. Dans ce dernier cas, ils sont aussitôt remis sur le mélangeur suite à l'ajout.

L'échantillonnage, pour chaque série avec ajout de contaminant, a été fait (environ) au temps 0, après 12h, 24h, 48h, 51h, 54h, 60h, 72h, 96h, 120h, 168h et 216h (ou 264h) (note : à 48h, les tubes sont retirés pour y introduire une solution concentrée en CN^-) tandis que l'échantillonnage, pour chaque série sans ajout de contaminant, a été fait au temps 0, après 3h, 6h, 12h, 24h, 48h, 72h, 96h, 120h, 168h et 216h (ou 264h). Les échantillons ne sont pas pris au même heures selon si un ajout est fait ou non car, lors d'un ajout, les données les plus importantes sont celles suivant immédiatement l'ajout, tandis que s'il n'y a pas d'ajout, les données les plus importantes sont celles du début. Les prises d'échantillons sont donc concentrées à ces moments. Au moment de l'échantillonnage, les tubes sont retirés du mélangeur et placés dans la centrifugeuse. Une fois l'eau et le sol séparés par centrifugation, l'eau est recueillie par filtration (à l'aide d'une seringue ou d'une unité filtrante) et mise dans des contenants qui seront conservés dans le noir, à 4°C jusqu'à leur envoi dans un laboratoire d'analyse certifié pour les analyses de CN total par colorimétrie. Les tubes échantillonnés sont sacrifiés.

Les données concernant le pH et le potentiel d'oxydoréduction ont été mesurées et notées tout au long des essais d'adsorption (voir Annexe XI) alors que les concentrations en cyanure total ont été analysées dans un laboratoire d'analyse externe accrédité en analyses environnementales. Le pH et le rédox ont été mesurés pour s'assurer que les variations observées sur les courbes de concentration en cyanure total ne sont pas dues à des changements dans les conditions physico-chimiques du milieu.

5.2 RÉSULTATS ET DISCUSSION

Les résultats pour la teneur en CN total dans la phase aqueuse sont présentés ci-dessous sous forme de graphique présentant la concentration en CN total en fonction du moment où les échantillons ont été pris. Les 16 graphiques sont regroupés par puits, soit 4 graphiques par puits : graphiques 1 à 4 - PN2A, graphiques 5 à 8 - PN3B, graphiques 9 à 12 - MW12A et graphiques 13 à 16 - PZ3) selon l'ordre de ceux-ci dans le panache.

La figure 5.1 présente l'évolution de la concentration en CN total dans le temps pour le puits PN2A sous les conditions suivantes : matériel géologique non lavé, eau synthétique et cyanure ajouté sous forme de NaCN (5 mg CN^-/L).

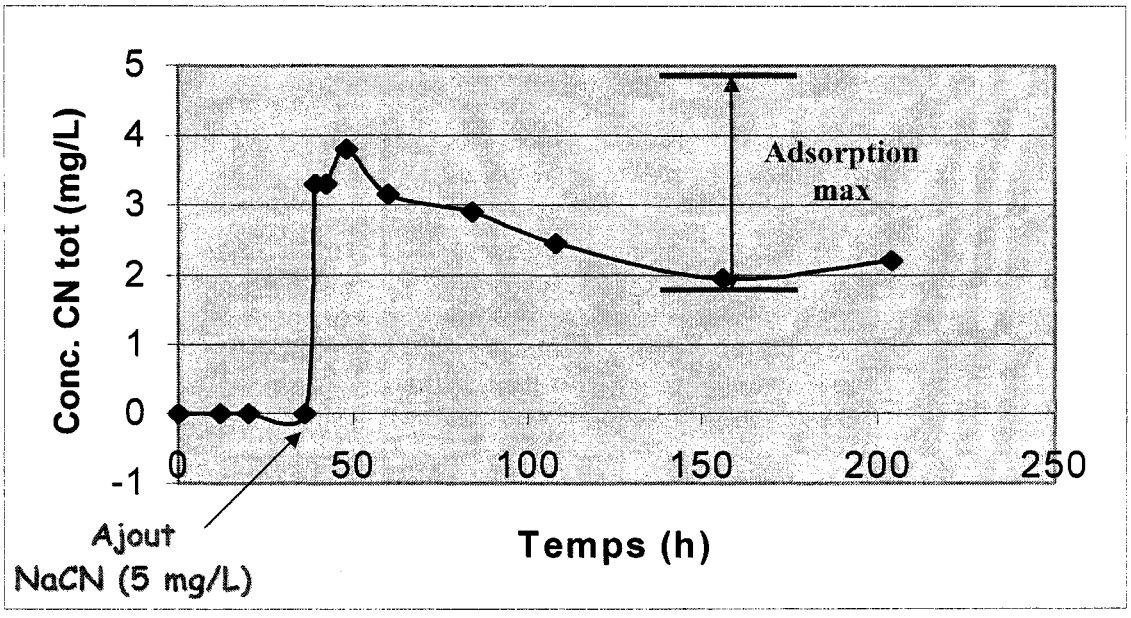


Figure 5.1 : PN2A – Concentration en cyanure total en fonction du temps (Sol non lavé/eau synthétique/NaCN ajouté)

La figure 5.2 présente l'évolution de la concentration en CN total dans le temps pour le puits PN2A sous les conditions suivantes : matériel géologique non lavé, eau synthétique et cyanure ajouté sous forme de $K_4Fe(CN)_6$ (5 mg CN^-/L).

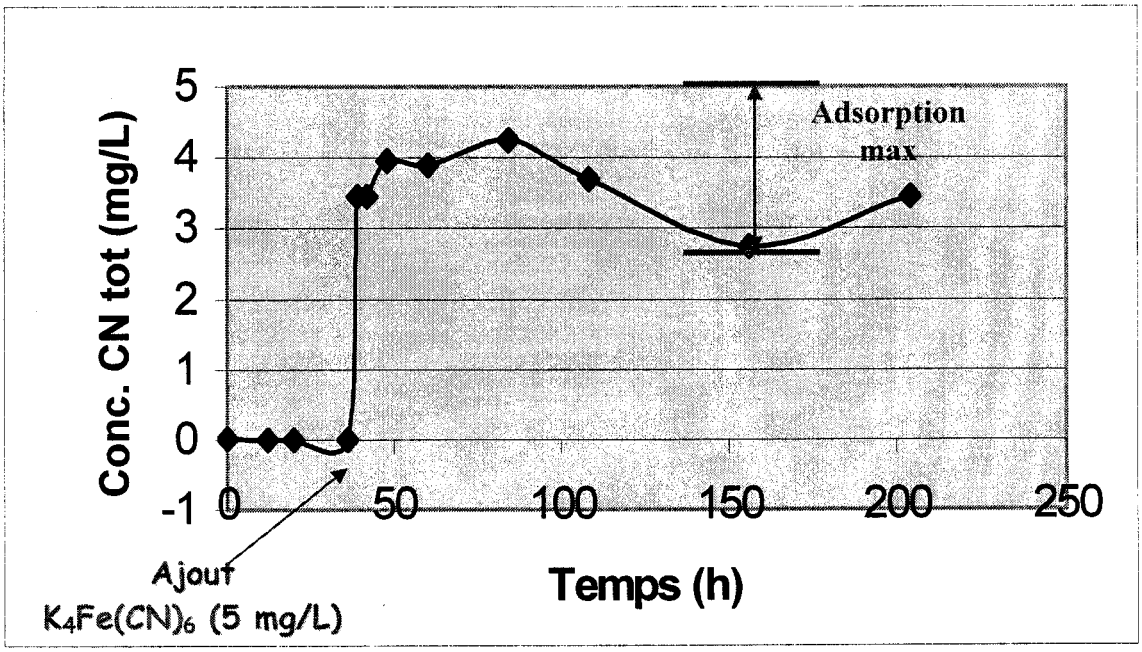


Figure 5.2 : PN2A - Concentration en cyanure total en fonction du temps (Sol non lavé/eau synthétique/$K_4Fe(CN)_6$ ajouté)

Ainsi, les tendances générales observées pour le puits PN2A montrent pour les deux essais avec de l'eau synthétique (fig 5.1 et 5.2) une certaine adsorption faisant passer la concentration en cyanure total de 5 mg/L à des minima de 1,95 mL/L et 2,75 mg/L. Au début, les concentrations en CN total sont nulles car il s'agit d'eau synthétique. Vers 48h, l'ajout de 5 mg/L de cyanure sous forme de NaCN ou de $K_4Fe(CN)_6$ fait augmenter les concentrations qui n'atteignent pas 5 mg/L à cause d'une adsorption immédiate. Ceci est suivi par une période d'adorption jusqu'à une adsorption maximale. Par contre, ce niveau maximum d'adsorption est suivi d'un certain relargage de CN et une hausse de la concentration lorsque l'ajout est sous forme de $K_4Fe(CN)_6$. L'écart-type entre les

duplicatas est faible, pour la figure 5.1 il varie de 0 à 0,3 mg/L et il varie de 0 à 0,2 mg/L pour la figure 5.2. Les niveaux de CN se stabilisant, il est possible de prétendre que l'équilibre géochimique est atteint lors de ces deux essais.

La figure 5.3 présente l'évolution de la concentration en CN total dans le temps pour le puits PN2A sous les conditions suivantes : matériel géologique non lavé et eau souterraine du site.

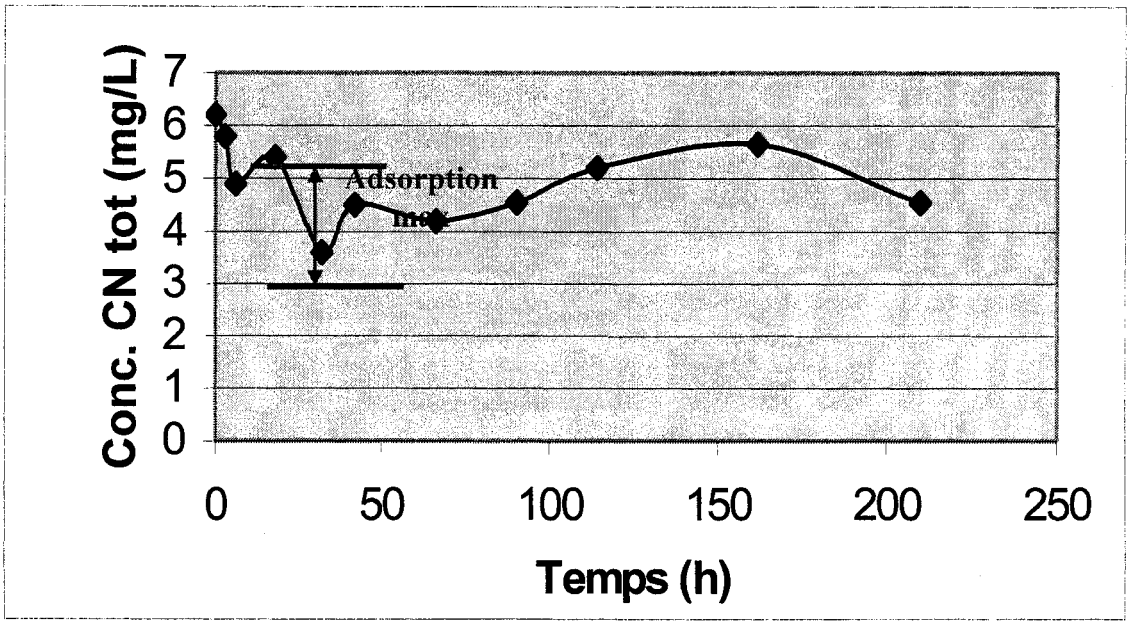


Figure 5.3 : PN2A - Concentration en cyanure total en fonction du temps (Sol non lavé/eau du site)

La concentration initiale dans l'eau souterraine est de 4,8 mg/L. Une désorption est observée au début de l'essai suivi d'une période d'adsorption où les concentrations en CN total diminue sous 4 mg/L, mais cette période est suivie d'une désorption qui entraîne une remontée du niveau de concentration en CN total. L'écart-type entre les duplicatas pour la figure 5.3 varie de 0 à 1,05 mg/L, ce qui indique qu'il peut parfois exister un cetain écart entre les deux échantilons. La tendance pour les derniers échantillons montre l'atteinte d'un certain niveau d'équilibre après 200 heures.

La figure 5.4 présente l'évolution de la concentration en CN total dans le temps pour le puits PN2A sous les conditions suivantes : matériel géologique lavé et eau du site.

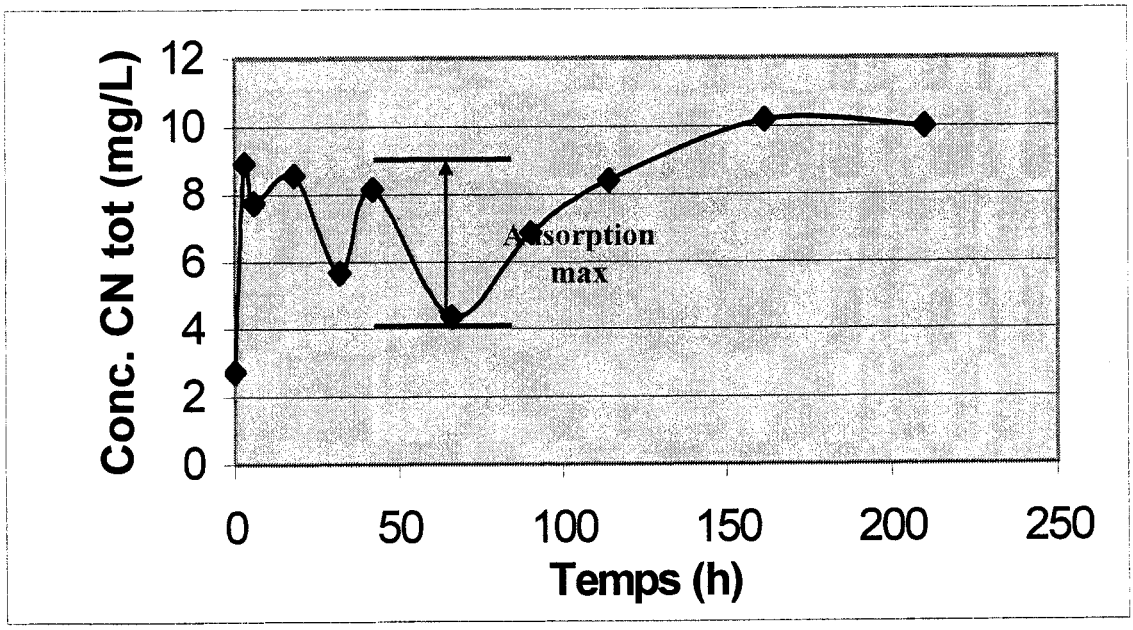


Figure 5.4 : PN2A - Concentration en cyanure total en fonction du temps (Sol lavé/eau du site)

Par contre, contrairement au essais avec du sol non lavé (fig. 5.1 à 5.3) dans le cas avec le sol lavé (fig. 5.4), il est évident que le relargage est plus important que l'adsorption, faisant grimper la concentration en cyanure total dans le temps jusqu'à 10,2 mg/L. L'eau souterraine contenait initialement 4,8 mg/L mais une désorption a fait augmenter ce nombre à environ 9 mg/L. Une période d'adsorption a suivi avant la période de relargage. L'écart-type entre les duplicatas pour la figure 5.4 varie de 0,15 à 2,8 mg/L, ce qui indique qu'il peut parfois exister un cetain écart entre les deux séries échantilons. Il existe dans ce cas une désorption qui semble persister jusqu'à l'atteinte de l'équilibre vers 200 heures.

La figure 5.5 présente l'évolution de la concentration en CN total dans le temps pour le puits PN3B (milieu du panache) sous les conditions suivantes : matériel géologique non lavé, eau synthétique et cyanure ajouté sous forme de NaCN (5 mg CN^-/L).

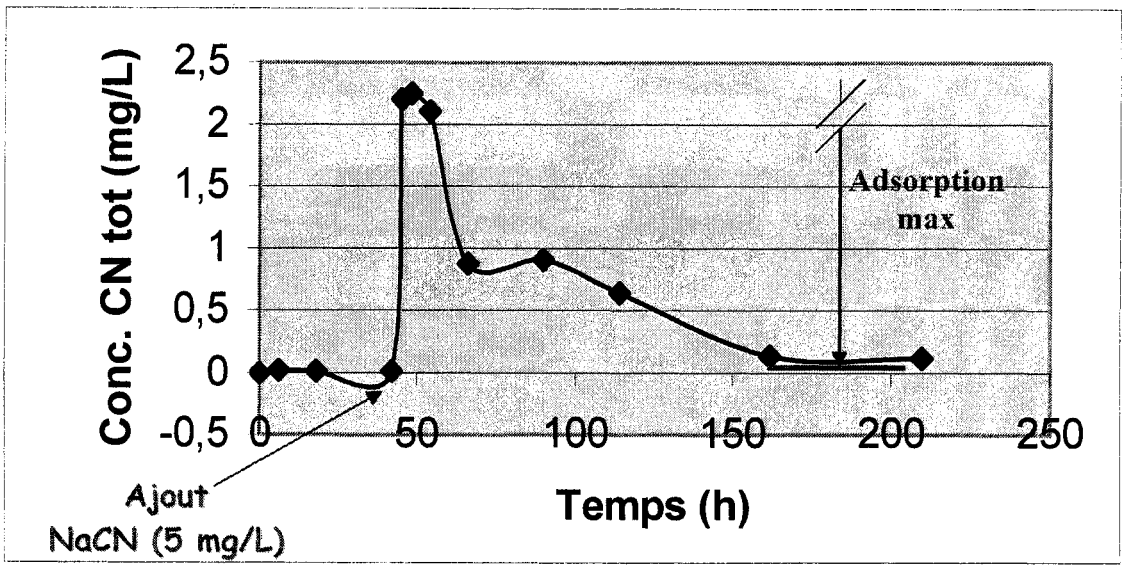


Figure 5.5 : PN3B - Concentration en cyanure total en fonction du temps (Sol non lavé/eau synthétique/NaCN ajouté)

Dans le cas ci-dessus, les concentrations initiales de l'eau synthétique utilisée est de 0 mg/L jusqu'à l'ajout de 5 mg CN/L de NaCN, suivi d'une adsorption instantanée qui est observée alors qu'une concentration maximale de 2,25 mg/L de CN est notée après l'ajout. Cette adsorption se poursuit et la concentration finale en CN se retrouve sous les 0,5 mg/L. L'écart-type entre les duplicatas pour la figure 5.5 varie de 0 à 0,5 mg/L, ce qui est faible. L'équilibre semble avoir été atteint après 200 heures.

La figure 5.6 présente l'évolution de la concentration en CN total dans le temps pour le puits PN3B (milieu du panache) sous les conditions suivantes : matériel géologique non lavé, eau synthétique et cyanure ajouté sous forme de $K_4Fe(CN)_6$ (5 mg CN^-/L).

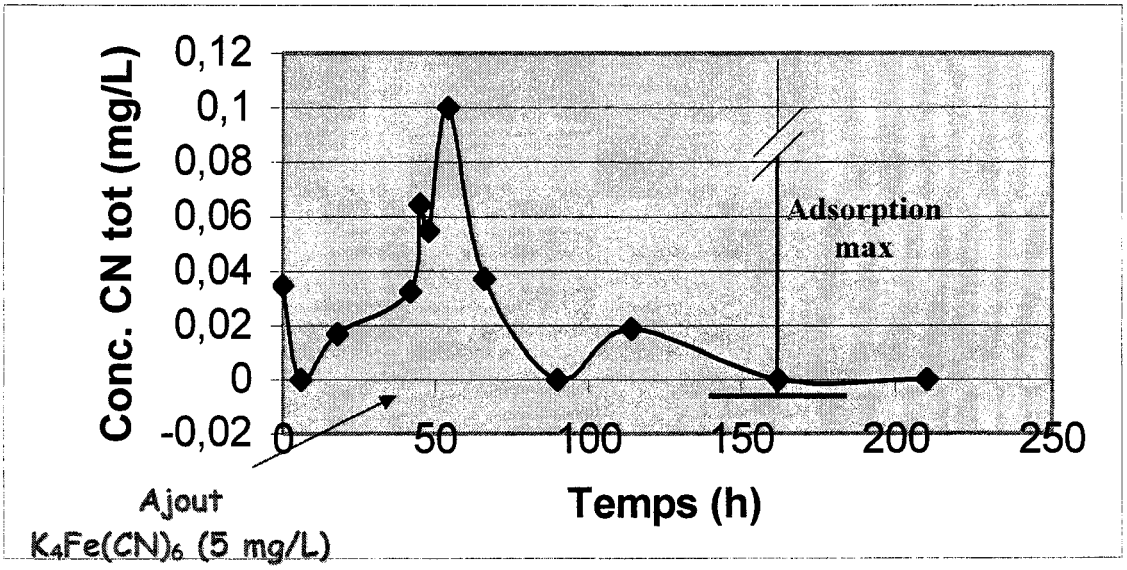


Figure 5.6 : PN3B - Concentration en cyanure total en fonction du temps (Sol non lavé/eau synthétique/$K_4Fe(CN)_6$ ajouté)

Comme pour le cas avec le NaCN ajouté, la figure 5.6 montre clairement que le $K_4Fe(CN)_6$ est rapidement adsorbé par le matériel géologique suite à l'ajout de 5 mg CN/L. L'adsorption se poursuit, si bien que de la concentration de l'ajout de 5 mg/L, elle est presque non détectable après 160 heures. La concentration en CN_{Total} atteint donc l'équilibre. L'écart-type entre les duplicatas pour la figure 5.6 varie de 0 à 0,03 mg/L, ce qui est très faible. Les complexes fer-cyanures semblent ici s'adsorber très rapidement.

La figure 5.7 présente l'évolution de la concentration en CN total dans le temps pour le puits PN3B (milieu du panache) sous les conditions suivantes : matériel géologique non lavé, eau du site et ajout de NaCN (5 mg CN^-/L).

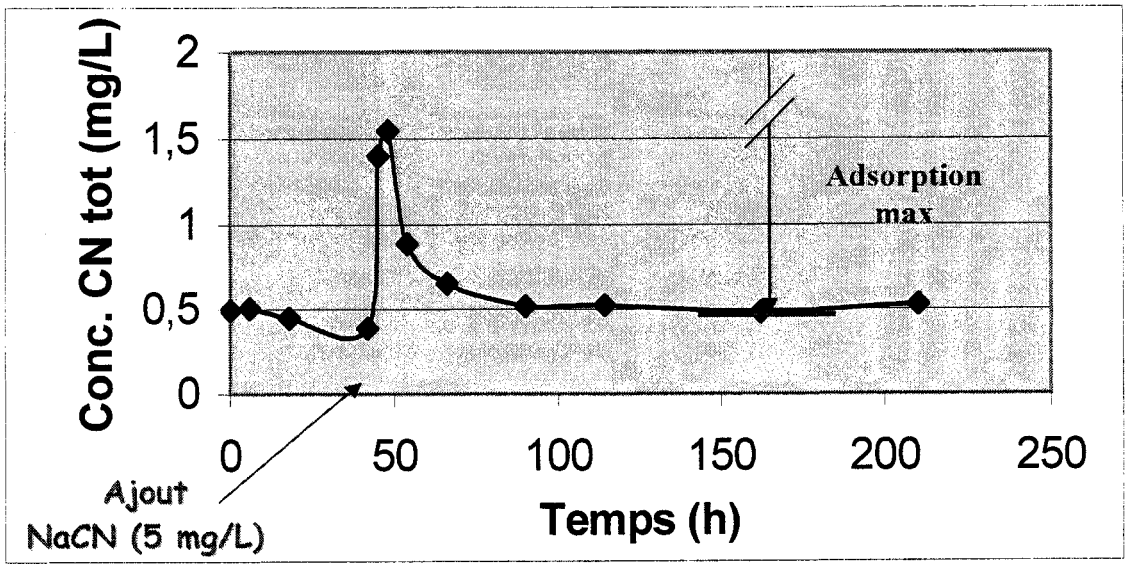


Figure 5.7 : PN3B - Concentration en cyanure total en fonction du temps (Sol non lavé/eau du site/NaCN ajouté)

L'utilisation de l'eau du site, comparativement à l'utilisation d'eau synthétique (voir fig. 5.5) n'affecte pas l'adsorption instantanée du CN par le matériel géologique. Les concentrations sont faibles jusqu'à l'ajout de NaCN 5 mg CN/L vers 48h. Par contre, le même niveau d'adsorption final n'est pas atteint alors qu'environ 0,5 mg/L de cyanure est toujours en solution lorsque l'équilibre est atteint, soit après environ 150 heures. L'écart-type entre les duplicatas pour la figure 5.7 varie de 0 à 0,4 mg/L, ce qui est faible.

La figure 5.8 présente l'évolution de la concentration en CN total dans le temps pour le puits PN3B (milieu du panache) sous les conditions suivantes : matériel géologique lavé, eau du site et ajout de NaCN (5 mg CN^-/L).

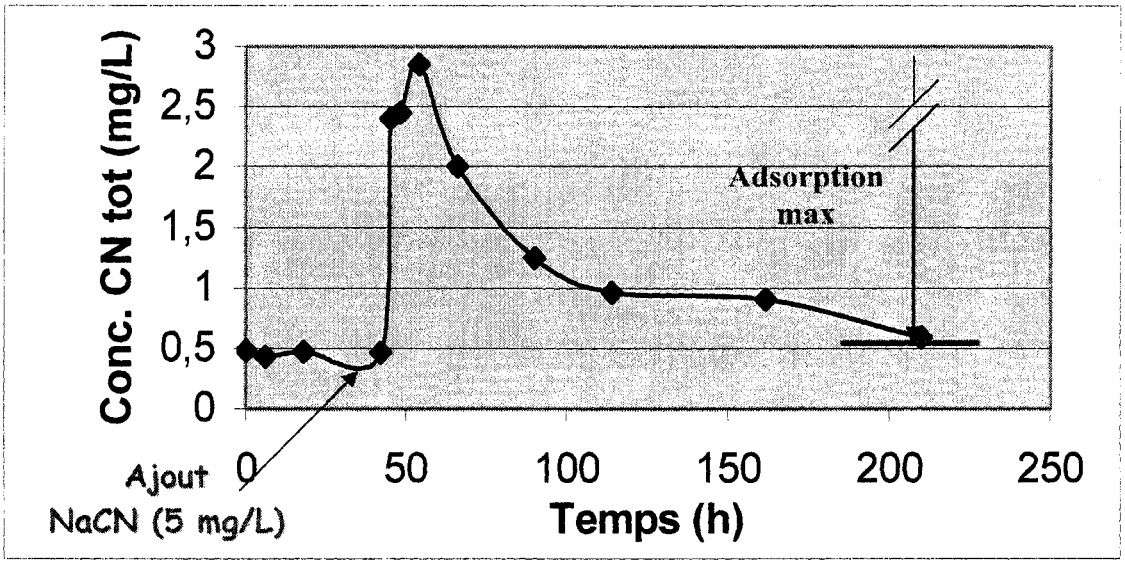


Figure 5.8 : PN3B - Concentration en cyanure total en fonction du temps (Sol lavé/eau du site/NaCN ajouté)

Comparativement aux autres essais impliquant le matériel géologique du puits PN3B, cet essai montre une adsorption instantanée beaucoup plus faible suite à l'ajout vers 48h. Ce phénomène est probablement dû au lavage du sol qui a été utilisé. L'adsorption y est tout de même importante, la concentration en CN descendant sous les 1 mg/L alors que l'équilibre n'est peut-être pas encore atteint après 200 heures. L'écart-type entre les duplicatas pour la figure 5.8 varie de 0 à 0,8 mg/L, mais est en général faible.

La figure 5.9 présente l'évolution de la concentration en CN total dans le temps pour le puits MW12A sous les conditions suivantes : matériel géologique non lavé, eau synthétique et cyanure ajouté sous forme de NaCN (5 mg CN^-/L).

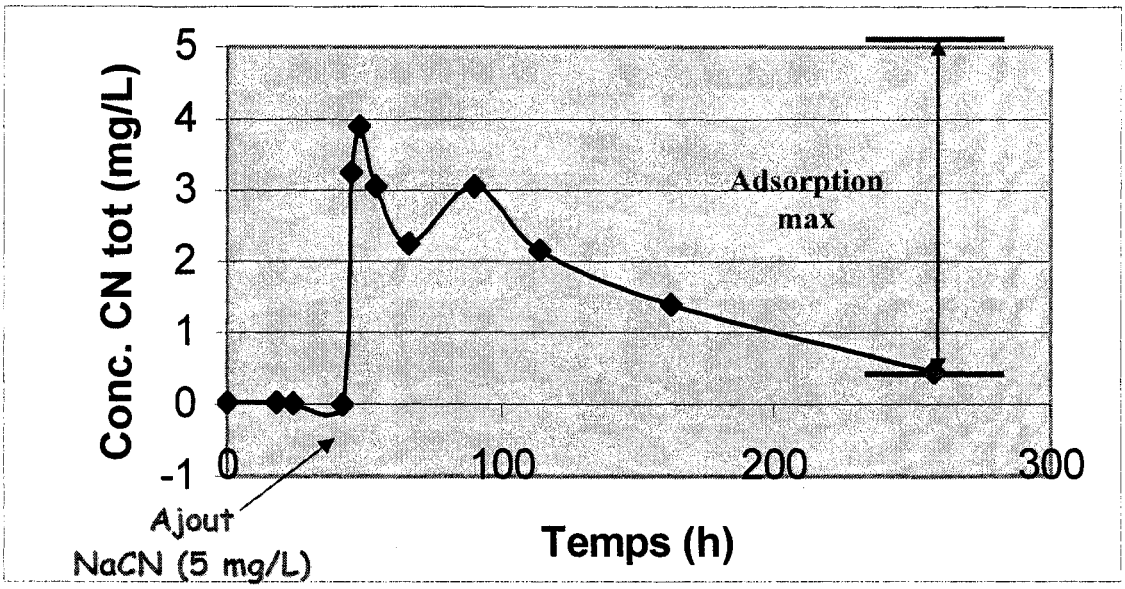


Figure 5.9 : MW12A - Concentration en cyanure total en fonction du temps (Sol non lavé/eau synthétique/NaCN ajouté)

Il est ici observé que le cyanure ajouté, sous forme de NaCN, reste initialement dans la phase aqueuse. Avant cet ajout, l'eau synthétique ne contenait pas de CN. Par contre, il y a suite à l'ajout une adsorption constante qui entraîne la concentration en CN sous les 1 mg/L. L'écart-type entre les duplicatas pour la figure 5.9 varie de 0 à 0,35 mg/L, ce qui est faible. L'équilibre ne semble pas encore atteint après 220 heures.

La figure 5.10 présente l'évolution de la concentration en CN total dans le temps pour le puits MW12A sous les conditions suivantes : matériel géologique non lavé, eau synthétique et cyanure ajouté sous forme de $K_4Fe(CN)_6$ (5 mg CN^-/L).

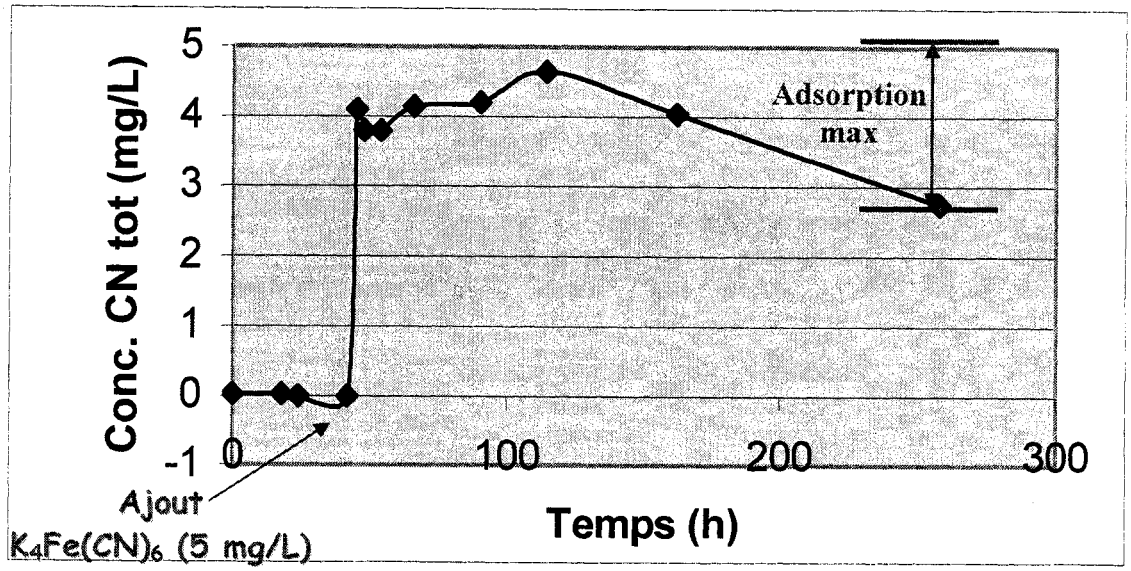


Figure 5.10 : MW12A - Concentration en cyanure total en fonction du temps (Sol non lavé/eau synthétique/$K_4Fe(CN)_6$ ajouté)

Le $K_4Fe(CN)_6$ 5 mg CN/L qui a ici été ajouté à de l'eau synthétique en présence de matériel géologique du puits MW12A (vers 48h) semble ne pas s'adsorber pour environ les 150 premières heures. Un dernier point, passé 200 heures, semble toutefois indiquer que l'équilibre n'est pas atteint et qu'il est possible que le ferrocyanure de potassium s'adsorbe davantage. L'écart-type entre les duplicatas pour la figure 5.10 varie de 0 à 0,4 mg/L, ce qui est faible.

La figure 5.11 présente l'évolution de la concentration en CN total dans le temps pour le puits MW12A sous les conditions suivantes : matériel géologique non lavé et eau du site.

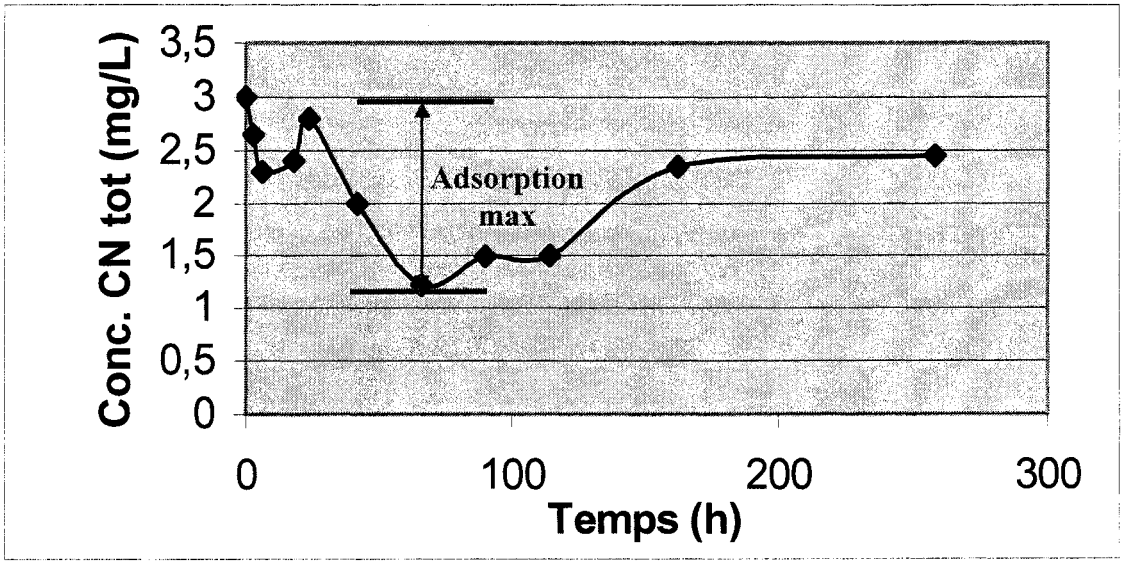


Figure 5.11 : MW12A - Concentration en cyanure total en fonction du temps (Sol non lavé/eau du site)

Bien que l'eau souterraine du puits MW12A a une moins grande concentration de CN (2,6 mg/L) que ce qui est ajouté aux eaux synthétiques (5 mg/L), peu d'adsorption y est observé. Cependant, une période d'adsorption moyenne, entre 50 et 120 heures est observée, suivi d'une période de relargage faisant augmenter les concentrations en CN à près de 2,5 mg/L. L'écart-type entre les duplicatas pour la figure 5.11 varie de 0 à 1,1 mg/L, ce qui indique qu'il peut parfois exister un cetain écart entre les deux séries échantilons. . La concentration en CN dans la phase aqueuse semble être en équilibre après 200h.

La figure 5.12 présente l'évolution de la concentration en CN total dans le temps pour le puits MW12A sous les conditions suivantes : matériel géologique lavé et eau du site.

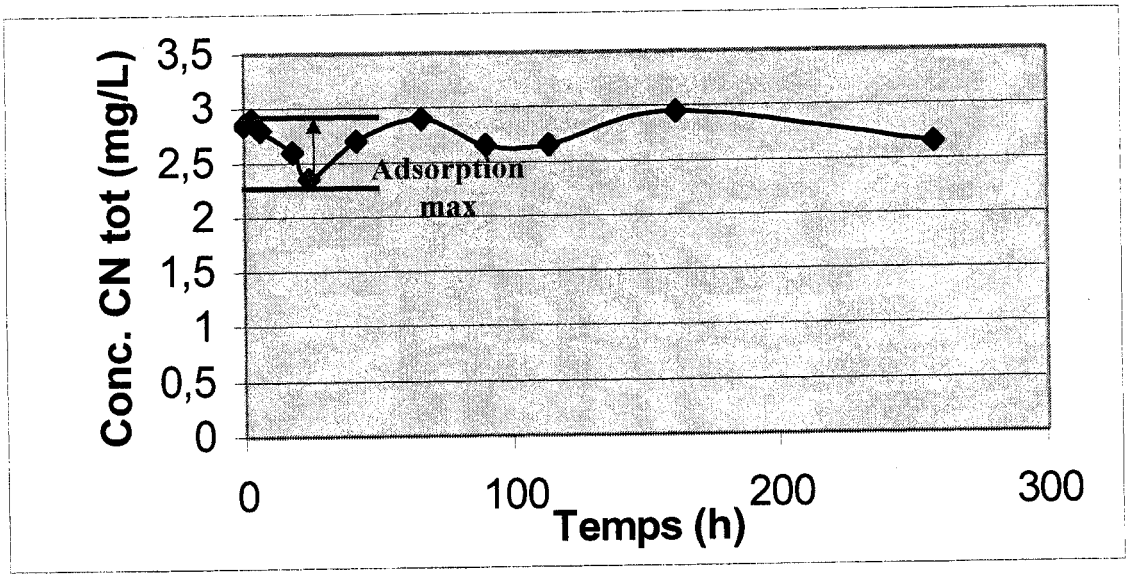


Figure 5.12 : MW12A - Concentration en cyanure total en fonction du temps (Sol lavé/eau du site)

L'emploi de sol lavé, avec l'eau souterraine du site, semble ici diminuer l'adsorption. La concentration de départ dans l'eau souterraine du site est de 2,6 mg/L. Ici, la période d'adsorption n'entraîne pas une grande diminution de la concentration en CN total car l'adsorption maximale est très faible et suivi d'un relargage. Les concentrations finales en CN s'apparentent à celle de départ indiquant une adsorption nulle dans ces conditions. L'écart-type entre les duplicatas pour la figure 5.12 varie de 0 à 0,35 mg/L, ce qui est faible. L'équilibre est atteint après environ 200 heures.

La figure 5.13 présente l'évolution de la concentration en CN total dans le temps pour le puits PZ3 sous les conditions suivantes : matériel géologique non lavé, eau synthétique et cyanure ajouté sous forme de NaCN (5 mg CN^-/L).

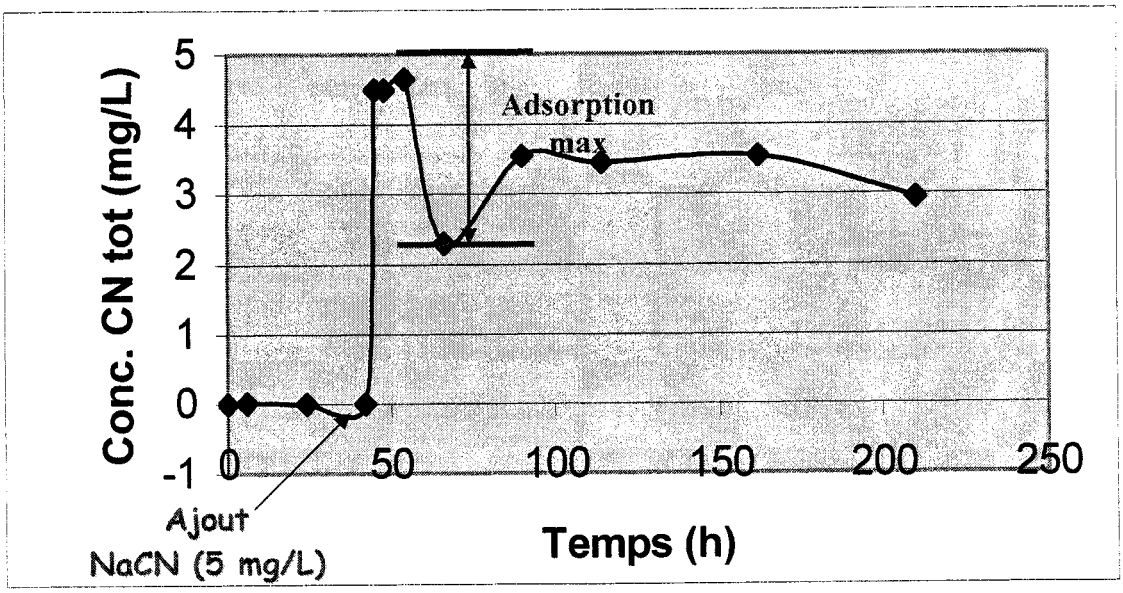


Figure 5.13 : PZ3 - Concentration en cyanure total en fonction du temps (Sol non lavé/eau synthétique/NaCN ajouté)

L'eau synthétique utilisée ne contenait aucun CN avant l'ajout effectué vers 48h de 5 mg CN/L de NaCN. Le cyanure ajouté ici se retrouve au début presque entièrement dans la phase aqueuse. Bien qu'une adsorption entraînant la concentration jusqu'à moins de 2,5 mg CN/L, elle est suivi d'un relargage. Finalement, la concentration finale en CN se stabilise à l'équilibre autour de 3 mg/L ce qui montre une certaine adsorption. L'écart-type entre les duplicatas pour la figure 5.13 varie de 0 à 0,6 mg/L, ce qui est faible.

La figure 5.14 présente l'évolution de la concentration en CN total dans le temps pour le puits PZ3 sous les conditions suivantes : matériel géologique non lavé, eau synthétique et cyanure ajouté sous forme de $K_4Fe(CN)_6$ (5 mg CN^-/L).

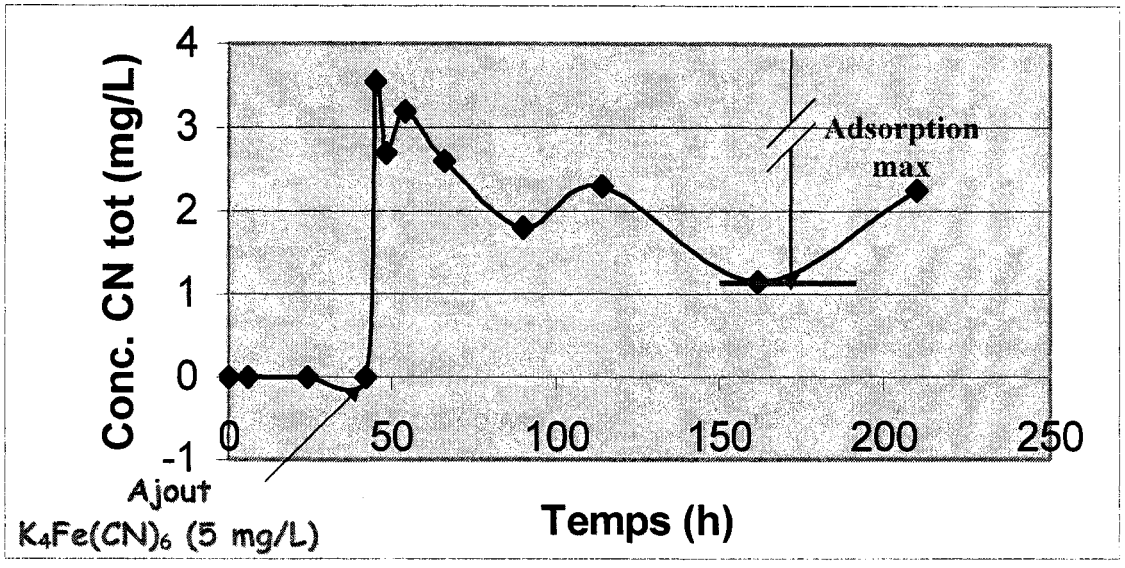


Figure 5.14 : PZ3 - Concentration en cyanure total en fonction du temps (Sol non lavé/eau synthétique/$K_4Fe(CN)_6$ ajouté)

Le comportement dans ce cas-ci ressemble beaucoup au précédent (voir fig. 5.13) avec des épisodes successifs d'adsorption et de relargage suite à l'ajout à l'eau synthétique de 5 mg CN/L de $K_4Fe(CN)_6$. L'écart-type entre les duplicatas pour la figure 5.14 varie de 0 à 0,5 mg/L, ce qui est faible. La concentration semble varier énormément ce qui rend impossible la déclaration de l'équilibre. Néanmoins, les concentrations finales sont autour de 2 mg CN/L, ce qui indique une bonne capacité d'adsorption.

La figure 5.15 présente l'évolution de la concentration en CN total dans le temps pour le puits PZ3 sous les conditions suivantes : matériel géologique non lavé, eau du site et ajout de NaCN (5 mg CN^-/L).

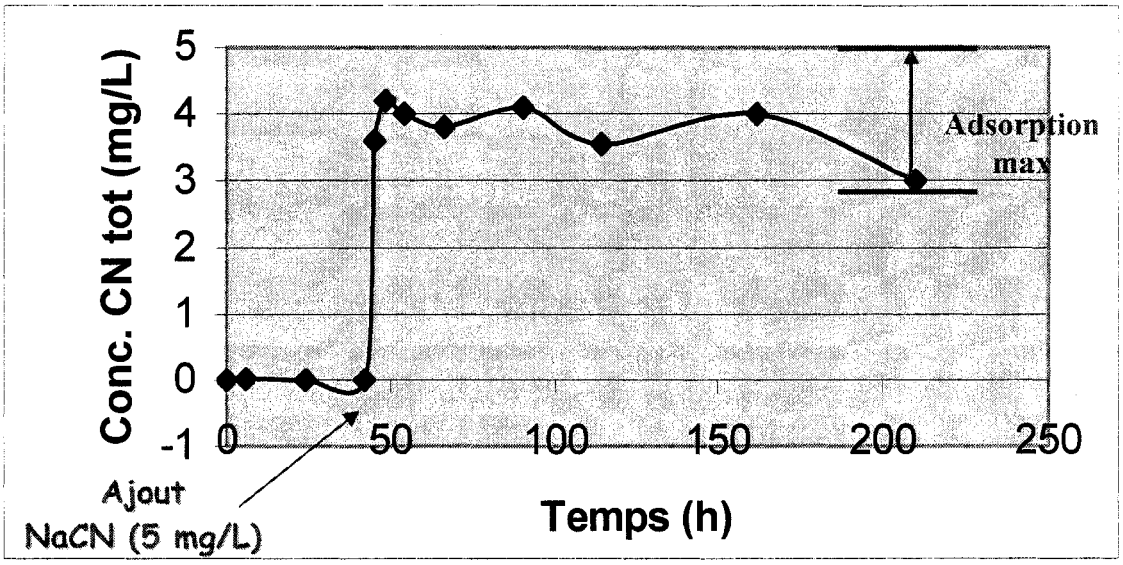


Figure 5.15 : PZ3 - Concentration en cyanure total en fonction du temps (Sol non lavé/eau du site/NaCN ajouté)

L'emploi de l'eau souterraine du site semble diminuer la capacité d'adsorption du puits PZ3. L'eau souterraine du site ne contient que 0,032 mg CN/L alors 5 mg CN/L de NaCN y est ajouté vers 48h. Bien que la concentration en cyanure diminue jusqu'à atteindre environ 3 mg/L, ceci ne représente qu'une faible adsorption. L'écart-type entre les duplicatas pour la figure 5.15 varie de 0 à 0,5 mg/L, ce qui est faible. L'équilibre semble s'installer très tôt dans l'expérience.

La figure 5.16 présente l'évolution de la concentration en CN total dans le temps pour le puits PZ3 sous les conditions suivantes : matériel géologique lavé, eau du site et ajout de NaCN (5 mg CN^-/L).

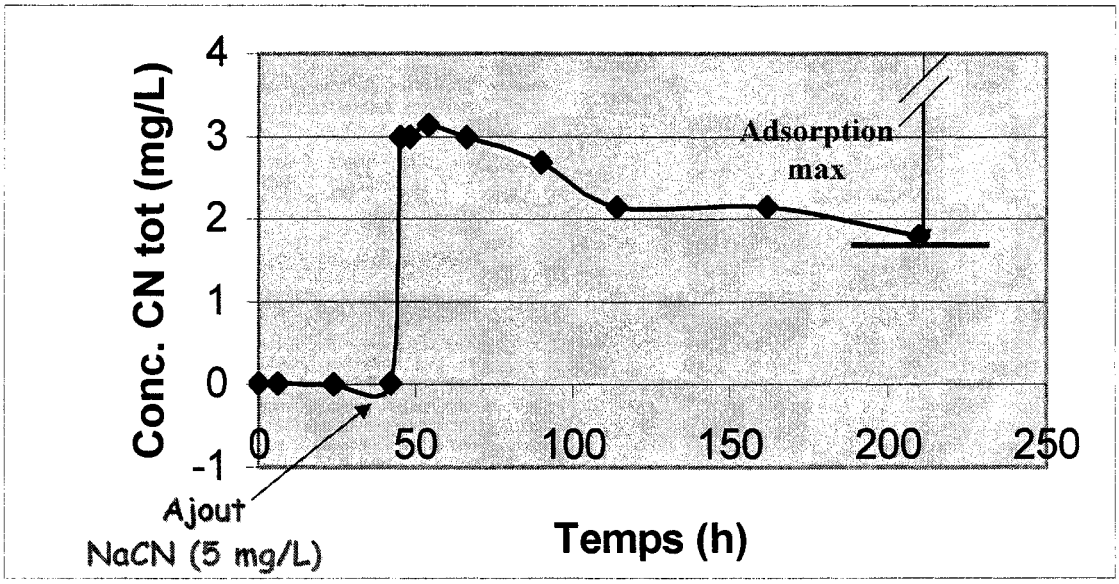


Figure 5.16 : PZ3 - Concentration en cyanure total en fonction du temps (Sol lavé/eau du site/NaCN ajouté)

La différence entre cet essai et les autres avec le matériel géologique PZ3, c'est une adsorption instantané plus importante, de 5 mg/L à 3 mg/L après l'ajout de NaCN. L'eau souterraine utilisé ne contenait au départ que 0,032 mg CN/L. L'adsorption y est présente par la suite pour obtenir une concentration finale en CN inférieure à 2 mg/L. L'écart-type entre les duplicatas pour la figure 5.16 varie de 0 à 0,4 mg/L, ce qui est faible. L'équilibre semble avoir été atteint après environ 150 heures.

Le tableau suivant donne les valeurs numériques pour les principaux points des graphiques montrés ci-haut.

Tableau 5.2 : Concentrations maximales et minimales observées selon l'essai

Puits	Eau	Sol lavé	Ajout	[CN⁻] Max	[CN⁻] Min	[CN⁻] Fin
PN2A	Synth.	Non	NaCN	3,8	1,95	2,2
PN2A	Synth.	Non	$K_4Fe(CN)_6$	4,25	2,75	3,45
PN2A	Site	Non	-	6,2	3,6	4,55
PN2A	Site	Oui	-	10,2	2,75	10
PN3B	Synth.	Non	NaCN	2,25	0,114	0,114
PN3B	Synth.	Non	$K_4Fe(CN)_6$	0,645	0	0
PN3B	Site	Non	NaCN	1,55	0,485	0,53
PN3B	Site	Oui	NaCN	2,85	0,59	0,59
MW12A	Synth.	Non	NaCN	3,9	0,45	0,45
MW12A	Synth.	Non	$K_4Fe(CN)_6$	4,65	2,75	2,75
MW12A	Site	Non	-	3	1,225	2,45
MW12A	Site	Oui	-	2,95	2,35	2,65
PZ3	Synth.	Non	NaCN	4,65	2,3	2,95
PZ3	Synth.	Non	$K_4Fe(CN)_6$	3,55	1,15	2,25
PZ3	Site	Non	NaCN	4,2	3	3
PZ3	Site	Oui	NaCN	3,15	1,8	1,8

* [CN⁻] = Concentration en cyanure total, mg/L

5.2.1 Adsorption en fonction de la masse sèche de matériel géologique

Les tableaux 5.3 à 5.6 qui suivent donne les résultats des essais d'adsorption en fonction de la masse sèche de matériel géologique employée dans chacun des tubes. L'adsorption totale en cyanure est exprimée en milligramme de CN par gramme de sol sec. Seuls les essais avec l'emploi d'eau synthétique et d'un ajout connu en CN ont pu être incorporés à ces tableaux.

Tableau 5.3 : Adsorption de cyanure par g de matériel géologique sec dans le temps (PN2A)

Eau synthétique, sol non lavé, ajout NaCN (5 mg/L)		Eau synthétique, sol non lavé, ajout $K_4Fe(CN)_6$ (5 mg/L)	
Temps	CN tot/ Poids	Temps	CN tot/ Poids
heures	mg CN/g	heures	mg CN/g
0	0,000	0	0,000
12	0,000	12	0,000
20	0,000	20	0,000
36	0,000	36	0,000
39	0,024	39	0,054
42	0,023	42	0,054
48	0,017	48	0,037
60	0,026	60	0,039
84	0,029	84	0,026
108	0,035	108	0,046
156	0,042	156	0,079
204	0,039	204	0,054

Dans le cas du puits PN2A, les résultats indiquent une meilleure adsorption finale lorsque l'ajout est effectué sous forme de ferrocyanure de potassium (0,054 mg CN/g sol sec) comparativement à l'ajout sous forme de cyanure de sodium (0,039 mg CN/g sol sec). Les maxima atteints sont de 0,079 mg CN/g sol sec avec le $K_4Fe(CN)_6$ et de 0,042 g CN/g sol sec avec le NaCN.

Tableau 5.4 : Adsorption de cyanure par g de matériel géologique sec dans le temps (PN3B)

Eau synthétique, sol non lavé, ajout NaCN (5 mg/L)		Eau synthétique, sol non lavé, ajout $K_4Fe(CN)_6$ (5 mg/L)	
Temps	CN tot/ Poids	Temps	CN tot/ Poids
heures	mg CN/g	heures	mg CN/L*g
0	0,000	0	0,000
6	0,000	6	0,000
18	0,000	18	0,000
42	0,000	42	0,000
45	0,052	45	0,091
48	0,052	48	0,092
54	0,054	54	0,092
66	0,077	66	0,092
90	0,076	90	0,093
114	0,081	114	0,093
162	0,090	162	0,093
210	0,092	210	0,093

Dans le cas du puits PN3B, les résultats indiquent une adsorption finale équivalente peu importe avec quel espèce l'ajout est effectué : avec le ferrocyanure de potassium (0,093 mg CN/g sol sec), avec le cyanure de sodium (0,092 mg CN/g sol sec). Les maxima atteints sont de 0,093 mg CN/g sol sec avec le $K_4Fe(CN)_6$ et de 0,092 g CN/g sol sec avec le NaCN.

Tableau 5.5 : Adsorption de cyanure par g de matériel géologique sec dans le temps (MW12A)

Eau synthétique, sol non lavé, ajout NaCN (5 mg/L)		Eau synthétique, sol non lavé, ajout $K_4Fe(CN)_6$ (5 mg/L)	
Temps	CN tot/ Poids	Temps	CN tot/ Poids
heures	mg CN/g	heures	mg CN/g
0	0,000	0	0,000
18	0,000	18	0,000
24	0,000	24	0,000
42	0,000	42	0,000
45	0,026	45	0,013
48	0,016	48	0,018
54	0,028	54	0,017
66	0,040	66	0,012
90	0,027	90	0,011
114	0,041	114	0,005
162	0,051	162	0,014
258	0,066	258	0,032

Dans le cas du puits MW12A, les résultats indiquent une meilleure adsorption finale lorsque l'ajout est effectué sous forme de cyanure de sodium (0,066 mg CN/g sol sec) comparativement à l'ajout sous forme de ferrocyanure de potassium (0,032 mg CN/g sol sec). Les maxima atteints sont de 0,032 mg CN/g sol sec avec le $K_4Fe(CN)_6$ et de 0,066 g CN/g sol sec avec le NaCN.

Tableau 5.6 : Adsorption de cyanure par g de matériel géologique sec dans le temps (PZ3)

Eau synthétique, sol non lavé, ajout NaCN (5 mg/L)		Eau synthétique, sol non lavé, ajout $K_4Fe(CN)_6$ (5 mg/L)	
Temps	CN tot/ Poids	Temps	CN tot/ Poids
heures	mg CN/g	heures	mg CN/g
0	0,000	0	0,000
6	0,000	6	0,000
24	0,000	24	0,000
42	0,000	42	0,000
45	0,006	45	0,016
48	0,006	48	0,026
54	0,004	54	0,020
66	0,030	66	0,027
90	0,016	90	0,037
114	0,017	114	0,030
162	0,016	162	0,042
210	0,023	210	0,030

Dans le cas du puits PZ3, les résultats indiquent une meilleure adsorption finale lorsque l'ajout est effectué sous forme de ferrocyanure de potassium (0,030 mg CN/g sol sec) comparativement à l'ajout sous forme de cyanure de sodium (0,023 mg CN/g sol sec). Les maxima atteints sont de 0,042 mg CN/g sol sec avec le $K_4Fe(CN)_6$ et de 0,030 g CN/g sol sec avec le NaCN.

De ces tableaux il est possible d'obtenir des valeurs absolues sur le potentiel d'adsorption à chacun des puits. Il faut noter cependant que le type d'eau utilisée (ici l'eau synthétique) peut avoir une incidence importante sur les résultats. Cette influence est traitée à la section 5.2.4.

Ainsi, lors de l'utilisation d'eau synthétique avec du sol non lavé et un ajout de cyanure, le puits PN3B est celui qui obtient la plus grande valeur d'adsorption maximale en mg CN par gramme de sol sec avec 0,092 mg CN/g lorsque l'ajout est sous forme de NaCN et 0,093 mg CN/g lorsque l'ajout est sous forme de $K_4Fe(CN)_6$.

5.2.2 Effets de la spéciation du cyanure ajouté – NaCN ou $K_4Fe(CN)_6$

Généralement, plus une molécule possède une masse molaire élevée, plus sa mobilité sera réduite puisqu'elle sera plus facilement adsorbée par les sols. Or ici, bien que la masse molaire du ferrocyanure de potassium est bien plus élevée que celle du cyanure de sodium, il est impossible, à partir des résultats obtenus, de conclure qu'il sera plus adsorbé car certains puits semblent avoir une meilleur capacité d'adsorption dans le cas des cyanures libres.

Ce que les résultats montrent, c'est que les puits PN2A et MW12A adsorbent peu les ferrocyanures avec des concentrations finales respectivement de 4,55 mg/L et de 2,45 mg/L alors que les concentrations mesurées dans l'eau souterraine utilisée sont de 4,8 mg/L et de 2,6 mg/L. Ceci pourrait être dû au fait que le matériel géologique recueilli à ces deux puits est déjà passablement chargé. Par contre, dans le cas où de l'eau synthétique a été employée avec du sol provenant du puits MW12A, l'adsorption maximale du cyanure libre semble plus importante que celle des ferrocyanures (0,066 mg CN/g contre 0,032 mg CN/g) alors que le phénomène contraire se produit au puis PN2A (0,042 mg CN/g contre 0,079 mg CN/g).

Dans le cas du puits PN3B, situé au milieu du panache, les résultats sont similaires peu importe la spéciation de l'ajout alors qu'au puits PZ3, les ferrocyanures semblent légèrement plus adsorbés que les cyanures libres (0,042 mg CN/g contre 0,030 mg CN/g).

5.2.3 Effets du lavage du sol

Il est suggéré dans les travaux de Meehan (2002) que les sols lavés adsorbent moins de cyanures que les non lavés car les sites potentiels d'adsorption ont ainsi été éliminés. Les résultats susmentionnés indiquent effectivement que, dans trois puits sur quatre, le sol non-lavé adsorbe mieux les cyanures que les sols lavés. Au puits PN2A, la concentration finale avec le sol lavé atteint 10 mg/L alors que, dans les mêmes conditions mais avec un sol non-lavé, la concentration finale en cyanure n'est que de 4,55 mg/L. De façon similaire, au puits MW12A, les concentrations finales sont respectivement de 2,65 mg/L et 2,45 mg/L.

5.2.4 Effets de l'eau utilisée (du site ou synthétique)

La différence principale entre l'eau du site et l'eau synthétique se situe au niveau de la charge. Alors que l'eau du site contient de multiples espèces chimiques (voir les tableaux 3.2 et 3.3) qui peuvent entrer en compétition pour des sites d'adsorption avec les espèces de cyanure présentent, l'eau synthétique est peu chargée puisqu'elle est constituée d'eau déionisée à laquelle a été ajoutée une certaine quantité de NaCl pour obtenir une force ionique de 0,01 M. Par exemple, les concentrations en sodium dans l'eau échantillonnée au puits PN2A atteignent 2890 mg/L et l'alcalinité y est de 4980 mg/L.

Il est donc normal que l'adsorption ait été plus faible dans les essais utilisant l'eau du site comparativement aux essais utilisant l'eau synthétique puisque les ions sont en compétition pour les sites d'adsorption. La différence est particulièrement frappante dans les cas des puits PN2A et MW12A car ces derniers ont une eau qui contient beaucoup plus d'ions déjà en solution que les autres. Pour ces deux puits, les concentrations finales des essais avec de l'eau du site sont de 4,55mg/L, 10mg/L, 2,45mg/L et 2,65mg/L alors qu'elles sont respectivement de 2,2mg/L, 3,45mg/L, 0,45mg/L et 2,75mg/L avec l'eau synthétique.

De façon générale, il est possible de conclure que plus l'eau est chargée, moins les espèces de cyanures pourront s'adsorber.

5.2.5 Effets du matériel géologique

Selon le puits étudié, et donc selon le matériel géologique employé pour les essais, il y a des différences observées dans le degré d'adsorption des cyanures.

Ainsi, puisque les espèces ioniques de cyanure sont toutes anioniques, un sol présentant des sites d'échange anioniques est beaucoup plus susceptible qu'un autre de retenir ces ions. Ainsi, plus le milieu sera acide, plus les cyanures auront tendance à s'adsorber. La matière organique étant principalement chargée négativement, une forte concentration en carbone organique dissout n'est pas garante d'une bonne adsorption (Stevenson 1994; Cheshire et al 2000).

Également, la matière déjà fortement chargée offrira moins de sites pour les nouveaux ions et cela diminuera encore son potentiel d'adsorption. En plus, si elle est fortement chargée en cyanures, il pourrait s'y produire le phénomène de désorption, c'est-à-dire que les ions de cyanures sont alors susceptibles de se détacher et de se solubiliser faisant

ainsi augmenter la concentration en CN_{Total} dans l'eau souterraine. C'est clairement ce qui s'est passé dans le cas du puits PN2A alors que la concentration maximale en cyanure atteint parfois des valeurs au-dessus de la valeur initiale (jusqu'à 10,2 mg/L) contenue dans l'eau introduite dans les tubes. Le potentiel d'adsorption du matériel géologique du puits PN2A est considéré comme très faible. Le même phénomène de désorption est observé au puits MW12A, mais dans une moins grande mesure. Le potentiel d'adsorption de son matériel géologique est tout de même considéré comme faible.

Finalement, la nature du matériel géologique joue également sur la capacité d'adsorption. Ainsi, un sol sableux, tel le sol PZ3, aura une bien moins grande habileté à adsorber les cyanures qu'un sol plus organique comme le PN3B (observations visuelles). En regardant les résultats de la section précédente, il est évident que le puits PN3B (concentrations finales (mg/L) : 0,114; 0; 0,53; 0,59) possède un potentiel d'adsorption bien supérieur à celui de PZ3 (concentrations finales (mg/L) : 2,95; 2,25; 3; 1,8).

5.3 CONCLUSION

L'adsorption peut dans certaines conditions se révéler un mécanisme d'atténuation naturelle efficace pour faire diminuer les concentrations d'un contaminant dans l'eau souterraine. Par contre, contrairement à la biodégradation ou encore aux techniques de destruction telle que l'oxydation, l'adsorption n'entraîne pas la destruction des cyanures. Il a été montré que des sols qui ont longtemps été en contact avec de fortes concentrations de cyanure peuvent relâcher ces derniers dans l'environnement lorsque les conditions environnantes se modifient (Samson et al. 2002).

Plusieurs facteurs ont été identifiés comme influençant le potentiel d'adsorption d'un sol : sa charge (positive ou négative), la disponibilité de ses sites d'échanges (dans ce cas-ci anioniques) et son type. Les résultats exposés ont également montré l'influence du type d'eau utilisée, synthétique ou du site, du lavage du sol ainsi que de la spéciation du cyanure.

De façon générale, il a été observé que :

- le puits PN2A offre un faible potentiel d'adsorption présentant même un risque de relargage de contaminants déjà contenus dans le matériel géologique lorsque de l'eau du site est utilisée. Ce puits, situé au début du panache de contamination et contaminé principalement avec des complexes fer-cyanure, n'a pas démontré une capacité à adsorber les cyanures lorsque l'eau du site a été utilisée, comme le montre ses concentrations finales en CN de 4,55 mg/L et de 10,2 mg/L.;

- le puits PN3B montre un bon potentiel d'adsorption réussissant par exemple à faire diminuer la concentration maximale observée dans l'essai avec du sol non-lavé, de l'eau du site et un ajout de cyanure de sodium de 5 mg/L à 0,53 mg/L (89%). De plus, lors de l'ajout de $K_4Fe(CN)_6$ à de l'eau synthétique, la concentration est passée de 5 mg/L à 0,03 mg/L (99% d'enlèvement). Ceci est possible principalement grâce à la faible charge d'ions déjà présente dans l'eau et les caractéristiques physico-chimiques du matériel géologique de ce puits. Il est donc possible que le sol situé au milieu du panache de contamination joue un rôle important dans l'atténuation naturelle des cyanures en adsorbant ceux-ci;

- le puits MW12A a montré au cours des essais une faible adsorption des CN (de 3 mg/L à 2,45 mg/L) lorsque les conditions du site sont reproduites : eau

du site, sol non lavé. Cette faible adsorption peut s'expliquer par une eau du site et un matériel géologique déjà fortement chargés. Ce puits, situé près du bras de mer, n'offre donc pas un bon potentiel d'atténuation naturelle par adsorption;

- la concentration en cyanure dans le puits PZ3 est passée de 5 mg/L (sous forme d'ajout de NaCN dans l'eau du site) à 3 mg/L et 1,8 mg/L. Il semble donc montrer un potentiel d'adsorption moyen. La relative acidité de cet endroit, un peu hors du panache, peut avoir aidé la formation de site d'adsorption d'anions et la faible charge en ions a réduit la compétition pour ces mêmes sites. Par contre, la caractéristique sablonneuse de son matériel géologique et la spéciation des cyanures présents (seulement des cyanures libres) expliquent en grande partie l'incapacité de celui-ci à adsorber davantage de cyanure.

CHAPITRE 6 - ÉTUDE DE LA BIODÉGRADATION DES CYANURES

La biodégradation est le dernier mécanisme d'atténuation naturelle étudié dans le cadre de cette recherche. Ce phénomène est important dans la diminution de la concentration de contaminants dans l'environnement alors qu'il existe souvent des microorganismes indigènes capables de dégrader ledit contaminant issu des divers procédés. Dans le cas spécifique des cyanures, il a été montré lors de la revue de la littérature que plusieurs bactéries et champignons sont capables de dégrader les cyanures empruntant différentes voies métaboliques et utilisant différents enzymes. Les produits de cette dégradation, dépendamment du chemin parcouru, sera le formate, le formamide, le méthane, le dioxyde de carbone et l'ammoniac.

Des essais en macrocosmes ont donc été effectués dans le but d'évaluer le potentiel de biodégradation dans les conditions de terrain, notamment sans apport d'oxygène. Préalablement à ces essais de biodégradation en macrocosmes, des dénombrements bactériens ont cependant été menés dans le but de confirmer la présence dans l'eau souterraine et dans le matériel géologique provenant du site de microorganismes indigènes capables de croître dans un milieu contaminé au cyanure.

Puisque les essais en macrocosmes avaient pour but de démontrer le potentiel de biodégradation par atténuation naturelle, les réacteurs n'ont subi aucune biostimulation, bioaugmentation ou isolement de microorganismes. Ils ont été réalisés avec de l'eau souterraine et du matériel géologique provenant du site. Seule une certaine quantité de contaminant a été ajoutée à certains puits pour leur permettre d'avoir une concentration significative de cyanure.

Suivant les résultats obtenus de la modélisation avec VMINTEQ, l'ajout de cyanure a été effectué sous la forme d'un complexe fer-cyanure (ferrocyanure de potassium) pour représenter le plus fidèlement possible les conditions de terrain.

Ce chapitre est divisé en deux sections : dans un premier temps il est question des essais de dénombrement bactérien (section 6.1) tandis que dans un deuxième temps, il est traité des essais en macrocosmes (section 6.2).

6.1 DÉNOMBREMENT BACTÉRIEN

Cette section décrit les principales méthodes utilisées de plus que les principaux résultats obtenus lors des dénombrements bactériens.

6.1.1 Méthodologie

Le protocole P61-E (voir Annexe VIII), *Dénombrement total de colonies bactériennes hétérotrophes et hétérotrophes résistantes au cyanure sous atmosphère d'azote en provenance d'échantillons d'eau et de sol provenant d'un site contaminé par la méthode du comptage sur pétris*, donne la marche à suivre pour réaliser le dénombrement bactérien.

Objectif

L'objectif de cette expérience consiste à déterminer s'il existe dans les échantillons d'eau souterraine et les échantillons de sol provenant du site contaminé aux cyanures des microorganismes hétérotrophes totaux se développant en conditions anaérobies et si, parmi ces micro-organismes, il y en a qui sont en mesure de croître en présence de cyanure ajouté au milieu nutritif.

Principe de la méthode

Cette méthode se résume à déposer des aliquots de sol ou d'eau souterraine (de dilutions variées) sur des pétris contenant un milieu complet, constitué de nutriments et d'une source de carbone. Ces pétris sont conservés dans des conditions se rapprochant le plus possible des conditions réelles sur le terrain (température, pH, etc). Certains pétris contiennent en plus du milieu une certaine quantité de cyanure ajouté afin d'être en mesure de prouver que les micro-organismes indigènes ont la capacité de croître même en présence de cyanures.

Chaque colonie qui se développe est présumée être issue d'une seule unité viable, soit un seul organisme ou bien un groupe d'organisme. Les résultats sont exprimés en UFC/g de résidu sec ou UFC/mL d'eau souterraine (UFC : unités formant des colonies).

Manipulations

Toutes les manipulations ont été faites en s'assurant de ne pas contaminer les pétris. Des contrôles ont été effectués de la même façon que les autres pétris à la seule différence que les différents tubes de dilution préparés ne contenaient pas d'eau souterraine ou de matériel géologique.

La première étape était de constituer le milieu : dans un erlenmeyer de 2 litres, peser 4.5g de «tryptic soy broth» sans dextrose et 22.5g d'agar purifié, puis compléter avec 1450 mL d'eau purifiée (en tout, préparer 6 erlenmeyers contenant chacun 1,5 L). Ce milieu a ensuite été autoclavé. Une fois refroidi à 60°C, son pH a été ajusté à 9 et, s'il y a lieu, le cyanure y a été ajouté. Ensuite, environ 20 mL du milieu a été distribué dans chaque boîte de pétri en essayant de ne pas les ouvrir au complet. Finalement, les pétris ont été remis dans leurs sacs originaux et gardés au réfrigérateur à 4°C pendant au moins 24h jusqu'à leur utilisation.

Pendant ce temps, une solution saline (0,85%p/v NaCl) a été préparée. Elle a servi à faire les dilutions et elle a été distribuée dans les tubes à dilution. Les dilutions ont été réalisées jusqu'à 10^{-7} en transférant 1 mL à chaque fois de la solution concentrée dans un tube contenant 9 mL de solution saline.

Sous la hotte biologique et près de la flamme, les différentes dilutions contenant de l'eau souterraine ou du matériel géologique ont ensuite été étalées sur le pétri à raison de 100 µL par pétri. Les pétris ont ensuite été incubés dans des sacs, sous atmosphère d'azote, à une température de 15°C, dans le noir.

Pour effectuer le dénombrement, les pétris ont été retirés après 14 jours d'incubation. Seulement ceux contenant 30 à 300 colonies ont été considérés. Le comptage s'est fait manuellement à l'aide du compteur Québec. Les pétris contenant de la contamination (ex. moisissure) ont été exclus du compte final, les colonies étendues aussi. Les contrôles ont également été retirés pour être dénombrés. Ces résultats ont servi à calculer le nombre d'unités formatrices de colonies par gramme de sol (ou millilitre d'eau).

La méthode pour calculer le nombre d'unités formatrices de colonies (UFC) est simple. Il s'agit d'effectuer une moyenne du nombre de colonies par pétri pour une dilution donnant entre 30 et 300 colonies. La détermination du nombre de UFC par gramme (unités formatrices de colonies par gramme, UFC/g) se fait ainsi pour un échantillon de sol :

$$\text{UFC/g} = \frac{(\text{compte moyen de la dilution})(\text{facteur de dilution})(\text{FC})}{\text{Poids sec du sol}} \qquad (6.1)$$

où poids sec = (poids sol humide*(1 - % humidité)) / 100

FC = Facteur de correction pour l'étalement. Ce facteur est égal à 10 car lors de l'étalement, seulement 0,1 mL est utilisé.

Il est à noter que pour un échantillon d'eau, le UFC est calculé de la même façon sauf qu'il n'est pas divisé par un poids sec mais plutôt par 1 mL.

$$\text{UFC/mL} = \frac{(\text{compte moyen de la dilution})(\text{facteur de dilution})(\text{FC})}{1\ \text{mL}} \qquad (6.2)$$

6.1.2 Résultats et discussion

Les résultats des calculs de UFC sont présentés dans les tableaux 6.1 et 6.2 :

Tableau 6.1 : Nombre de UFC dans les pétris sans cyanure ajouté

Eau	UFC/mL	Sol	UFC/g
PN2A	10^3	PN2A	10^5
PN3B	10^4	PN3B	10^5
MW12A	10^5	MW12A	10^6
PZ3	10^4	PZ3	10^4
Contrôle	< 30 colonies/pétri	Contrôle	< 30 colonies/pétri

Tableau 6.2 : Nombre de UFC dans les pétris avec $K_4Fe(CN)_6$ ajouté

Eau	UFC/mL	Sol	UFC/g
PN2A	10^3	PN2A	10^5
PN3B	10^4	PN3B	10^5
MW12A	10^5	MW12A	10^6
PZ3	10^4	PZ3	10^4
Contrôle	< 30 colonies/pétri	Contrôle	< 30 colonies/pétri

Aucun contrôle ne montrait une quantité suffisante de colonies pour permettre le comptage.

Les résultats ci-dessus montrent la présence de bactéries indigènes dans l'eau souterraine et dans le matériel géologique prélevés sur le site. En effet, dans l'eau souterraine, de 10^3 à 10^5 UFC/mL sont présentes dépendamment du puits alors que dans le sol, il y en a de 10^4 à 10^6 UFC/g. Ces bactéries proviennent du site puisque les contrôles n'ont pas développé de colonies. Il existe donc des bactéries hétérotrophes totaux capables de se développer en conditions anaérobies.

Lorsque ces bactéries sont appelées à croître dans un milieu contenant du cyanure, des résultats semblables sont obtenus. Ainsi, pour l'eau souterraine, de 10^3 à 10^5 UFC/mL et pour le sol, de 10^4 à 10^6 UFC/g, les quantités d'unités formatrices de colonies sont du même ordre de grandeur que lors des essais sans cyanure ajouté. Cette particularité permet d'affirmer que les bactéries présentes sur le site sont acclimatées aux cyanures et peuvent croître en leur présence, même en conditions anaérobies.

Ces résultats permettent de pousser plus loin l'analyse de la biodégradation des cyanures.

6.2 ESSAIS DE BIODÉGRADATION EN MACROCOSMES

Cette section décrit les principales méthodes utilisées de plus que les principaux résultats obtenus lors des essais de biodégradation en macrocosmes.

6.2.1 Méthodologie

Le protocole P61-D (voir Annexe IX), *Essais de biodégradation en macrocosme du cyanure contenu dans l'eau souterraine d'un site contaminé*, explique comment préparer et échantillonner des réacteurs agissant comme macrocosmes.

Objectif

L'objectif des essais de biodégradation en macrocosmes est de, après avoir prouvé la présence d'une microflore indigène tolérante aux cyanures dans l'eau souterraine et dans le sol, déterminer si cette microflore possède la capacité de dégrader les cyanures. Par la suite, il faut déterminer si le site possède un potentiel d'atténuation naturelle par voie de biodégradation.

Principe de la méthode

La biodégradation des complexes fer-cyanures peut être étudiée à l'aide de macrocosmes.

Comme les conditions de terrain des échantillons correspondent à des conditions réduites, la formation de CO_2 dans ces conditions est inhibée par l'absence d'oxygène. Dans ce cas, il est suggéré (Meehan et al., 1999) de suivre la concentration des composés contenant de l'azote (NH_3, NO_3) pour permettre de conclure que la diminution en CN total provient bel et bien de la biodégradation, l'azote pouvant agir comme source d'énergie pour les microorganismes.

Les dénombrements bactériens effectués au préalable font état de la présence de 10^3 à 10^5 UFC/ml dans l'eau et de 10^4 à 10^6 UFC/g dans le sol, et ce, en présence et en absence de cyanure dans le milieu de culture.

Les essais ont été faits en phase boueuse puisqu'une structure solide est nécessaire pour aider les bactéries à se fixer et dégrader les cyanures et que cette phase est présente naturellement dans l'eau souterraine. Les macrocosmes ont été conservés dans le noir, à 10°C (température de l'eau souterraine) et légèrement agités. Les conditions d'oxydo-réduction prévalant dans les macrocosmes étaient celles de l'eau souterraine introduite. Les témoins abiotiques ont été amendés de formaldéhyde (Tuominen et al. (1994), Von Roge et al. (1998)) à une concentration de 0,11%p/p. À cette concentration, l'activité microbienne est inhibée de façon efficace et l'influence du formaldéhyde sur le pH est minimisée.

Manipulations - Réacteurs

Pour chaque puits, cinq réacteurs ont été préparés. De ces cinq réacteurs, il y en 2 qui sont des réacteurs abiotiques dans lesquels du formaldéhyde a été ajouté pour tuer les microorganismes et trois qui sont des réacteurs biotiques. En tout, c'est 20 bouteilles de 2L, autoclavées et préidentifiées qui ont été nécessaires.

Dans chaque bouteille, 180g de sol ont été introduits du puits correspondant. Ensuite, dans les réacteurs pour les puits PN2A et MW12A, 1,8 kg d'eau souterraine correspondante ont été ajoutés tandis que dans les réacteurs pour les puits PN3B et PZ3, le 1,8 kg a été ajouté comme suit : 1,76 kg d'eau souterraine correspondante et 36 mL d'une solution concentrée de $K_4Fe(CN)_6$ (250mg CN^-/L). Finalement, dans les réacteurs abiotiques, 5,5mL de formaldéhyde ont été ajoutés. Toutes ces manipulations se sont faites de façon à limiter le contact entre les réacteur et l'eau souterraine.

Les réacteurs ont ensuite été fermés hermétiquement à l'aide de bouchons munis d'un centre en caoutchouc et installés sur une plaque giratoire fonctionnant à 125 rpm, dans la chambre froide à 10°C et ont été protégés contre la lumière à l'aide d'une enveloppe de papier d'aluminium.

Manipulations - Échantillonnage

Chaque réacteur a été échantillonné 12 fois. Ces prélèvements d'eau souterraine visaient à analyser, dans le temps, les concentrations en CN, NH_3 et NO_3 dans le réacteur. Les échantillons ont été pris aux jours 1, 8, 15, 22, 29, 36, 39, 43, 46, 50, 57, 65.

Le réacteur a d'abord été retiré de l'agitateur et placé sous la hotte. L'eau souterraine a été échantillonnée en utilisant une seringue de 60 mL munie d'une aiguille de 6 pouces. Cette aiguille a été insérée dans le centre en caoutchouc des bouchons des bouteilles. Les réacteurs n'ont donc jamais été ouverts pour minimiser le contact avec l'air extérieur et conserver le plus possible les conditions du milieu. Les 60 mL prélevés avec la seringue ont ensuite été filtrés à l'aide d'une unité filtrante à 0,45µm. Le liquide a ensuite été distribué dans des tubes : 25 mL pour les analyses de CN_{Total} (tubes avec l'agent de conservation NaOH), 25 mL pour les analyses de NO_3 et 10 mL pour les analyses de NH_3. Ces échantillons ont également été testés pour le pH et le potentiel redox à l'aide d'un pHmètre. Les réacteurs ont ensuite été remis sur la plaque giratoire jusqu'au prochain échantillonnage.

Les échantillons pour les analyses de cyanure total ont été envoyés dans un laboratoire externe accrédité pour les analyses environnementales tandis que les échantillons pour les analyses de nitrate et d'ammoniac ont été gardés au laboratoire où ils ont été analysés à l'aide d'un spectrophotomètre par la méthode de réduction au cadmium et la méthode salicylate respectivement.

6.2.2 Résultats et discussion

Ces essais se sont déroulés sur une période de plus de 2 mois. Les quantités insérées dans les réacteurs au départ sont inscrites dans le tableau 2 de l'annexe IX. Du $K_4Fe(CN)_6$ a été ajouté (5 mg CN/L) aux réacteurs des puits PN3B et PZ3 pour l'obtention d'une quantité critique de CN en solution. Aucun autre ajout n'a été fait afin de respecter le plus fidèlement possible les conditions de terrain. Seuls des microorganismes indigènes peuvent donc être responsable, s'il y a lieu, de la biodégradation.

Les résultats pour chacun des 4 puits (biotiques et abiotiques) sont présentés sous forme de graphiques. Ils montrent clairement l'évolution, dans le temps, de la concentration en cyanure total de l'eau souterraine.

La figure 6.1 présente les résultats pour les macrocosmes fait avec du matériel géologique et de l'eau souterraine provenant du puits PN2A.

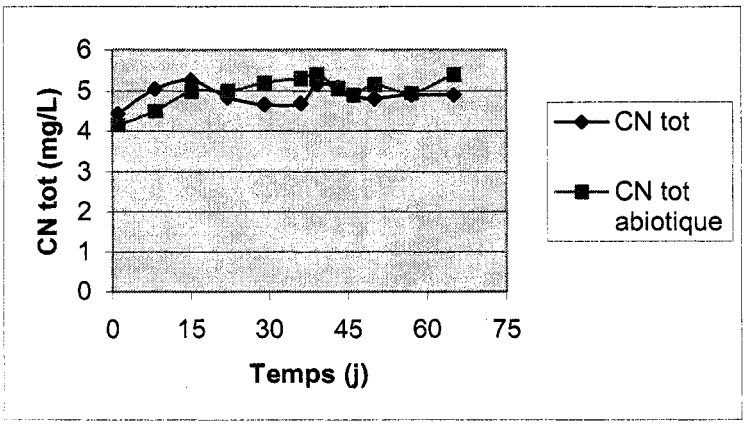


Figure 6.1 : Concentration en cyanure total en fonction du temps (PN2A)

Les tendances montrées par les courbes à la figure 6.1 sont très stables et très semblables que ce soit biotique ou abiotique. La quantité de cyanure dans l'eau souterraine varie très peu avec le temps et il ne semble pas y avoir de biodégradation. Les écarts-types étaient en moyenne de 0,48 mg/L pour les réacteurs biotiques (triplicats) et de 0,36 mg/L pour les réacteurs abiotiques (duplicatas).

La figure 6.2 présente les résultats pour les macrocosmes fait avec du matériel géologique et de l'eau souterraine provenant du puits PN3B.

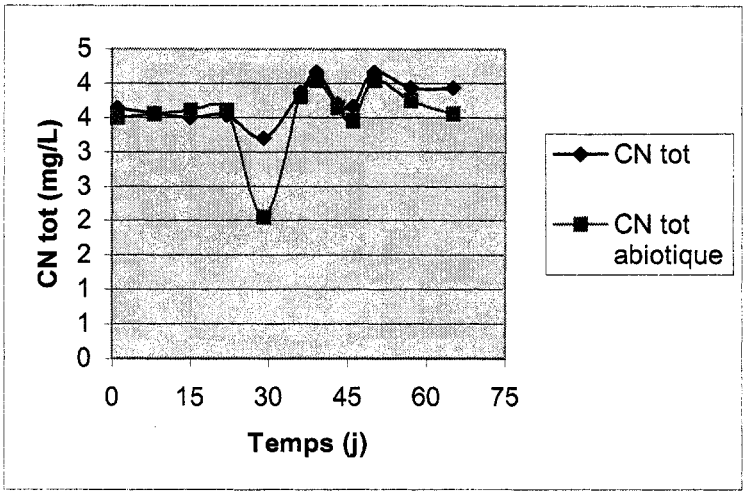


Figure 6.2 : Concentration en cyanure total en fonction du temps (PN3B)

Pour le puits PN3B, aussi bien dans les réacteurs biotiques que abiotiques, aucune diminution de la concentration en cyanures totaux n'est observée et même une légère hausse de la concentration est décelée. Les écarts-types étaient en moyenne de 0,14 mg/L pour les réacteurs biotiques (triplicats) et de 0,26 mg/L pour les réacteurs abiotiques (duplicatas).

La figure 6.3 présente les résultats pour les macrocosmes fait avec du matériel géologique et de l'eau souterraine provenant du puits MW12A.

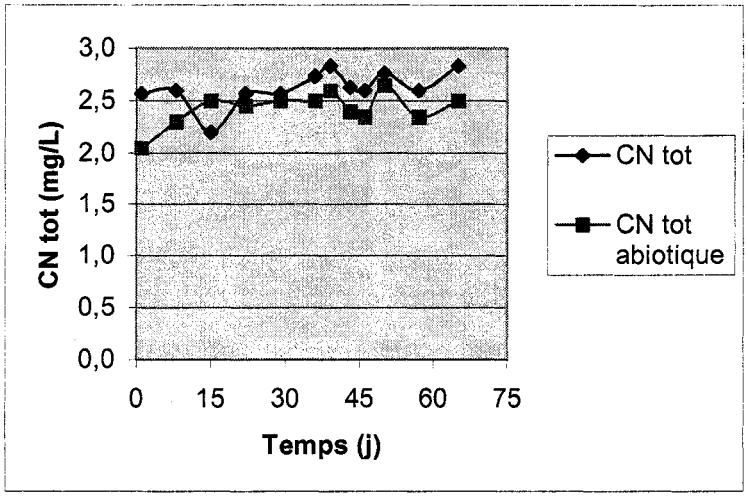


Figure 6.3 : Concentration en cyanure total en fonction du temps (MW12A)

À la figure 6.3, aucune diminution de la concentration en cyanures totaux n'a été observé. De plus, une légère augmentation de cette concentration a même été observée dans les deux cas, biotique et abiotique. Les écarts-types étaient en moyenne de 0,08 mg/L pour les réacteurs biotiques (triplicats) et de 0,02 mg/L pour les réacteurs abiotiques (duplicatas).

La figure 6.4 présente les résultats pour les macrocosmes fait avec du matériel géologique et de l'eau souterraine provenant du puits PZ3.

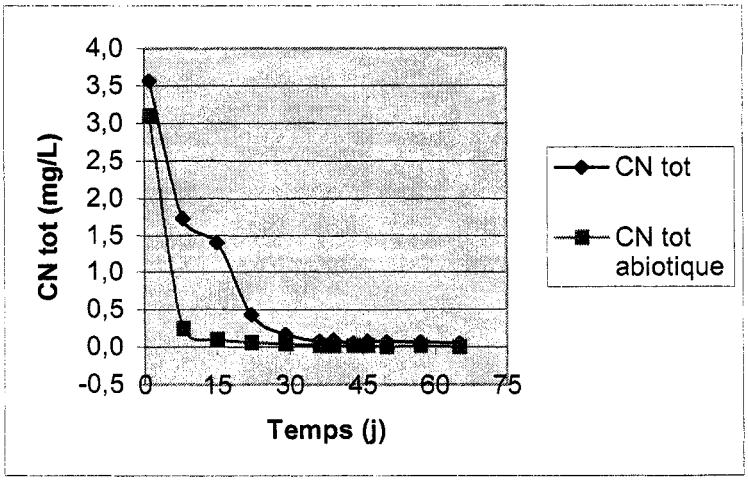


Figure 6.4 : Concentration en cyanure total en fonction du temps (PZ3)

Dans le cas du puits PZ3, les concentrations en cyanure diminuent rapidement jusqu'à la limite de détection. Par contre, ce phénomène est observé dans les macrocosmes biotiques et abiotiques ce qui laisse croire que la biodégradation n'est pas responsable de cette chute de la concentration. Les écarts-types étaient en moyenne de 0,18 mg/L pour les réacteurs biotiques (triplicats) et de 0,01 mg/L pour les réacteurs abiotiques (duplicatas).

Discussion

Puisque chaque puits possède des conditions physico-chimiques et biologiques qui lui sont propres, le potentiel de biodégradation sur le site étudié sera analysé puits par puits selon les résultats obtenus des essais de macrocosmes.

PN2A

Lors de la préparation des macrocosmes, aucun cyanure n'a été ajouté à l'eau souterraine provenant du puits PN2A car celui-ci est déjà suffisamment contaminé. La concentration en cyanure total dans l'eau souterraine variait de 4 à 6 mg/L au début des essais. Selon les graphiques présentés ci-dessus, la concentration en CN total a très peu changé pendant les 65 jours. Une légère hausse a même été observée puisque la concentration finale moyenne des réacteurs biotiques est de 4,9 mg/L contre 4,43 mg/L au départ. Le même phénomène s'est produit dans les réacteurs abiotiques les valeurs passant de 4,15 mg/L à 5,4 mg/L ce qui confirme que cela n'est pas dû à un phénomène biologique.

Ainsi, il ne semble pas y avoir, dans les conditions de l'expérience (10°C, dans le noir, légère agitation) de biodégradation se produisant pour le puits PN2A. Ceci confirmerait les études (Ghosh, 1998; Meeussen, 1992) qui disent que les complexes fer-cyanures sont persistants dans l'eau souterraine, dans le noir, et qu'ils sont peu sujet à la biodégradation. Ces complexes forment l'espèce de cyanure dominante à ce puits (voir chapitre 3). Le fait que l'eau souterraine du puits PN2A a un pH élevé (autour de 9,60)

empêche la formation de cyanures libres à partir des complexes qui auraient pu être biodégradés plus facilement.

PN3B

Ce puits est faiblement contaminé en cyanure donc il a fallu ajouter à l'eau souterraine utilisée pour les essais une certaine quantité de ferrocyanure de potassium. Le suivi fait sur la concentration en cyanure total tout au long de l'expérience indique que celle-ci ne varie que très peu. Ainsi, pour les réacteurs biotiques, la concentration passe de 3,6 à 3,9 mg/L et pour les réacteurs abiotiques, de 3,5 à 3,55 mg/L.

Comme pour les puits PN2A et MW12A, la concentration en cyanure ne diminue pas dans le temps indiquant que le phénomène de biodégradation ne se produit pas ou très peu. Le fait que les résultats des réacteurs abiotiques soient semblables à ceux des réacteurs biotiques permet d'affirmer que les phénomènes biologiques n'y ont pas un impact significatif.

MW12A

Comme pour le puits PN2A, les réacteurs associés au puits MW12A n'ont pas nécessité l'ajout de ferrocyanure de potassium puisque la concentration en cyanure total y était déjà significative (entre 2 et 3 mg/L). Les résultats de la variation de la concentration en cyanure total pour ce puits ressemblent beaucoup à ceux du puits PN2A puisqu'une légère hausse des concentrations y est aussi observée, de 2,6 à 2,8 mg/L (biotiques) et de 2,05 à 2,5 mg/L (abiotiques). Ici aussi le phénomène ne semble pas être de nature biologique.

Ces données indiquent que la biodégradation à ce puits y est extrêmement faible ou inexistante. Il semble que les microorganismes n'ont pu dégrader les complexes fer-cyanures, dominants à ce puits selon la modélisation, dans ces conditions, pour les puits PN2A, PN3B et MW12A.

PZ3

Les résultats obtenus au puits PZ3 différent beaucoup de ceux des autres puits. Dans ce cas-ci, la concentration en cyanure (qui a été ajouté aux réacteurs sous forme de ferrocyanure de potassium) diminue jusqu'à ce qu'il soit non détectable dans les analyses passant de 3,6 à 0,05 mg/L (biotiques) et de 3,1 mg/L à sous la limite de détection (0,02mg/L) (abiotiques).

Cependant, puisque le phénomène de la diminution de la concentration en cyanure se produit également dans les réacteurs abiotiques, cette diminution n'est probablement pas due au phénomène de biodégradation. Le bas pH (environ 6,5) qui y est observé explique probablement cette diminution puisqu'il peut être responsable de la dissociation des complexes en cyanures libres et, par la suite, de la volatilisation de ces cyanures libres sous la forme de HCN (g). Selon la figure 1.2, à un pH de 6,5, presque tout le cyanure libre est sous la forme HCN (g). Cette volatilisation aurait été de la même magnitude peu importe le réacteur, abiotique ou biotique.

6.3 CONCLUSION

Le phénomène d'atténuation naturelle qu'est la biodégradation est observé dans plusieurs situations où un site est contaminé par un contaminant biodégradable. Cependant, l'efficacité de ce mécanisme dépend de plusieurs facteurs tels que la nature du contaminant, les conditions du terrain et la présence de bactéries indigènes.

Dans ce cas-ci, la revue de la littérature (voir chapitre 1) a indiqué que les cyanures pouvaient être dégradés par un certain nombre de bactéries selon divers mécanismes en conditions aérobies surtout, mais aussi en conditions anaérobies dans le cas de cyanures non-complexés. Selon le mécanisme, les produits de cette biodégradation s0ont le

formate, le formamide, le méthane, le dioxyde de carbone et l'ammoniac. Par contre, la biodégradation des complexes fer-cyanures, l'espèce dominante sur le site, est beaucoup plus lente que celle des cyanures libres et son mécanisme de biodégradation n'est pas encore défini. Ainsi, les complexes forts sont souvent considérés comme persistants dans l'eau souterraine (Meeussen et al. 1992).

L'eau souterraine du site n'offre pas des conditions optimales pour la biodégradation. Ce milieu est relativement froid (environ 10°C), l'oxygène dissout y est rare et l'absence de lumière empêche la photodécomposition des complexes de fer-cyanures en cyanures libres qui eux, sont reconnus pour se dégrader beaucoup plus rapidement que les complexes.

Malgré tout, lors des essais de dénombrement bactérien, il a été prouvé que l'eau souterraine et le matériel géologique du site contiennent des bactéries indigènes capables de survivre et de croître dans un milieu contaminé aux cyanures. Ces bactéries ont été observées dans tous les puits dans des concentrations variant de 10^3 à 10^5 UFC/mL dans l'eau souterraine et de 10^4 à 10^6 UFC/g dans le matériel géologique.

Pour évaluer le potentiel de biodégradation des cyanures contenus dans l'eau souterraine, des essais en macrocosmes ont été menés. Ces derniers respectaient les conditions retrouvées sur le terrain et utilisaient l'eau souterraine et le matériel géologique provenant du site. Malgré l'existence de bactéries indigènes tel que prouvé dans la section précédente, aucun réacteur ne semblait démontrer un potentiel pour la biodégradation des cyanures.

Le principal facteur considéré pour l'absence de biodégradation est la spéciation des cyanures, ces derniers étant majoritairement présents sous forme de complexes fer-cyanures, beaucoup moins dégradables que les cyanures libres, dans les puits PN2A, PN3B et MW12A (voir les résultats du chapitre 4). Dans le cas de PZ3, une diminution

importante dans les réacteurs biotiques et abiotiques empêchent de conclure sur le potentiel de biodégradation. Cette diminution est probablement due à la volatilisation vu le pH acide de l'eau souterraine. Cette volatilisation est peu susceptible de se produire en milieu naturel cependant à cause de la couche de sol séparant l'eau souterraine de l'atmosphère.

La biodégradation ne peut donc être considérée comme un mécanisme d'atténuation naturelle important sur ce site.

CONCLUSION GÉNÉRALE

L'efficacité de l'atténuation naturelle dépend de multiples facteurs et peu difficilement être connue à l'avance. En revanche, un suivi précis d'une contamination peut permettre d'observer cette atténuation naturelle. L'objectif de ce projet était de vérifier si la diminution de la concentration en cyanures dans l'eau souterraine observée sur un site peut être attribuée à ce phénomène et d'identifier les mécanismes menant à cette atténuation. Pour ce faire, de l'eau souterraine et du matériel géologique prélevés sur le terrain par Alcan ont été utilisés dans la réalisation de différents tests en laboratoire. Ces tests comprenaient une caractérisation physico-chimique des échantillons d'eau souterraine, une modélisation d'équilibre géochimique, des essais d'adsorption et des essais de biodégradation en microcosmes, ces derniers ayant été identifiés comme les mécanismes les plus susceptibles de se produire sur le site pour des cyanures dans l'eau souterraine d'après une revue de la littérature. Tous ces essais ont été menés en s'assurant de respecter le plus possible les conditions rencontrées sur le site de manière à représenter fidèlement ce qui se passe sur le terrain.

Caractérisation

- L'étude des résultats de la caractérisation a permis de déduire que les cyanures présents dans l'eau souterraine étaient principalement sous la forme de complexes fort, surtout avec le fer;
- Pour les puits PN2A, PN3B, MW12A et PZ3, les valeurs des concentrations en cyanure total et en cyanure SAD dans l'eau souterraine sont respectivement de 4,8 mg/L, 0,056 mg/L, 2,6 mg/L, 0,032 mg/L et 4,72 mg/L, 0,042 mg/L, 2,58 mg/L, 0,032 mg/L;

Modélisation géochimique

- La modélisation avec Vminteq a montré qu'une espèce de complexe fer-cyanures, le $Na_2Fe(CN)_6^{-2}$, domine effectivement dans les trois puits situé dans le panache et que le potentiel de précipitation des cyanures est faible;
- La précipitation ne peut donc pas être considéré comme un mécanisme significatif d'atténuation naturelle sur ce site;

Adsorption

- Le puits PN3B a montré qu'il existe un potentiel d'atténuation naturelle par adsorption important dans le milieu du panache de contamination sur le site étudié, la réduction en cyanures libres était de 89% (avec de l'eau souterraine du site) et des cyanures complexés de 99% (avec de l'eau synthétique);
- Le puits PZ3, situé hors du panache, montre un potentiel moyen pour l'adsorption, la concentration en CN total passant de 5 mg/L à 3 mg/L, malgré son caractère sablonneux;
- Les puits PN2A et MW12A, situés respectivement au début et à la fin du panache, n'ont montré quant à eux aucun potentiel d'adsorption. La «charge» de l'eau souterraine et du matériel géologique, de même que la nature de ce dernier, semblent avoir été les deux principaux facteurs influençant le niveau d'adsorption.

Biodégradation

- Des essais de dénombrement ont montré l'existence dans l'eau souterraine (10^3 à 10^5 UFC/mL) et dans le matériel géologique (10^4 à 10^6 UFC/g) de fortes populations de bactéries indigènes capables de se développer même en présence de cyanure;
- Aucun puits n'a démontré une baisse de la concentration en cyanure pouvant être due à un phénomène biologique;

- Dans le cas des puits PN2A, PN3B et MW12A, le facteur le plus important est sûrement la spéciation du cyanure, les complexes forts se dégradant beaucoup moins rapidement que les cyanures libres;
- La température, la concentration en oxygène dissous et l'absence de lumière sont également des facteurs pouvant expliquer la faible biodégradation;
- En dehors du panache, il est impossible de conclure sur un potentiel de biodégradation car, dans les réacteurs biotiques et abiotiques, il semble y avoir eu volatilisation des cyanures;

Conclusion générale

- Il semble donc que la diminution en cyanure dans l'eau souterraine ne puisse être reliée à la précipitation et la biodégradation;
- Dans le cas de l'adsorption, le puits PN3B, situé au milieu du panache, montre un potentiel d'atténuation naturelle important;
- Plus d'essais sont nécessaires pour quantifier le potentiel global d'atténuation naturelle par adsorption.

L'étude des différents mécanismes d'atténuation naturelle présents sur le site à l'étude a permis de bien comprendre le devenir de la contamination. Elle indique quels sont les mécanismes principaux agissant ou encore quels sont les facteurs limitant ces mécanismes. Cette méthode est donc d'une grande utilité dans l'étude du devenir des sites contaminés.

RECOMMANDATIONS

Quelques recommandations sont suggérées ci-après pour les études ultérieures concernant l'un ou l'autre des aspects de cette étude.

Recommandations principales

- Effectuer une analyse de risque écotoxicologique pour connaître les risques reliés à la présence de cette contamination aux complexes fer-cyanures.

- Effectuer une caractérisation détaillée de l'eau souterraine et du matériel géologique à d'autres endroits le long du panache pour quantifier le potentiel global d'atténuation naturelle par adsorption.

- Effectuer d'autres études de modélisation d'équilibre géochimique avec les données générées annuellement lors des campagnes d'échantillonnage puisque les conditions sur le terrain (ex. pH, redox) peuvent varier et influent grandement sur la spéciation finale.

- Effectuer des études hydrogéologiques plus poussées, notamment pour évaluer le potentiel d'atténuation naturelle des cyanures par la dilution, par exemple par des essais en colonne.

Autres recommandations

- S'il est nécessaire de réhabiliter le site, investiguer les techniques de réhabilitation *in-situ* puisqu'il a été démontré par Godin (2004) que la restauration hors site entraînerait plus d'impacts sur l'environnement que le laisser en place.

- Modéliser, dans un premier temps, à l'aide d'un logiciel d'équilibre géochimique le potentiel d'un traitement de l'eau souterraine par l'emploi de barrières réactives de fer puis par des essais en laboratoire.

- Réaliser d'autres essais de biodégradation pour les complexes forts pour vérifier s'ils possèdent un potentiel de biodégradation ou s'ils se dégradent seulement après s'être dissociés en cyanures libres.

- Réaliser d'autres essais de biodégradation des cyanures libres et complexés dans des conditions défavorables (ex. anaérobie, températures basses).

- Éclaircir le rôle joué par la matière organique dans l'adsorption des cyanures.

RÉFÉRENCES BIBLIOGRAPHIQUES

ADAMS, M.D. (1992). "The Removal of Cyanide from Aqueous Solution by the Use of Ferrous Sulphate. " Journal of the South African Institute Mining & Metallurgy, 92(1): 17-25.

ALESII, B.A. et FULLER, W.H. (1976). "The Mobility of Three Cyanide Forms in Soils. Residual Management by Land Disposal", Proceedings of the Hazardous Waste Research Symposium, U.S. Environmental Protection Agency, Cincinnati, OH, 213-223.

ANNACHHATRE, A.P. et AMORNKAEW, A. (2000). "Toxicity and Degradation of Cyanide in Batch Methanogenesis." Environmental Technology, 21: 135-145.

ARONSTEIN, B.N., LAWAL, R.A. et MAKA, A. (1994). "Chemical Degradation of Cyanides by Fenton's Reagent in Aqueous and Soil-Containing Systems." Environmental Toxicology and Chemistry, 13(11): 1719-1726.

ATSDR (THE AGENCY FOR TOXIC SUBSTANCES AND DISEASE REGISTRY). (1997). "Toxicological Profile for cyanide. " U.S Department of Health and Human Services, Public Health Service.

BARCLAY, M., HART, A., KNOWLES, C.J., MEEUSSEN, J.C.L. et TETT, V.A. (1998). "Biodegradation of Metal Cyanides by mixed and pure cultures of fungi." Enzyme and Microbial Technology, 22: 223-231.

BOTZ, M.M. (2001). "Overview of Cyanide Treatment Methods. " Mining Environmental Management, Mining Journal Ltd, London, UK, May: 28-30.

BOTZ, M.M., STEVENSON, J.A., WILDER, A.L., RICHINS, R.T., MUDDER, T.I. et BURDETT, B. (1995). "Cyanide Recovery and Destruction". Engineering and Mining Journal, June: 44-47.

BRUN, P. (1925). "L'industrie des cyanures. " Doin, G. (ed.), Librairie Octave Doin, Paris.

BUREAU D'AUDIENCES PUBLIQUES SUR L'ENVIRONNEMENT. (1997). "Projet de construction d'une usine d'électrolyse à Alma, par Alcan Aluminium ltée." Rapport d'enquête et d'audience publique 120, Bibliothèque Nationale du Québec, Québec, Canada, 181 p.

BUSHEY, J.T. et DZOMBAK, D.A. (2003). "Ferrocyanide adsorption on aluminum oxydes." Journal of Colloid and Interface Science, 272:46-51.

CHENG, W.P. et HUANG, C. (1996). "Adsorption Characteristics of Iron-Cyanide Complex on y-Al_2O_3. " Journal of Colloid and Interface Science, 181: 627-634.

CHERRYHOLMES, K.L., CORNILS, W.J., MCDONALD, D.B. et SPLINTER, R.C. (1985). "Biological Degradation of Iron Cyanide In Natural Aquatic Systems." Aquatic Toxicology and Hazard Assessment, Cardwell, Purdy and Bahner (eds), 7th symposium ASTM STP 854, American Society for Testing Materials, Philadelphia, PA., 502-511.

CHESHIRE, M.V., DUMAT, C., FRASER, A.R., HILLIER, S. et STAUNTON, S. (2000). "The interaction between soil organic matter and soil clay minerals by selective removal and controlled addition of organic matter. " Eur. Journal of Soil Science, 51: 497-509.

CHRISTENSEN, T.H., BJERG, P.L. et KJELDSEN, P. (2000). "Natural Attenuation: A Feasible Approach to Remediation of Ground Water Pollution at Landfills? " Ground Water Monitoring & Remediation, Winter: 69-77.

DILLON CONSULTING LIMITED. (2001). "Preliminary Site Investigation/Risk Assessment: Alcan Kitimat's SPL Landfills. " Report prepared for Alcan Primary Metal Group.

DUBEY, S.K. et HOLMES, D.S. (1995). "Biological cyanide destruction mediated by microorganisms. " World Journal of Microbiology & Biotechnology, 11: 257-265.

DUDAL, Y. et GÉRARD, F. (2004). "Accounting for natural organic matter in aqueous chemical equilibrium models: a review of the theories and applications. " Earth-Science Reviews, 66: 199-216.

DUMESTRE, A (1995). "Biodégradation des cyanures contenus dans des résidus de la fabrication de l'aluminium. " Thèse de doctorat. Université Henri Poincaré, Nancy I.

DURSUN, A.Y., CALIK, A. et AKSU, Z. (1999). "Degradation of ferrous(II) cyanide complex ions by Pseudomonas fluorescens. " Process Biochemistry, 34(9): 901-908.

DZOMBAK, D.A., DOBBS, C.L., CULLEITON, C.J., SMITH, J.R. et KRAUSE, D. (1996). "Removal of Cyanide from Spent Potlining Leachate by Iron Cyanide Precipitation." Proc. Water Environ. Fed. 69th Annu. Conf. Exposition, Dallas, Texas, 107-116.

EBBS, S. (2004). "Biological degradation of cyanide compounds. " Current Opinion in Biotechnology, 15: 231-236.

FALLON, R.D. (1991). "Evidence of a Hydrolytic Route for Anaerobic Cyanide Degradation. " Applied Environmental Microbiology, 58: 3163-3164.

GARCIA, H.J., FUERSTENAU, M.C., HENDRIX, J.L. et LUPAN, D.M. (1995). "Fate of Cyanide in Anaerobic Microbial Systems. " In: B.J. Scheiner et al. (Eds.), New Remediation Technology in the Changing Environmental Arena, SME, Littleton, CO, 229-234.

GHOSH, R. S. 1998, "Geochemistry, Transport, and Treatment of Cyanide in the Subsurface," Thèse de doctorat, Carnegie Mellon University.

GHOSH, R.S., DZOMBAK, D.A., LUTHY, R.G. et NAKLES, D.V. (1999a). "Subsurface Fate and Transport of Cyanide Species at a Manufactured-Gas Plant Site." Water Environment Research 71(6): 1205-1216.

GHOSH, R.S., DZOMBAK, D.A., LUTHY, R.G. et SMITH, J.R. (1999b). "In Situ Treatment of Cyanide-Contaminated Groundwater by Iron Cyanide Precipitation." Water Environment Research, 71(6): 1217-1228.

GHOSH, R.S., NAKLES, D.V., MURARKA, I.P. et NEUHAUSER, E.F. (2004). "Cyanide Speciation in Soil and Groundwater at Manufactured Gas Plant (MGP) Sites." Environmental engineering science, 21(6): 752-767.

GODIN, Julie (2004). "Évaluation environnementale de la réhabilitation d'un site d'enfouissement de brasques usées. ", Mémoire de maîtrise, École Polytechnique de Montréal.

GOLDER ASSOCIATES (2001). "2000 Annual Report - Spent Pot Lining Landfill." Kitimat, B.C., Alcan Primary Metal Group.

GOLDSTON, A. et MUDDER, T.I. (1998). "Cyanisorb Cyanide Recovery Process Design, Commissionning and Early Performance. " Dans: The Cyanide Monograph, Mining Journal Books Limited, London.

HARRIS, R. et KNOWLES, C.J. (1983). "Isolation and growth of Pseudomonas species that utilizes cyanide as a source of nitrogen. " Journal of General Microbiology, 129: 1005-1011.

HOMMELGAARD, H., MUCH, S.K., MOSBAEK, H. et KJELDSEN, P. (1998). "Natural Attenuation of Iron-complexed Cyanides in Soil and Groundwateer at Former Gasworks Sites. " Contaminated Soil '98 Edinburgh (UK), 17-21 May 1998. Thomas Telford, London, 819-820.

INTERNATIONAL ALUMINIUM INSTITUT (2002). Aluminium Production. [En ligne]. http://www.world-aluminium.org/production/index.html.

KJELDSEN, P. (1999). "Behaviour of Cyanides in Soil and Groundwater: A Review." Water, Air, and Soil Pollution, 115: 279-307.

LAHA, S. et LUTHY, R.G. (1991). "Investigation of microbial degradation of fixed cyanide." Rep. to Aluminium Assoc., Washington, D.C., and Gas Res. Inst., Chicago, Ill., 44.

LIBAUDE, J. (1994). "Minerais d'or." La recherche, 265, 547-554.

MADERSAN, J. et HOUSE, J. (1992). "The chemistry of gold extraction. " Ellis Horwood (ed.), England.

MCLEAN, J.E. et BLEDSOE, B.E. (1992). "Behavior of Metals in Soils." US EPA/540/S-92/018.

MEEHAN, S.M.E., WEAVER, T.R. et LAWRENCE, C.R. (1999). "The Biodegradation of Cyanide in Groundwater at Gasworks Sites, Australia: implications for site management." Environmental Management and Health, 10(1): 64-71.

MEEHAN, S.M.E. (2000) "The Fate of Cyanide in Groundwater at Gasworks Sites in South-Eastern Australia. " Thèse de doctorat, School of Earth Sciences, University of Melbourne.

MEEUSSEN, J.C.L., KEIZER, M.G. et DE HAAN, F.A.M. (1992). "Chemical Stability and Decomposition Rate of Iron Cyanide Complexes In Soil Solutions." Environmental Science & Technology, 26(3): 511-516.

MEEUSSEN, J.C.L., KEIZER, M.G., VAN RIEMSDIJK, W.H. et HAAN, F.A.M. (1994). "Solubility of Cyanide in Contaminated Soils. " Journal of Environment Quality, 23: 785-792.

MORPER, M.R. (1999). "Combination Therapy Tackles Wastewater Toxins. " Chemical Engineering, 106(8): 66-70.

NIELSEN, P., DRESOW, B., FISHER, R. et HEINRICH, H.C. (1990). "Bioavailability of iron and cyanide from oral potassium ferric hexacyanofer- rate(II) in humans. " Arch Toxicol, 64: 420-422.

OMOFONA, M.A. et HAMPTON, A.P. (1992). "Cyanide Recovery in a CCD Merrill-Crowe Circuit: Pilot Testwork of a Cyanisorb Process at the NERCO DeLamar Silver Mine", Proceedings Randol Gold Forum, 359-365.

OUDJEHANI, K, (2000). "Étude du potentiel d'atténuation naturelle des cyanures dans des résidus miniers provenant d'usines de traitement de minerai d'or" Mémoire de maîtrise, École Polytechnique de Montréal.

OUDJEHANI, K., ZAGURY, G.J. et DESCHÊNES, L. (2002). "Natural Attenuation Potential of Cyanide via Microbial Activity in Mine Tailings." Applied Microbiology and Biotechnology, 58(3): 409-415.

OWENBACK, D. (1978). "The instability of free cyanide in photographic process effluents." J. App. Pht. Eng., 4: 72-76.

PARADIS, G. (1998). "La gestion des brasques usées au Canada." Essai de maîtrise en sciences de l'environnement. Université de Sherbrooke.

RAYBUCK, S.A. (1992). "Microbes and microbial enzymes for cyanide degradation. " Biodegradation, 3: 3-18.

RENNERT, T. et MANSFELDT, T. (2002). "Sorption of Iron-Cyanide Complexes in Soils. " Soil Science Society of America Journal, 66: 437-444.

SAMSON, R. et al. (2002). "Environmental Analysis of Management Options for the Kitimat Spent Pot Lining (SPL) Landfills." Rapport preparé pour Alcan Primary Metal Group.

SCOTT, J. et INGLES, J. (1987). "State of the art process for the treatment of gold mill effluents. " Mining, Mineral and Metallurgical Process Division, Environnement Canada.

SHIFRIN, N.S., BECK, B.D., GAUTHIER, T.D., CHAPNICK, S.D. et GOODMAN, G. (1996). " Chemistry, Toxicology, and Human Health Risk of Cyanide Compounds in Soils at Former Manufactured Gas Plant Sites." Regulatory Toxicology and Pharmacology, 23(2): 106-116.

SMITH, A., et MUDDER, T. (1991). "The chemistry and treatment of cyanidation wastes" Mining Journal Books Ltd, London, 345 p.

SMITH, A. et STRUHSACKER, D. (1987). "Cyanide geochemistry in an abandoned heap leach system and regulations for cyanide detoxification. " Presented at the Gold Mining Conference, 1987, Vancouver, BC, Canada, 412-430.

STEVENSON, F.J. (1994). "Humus Chemistry: Genesis, Composition, Reactions. " Wiley, New York, NY.

THEIS, T. L., YOUNG, T.C., HUANG, M. et KNUTSEN, K.C. (1994). "Leachate Characteristics and Composition of Cyanide-Bearing Wastes from Manufactured Gas Plants." Environmental Science & Technology, 28(1): 99-106.

THEIS, T. L., et WEST, M.J. (1986). " Effects of Cyanide Complexation on Adsorption of Trace Metals at the Surface of Goethite. " Environ. Technol. Letters, 7: 309-318.

TUOMINEN, L., KAIRESALO, T. et HARTIKAINEN, H. (1994). " Comparison of Methods for Inhibiting Bacterial Activity in Sediment. " Applied and Environmental Microbiology, Sept.: 3454-3457.

TURKMAN, A. (1998). "Cyanide behaviour in soil and groundwater and its control. " International Journal of Environmental Studies, 54: 107-122.

USEPA (U.S. Environmental Protection Agency). (1992). "Drinking water criteria document for cyanide. " États-Unis: Environmental Criteria and Assessment Office.

VON RÈGE, H. et SAND, W. (1998). "Evaluation of biocide efficiency by microcalorimetric determination of microbial activity in biofilms. " Journal of Microbiological Methods, 33: 227-235.

WANG, C.-S., KUNZ, D.A. et VENABLES, B.J. (1996). "Incorporation of Molecular Oxygen and Water during Enzymatic Oxidation of Cyanide by Pseudomonas fluorescens NCIMB 11764." Applied and Environmental Microbiology, 62(6): 2195-2197.

YOUNG, C. A. et JORDAN, T.S. (1995). "Cyanide Remediation: Current and Past Technologies." L. E. Erickson, D. L. Tillison, S. C. Grant and J. P. McDonald, 10th Annual Conference on Hazardous Waste Research, Kansas State University, Manhattan, Kansas, 104-129.

ZAGURY, G.J., OUDJEHANI, K. et DESCHÊNES, L. (2004). "Characterization and availability of cyanide in solid mine tailings from gold extraction plants" Science of the Total Environment, 320: 211-224.

ANNEXE I

Fichiers VMINTEQ pour PN2A

Table des concentrations (2003)

	Concentration	Activity	Log activity
Al DOM1	4,2754E-14	4,2332E-14	-13,373
Al(OH)2+	2,9982E-10	2,3396E-10	-9,631
Al(OH)3 (aq)	8,2179E-08	8,4292E-08	-7,074
Al(OH)4-	0,00013732	0,00010716	-3,97
Al(SO4)2-	1,6917E-18	1,3201E-18	-17,879
Al+3	7,4251E-17	7,9658E-18	-17,099
Al2(OH)2+4	1,151E-22	2,1755E-24	-23,662
Al2(OH)2CO3+2	8,4199E-14	3,122E-14	-13,506
Al2PO4+3	1,9658E-22	2,1089E-23	-22,676
Al3(OH)4+5	1,1342E-26	2,2999E-29	-28,638
AlCl+2	1,8783E-20	6,9645E-21	-20,157
AlF+2	4,921E-12	1,8246E-12	-11,739
AlF2+	2,2265E-08	1,7374E-08	-7,76
AlF3 (aq)	4,8956E-06	5,0215E-06	-5,299
AlF4-	8,0053E-05	6,2468E-05	-4,204
AlHPO4+	1,2038E-14	9,3937E-15	-14,027
AlOH+2	2,2244E-13	8,2475E-14	-13,084
AlSCN+2	7,4367E-20	2,7574E-20	-19,559
AlSO4+	4,7734E-17	3,7248E-17	-16,429
Ca DOM1	0,00031646	0,00027001	-3,569
Ca+2	2,7341E-05	1,0138E-05	-4,994
Ca2Fe(CN)6 (aq)	3,6122E-18	3,7051E-18	-17,431
CaCl+	6,4015E-08	4,9953E-08	-7,301
CaCO3 (aq)	3,5907E-05	3,6831E-05	-4,434
CaF+	0,00000325	2,5361E-06	-5,596
CaFe(CN)6-	1,5465E-22	1,2068E-22	-21,918
CaFe(CN)6-2	2,9007E-14	1,0755E-14	-13,968
CaH2PO4+	4,7513E-11	3,7076E-11	-10,431
CaHCO3+	3,2628E-06	2,546E-06	-5,594
CaHPO4 (aq)	1,3207E-07	1,3546E-07	-6,868
CaOH+	1,8608E-09	1,4521E-09	-8,838
CaPO4-	9,7432E-07	7,603E-07	-6,119
CaSO4 (aq)	1,8589E-06	1,9067E-06	-5,72
Cl-1	0,0027503	0,0021461	-2,668
CN-1	1,9098E-08	1,4902E-08	-7,827
CO3-2	0,0071719	0,0026592	-2,575
DOM1	0,0050367	0,00072048	-3,142
F-1	0,031809	0,024822	-1,605
Fe DOM1	9,9185E-14	9,8205E-14	-13,008
Fe(CN)6-3	1,7167E-19	1,8417E-20	-19,735

Fe(CN)6-4	1,434E-11	2,7104E-13	-12,567
Fe(OH)2 (aq)	6,0988E-08	6,2555E-08	-7,204
Fe(OH)2+	5,1733E-07	4,0369E-07	-6,394
Fe(OH)3-	6,5939E-09	5,1454E-09	-8,289
Fe(OH)3 (aq)	2,8625E-07	2,9361E-07	-6,532
Fe(OH)4-	3,7876E-06	2,9556E-06	-5,529
Fe(SCN)2+	6,7616E-21	5,2763E-21	-20,278
Fe(SCN)3 (aq)	3,8675E-23	3,9669E-23	-22,402
Fe(SO4)2-	1,0822E-20	8,4446E-21	-20,073
Fe+2	8,5336E-05	3,1641E-05	-4,5
Fe+3	5,4471E-19	5,8438E-20	-19,233
Fe2(CN)6 (aq)	2,1114E-36	2,1657E-36	-35,664
Fe2(OH)2+4	5,8829E-22	1,1119E-23	-22,954
Fe3(OH)4+5	4,0504E-24	8,2131E-27	-26,085
Fe3(OH)4+5	9,6142E-25	1,9495E-27	-26,71
FeCl+	5,4908E-08	4,2846E-08	-7,368
FeCl+	6,9125E-07	5,394E-07	-6,268
FeCl+2	6,0926E-21	2,2591E-21	-20,646
FeF+	1,6323E-05	1,2737E-05	-4,895
FeF+2	3,4263E-15	1,2704E-15	-14,896
FeF2+	1,4394E-12	1,1232E-12	-11,95
FeF3 (aq)	2,2761E-11	2,3346E-11	-10,632
FeH2PO4+	2,9012E-09	2,2639E-09	-8,645
FeH2PO4+2	4,2578E-22	1,5787E-22	-21,802
FeHCO3+	9,5881E-06	7,4819E-06	-5,126
FeHPO4 (aq)	3,3561E-06	3,4424E-06	-5,463
FeHPO4+	3,3041E-14	2,5783E-14	-13,589
FeOH+	1,3964E-05	1,0897E-05	-4,963
FeOH+2	2,5779E-12	9,5584E-13	-12,02
FeOHSCN+	1,2656E-23	9,8758E-24	-23,005
FeSCN+	1,0895E-06	8,5021E-07	-6,07
FeSCN+2	2,4645E-19	9,138E-20	-19,039
FeSO4 (aq)	6,0923E-06	6,249E-06	-5,204
FeSO4+	4,6141E-19	3,6005E-19	-18,444
H DOM1	1,8385E-07	8,2308E-08	-7,085
H+1	4,2435E-10	3,3113E-10	-9,48
H2CO3* (aq)	0,0000264	2,7078E-05	-4,567
H2Fe(CN)6-2	3,5922E-25	1,3319E-25	-24,876
H2PO4-	2,7414E-07	2,1392E-07	-6,67
H3PO4	8,2043E-15	8,4152E-15	-14,075
HCN (aq)	2,0776E-08	2,131E-08	-7,671
HCO3-	0,035459	0,02767	-1,558
HF (aq)	8,9956E-09	9,2269E-09	-8,035

HF2-	1,0656E-09	8,3153E-10	-9,08
HFe(CN)6-3	1,633E-17	1,7519E-18	-17,756
HPO4-2	0,00010324	0,00003828	-4,417
HSCN (aq)	3,3748E-14	3,4616E-14	-13,461
HSO4-	2,6117E-11	2,038E-11	-10,691
K+1	0,00095759	0,00074724	-3,127
K2Fe(CN)6-2	4,9614E-09	1,8396E-09	-8,735
K2H2Fe(CN)6	4,185E-25	4,2926E-25	-24,367
K2HPO4 (aq)	1,9838E-10	2,0348E-10	-9,691
K2PO4-	4,5315E-12	3,5361E-12	-11,451
K3HFe(CN)6	7,8191E-21	8,0201E-21	-20,096
KCl (aq)	8,5728E-07	8,7932E-07	-6,056
KF (aq)	8,2654E-06	8,4779E-06	-5,072
KFe(CN)6-2	9,7734E-22	3,6238E-22	-21,441
KFe(CN)6-3	3,8544E-13	4,135E-14	-13,384
KH2PO4 (aq)	2,0751E-10	2,1285E-10	-9,672
KHFe(CN)6-2	6,8257E-13	2,5308E-13	-12,597
KHPO4-	1,9851E-07	1,5491E-07	-6,81
KOH (aq)	1,0951E-08	1,1233E-08	-7,95
KPO4-2	1,3477E-09	4,9969E-10	-9,301
KSO4-	4,8864E-06	3,8131E-06	-5,419
Mg DOM1	3,8843E-05	3,3141E-05	-4,48
Mg+2	3,3559E-05	1,2443E-05	-4,905
Mg2CO3+2	4,3201E-09	1,6018E-09	-8,795
MgCl+	1,2453E-07	9,7175E-08	-7,012
MgCO3 (aq)	2,1074E-05	2,1616E-05	-4,665
MgF+	2,3476E-05	1,8319E-05	-4,737
MgFe(CN)6-	1,6928E-22	1,3209E-22	-21,879
MgFe(CN)6-2	4,4848E-14	1,6629E-14	-13,779
MgHCO3+	4,1627E-06	3,2483E-06	-5,488
MgHPO4 (aq)	2,2376E-07	2,2951E-07	-6,639
MgOH+	4,3517E-08	3,3958E-08	-7,469
MgPO4-	1,8694E-08	1,4587E-08	-7,836
MgSO4 (aq)	1,8661E-06	1,914E-06	-5,718
Mn(CN)2 (aq)	3,7884E-30	3,8858E-30	-29,411
Mn(OH)4-2	1,6993E-28	6,3008E-29	-28,201
Mn+2	4,0165E-18	1,4892E-18	-17,827
Mn+3	2,8554E-45	3,0633E-46	-45,514
Mn2(OH)3+	9,9649E-32	7,7759E-32	-31,109
Mn2OH+3	1,574E-36	1,6886E-37	-36,772
MnCl+	4,0958E-21	3,1961E-21	-20,495
MnCl2 (aq)	1,1892E-23	1,2198E-23	-22,914
MnCl3-	9,2398E-27	7,2101E-27	-26,142

MnCN+	5,8069E-24	4,5313E-24	-23,344
MnCO3 (aq)	1,9351E-16	1,9848E-16	-15,702
MnF+	1,17E-18	9,1298E-19	-18,04
MnHCO3+	9,0755E-19	7,082E-19	-18,15
MnHPO4 (aq)	1,0557E-19	1,0829E-19	-18,965
MnO4-	7,3922E-85	5,7684E-85	-84,239
MnO4-2	8,6795E-73	3,2182E-73	-72,492
MnOH+	3,7904E-20	2,9578E-20	-19,529
MnSCN+	4,5628E-20	3,5605E-20	-19,448
MnSO4 (aq)	2,0449E-19	2,0974E-19	-18,678
Na+1	0,098788	0,077087	-1,113
Na2Fe(CN)6-2	3,0736E-05	1,1397E-05	-4,943
Na2HPO4 (aq)	1,3949E-06	1,4308E-06	-5,844
Na2PO4-	1,0311E-07	8,0459E-08	-7,094
NaCl (aq)	9,6756E-05	9,9244E-05	-4,003
NaCO3-	0,0077273	0,0060299	-2,22
NaF (aq)	0,0014918	0,0015301	-2,815
NaFe(CN)6-3	2,8213E-11	3,0268E-12	-11,519
NaH2PO4 (aq)	2,1408E-08	2,1958E-08	-7,658
NaHCO3 (aq)	0,0013371	0,0013714	-2,863
NaHFe(CN)6-2	6,4814E-11	2,4032E-11	-10,619
NaHPO4-	3,1718E-05	2,4751E-05	-4,606
NaOH (aq)	7,4811E-07	7,6734E-07	-6,115
NaPO4-2	1,6271E-07	6,033E-08	-7,219
NaSO4-	0,00051116	0,00039888	-3,399
OH-	1,1086E-05	8,6504E-06	-5,063
PO4-3	3,244E-07	3,4802E-08	-7,458
S	0,0013411	0,0013755	-2,862
SCN-1	0,0016865	0,0013161	-2,881
SO4-2	0,0025971	0,00096297	-3,016

Table de distribution des espèces (2003)

Component	% of total component concentration	Species name
CO3-2	13,847	CO3-2
	68,459	HCO3-
	0,051	H2CO3* (aq)
	0,019	FeHCO3+
	0,041	MgCO3 (aq)
	0,069	CaCO3 (aq)
	14,919	NaCO3-
	2,581	NaHCO3 (aq)
Cl-1	96,541	Cl-1
	0,024	FeCl+
	0,03	KCl (aq)
	3,396	NaCl (aq)
F-1	94,425	F-1
	0,044	AlF3 (aq)
	0,951	AlF4-
	0,07	MgF+
	4,428	NaF (aq)
	0,048	FeF+
	0,025	KF (aq)
SO4-2	83,161	SO4-2
	0,195	FeSO4 (aq)
	0,06	MgSO4 (aq)
	0,06	CaSO4 (aq)
	16,368	NaSO4-
	0,156	KSO4-
PO4-3	0,228	PO4-3
	72,629	HPO4-2
	0,193	H2PO4-
	2,361	FeHPO4 (aq)
	0,013	MgPO4-
	0,157	MgHPO4 (aq)
	0,093	CaHPO4 (aq)
	0,685	CaPO4-
	22,314	NaHPO4-
	0,14	KHPO4-
	0,981	Na2HPO4 (aq)
	0,073	Na2PO4-
	0,015	NaH2PO4 (aq)

	0,114	NaPO4-2
CN-1	0,01	CN-1
	99,962	Na2Fe(CN)6-2
	0,016	K2Fe(CN)6-2
	0,011	HCN (aq)
SCN-1	99,935	SCN-1
	0,065	FeSCN+
S	100	S
Al+3	0,037	Al(OH)3 (aq)
	61,752	Al(OH)4-
	0,01	AlF2+
	2,202	AlF3 (aq)
	35,999	AlF4-
Ca+2	7,024	Ca+2
	81,299	Ca DOM1
	0,835	CaF+
	0,016	CaCl+
	0,478	CaSO4 (aq)
	0,034	CaHPO4 (aq)
	0,25	CaPO4-
	0,838	CaHCO3+
	9,225	CaCO3 (aq)
Fe+2	51,006	Fe+2
	18,371	Na2Fe(CN)6-2
	0,413	FeCl+
	8,346	FeOH+
	0,036	Fe(OH)2 (aq)
	9,756	FeF+
	0,033	FeCl+
	3,641	FeSO4 (aq)
	0,651	FeSCN+
	2,006	FeHPO4 (aq)
	5,731	FeHCO3+
Mg+2	27,195	Mg+2
	31,477	Mg DOM1
	0,035	MgOH+
	19,025	MgF+
	0,101	MgCl+
	1,512	MgSO4 (aq)
	0,015	MgPO4-
	0,181	MgHPO4 (aq)
	17,078	MgCO3 (aq)
	3,373	MgHCO3+

K+1	98,536	K+1
	0,851	KF (aq)
	0,088	KCl (aq)
	0,503	KSO4-
	0,02	KHPO4-
Na+1	89,767	Na+1
	0,056	Na2Fe(CN)6-2
	1,356	NaF (aq)
	0,088	NaCl (aq)
	0,464	NaSO4-
	0,029	NaHPO4-
	7,022	NaCO3-
	1,215	NaHCO3 (aq)
DOM1	93,407	DOM1
	5,869	Ca DOM1
	0,72	Mg DOM1
Mn+3	100	Mn+3
Fe+3	11,268	Fe(OH)2+
	6,235	Fe(OH)3 (aq)
	82,497	Fe(OH)4-
Mn+2	2,008	Mn+2
	96,754	MnCO3 (aq)
	0,019	MnOH+
	0,585	MnF+
	0,102	MnSO4 (aq)
	0,023	MnSCN+
	0,053	MnHPO4 (aq)
	0,454	MnHCO3+

Index de saturation (2003)

Mineral	log IAP	Sat. Index	Stoichiometry				
Al(OH)3 (am)	11.337	-0.546	1 Al+3	3 H2O	-3 H+1		
Al(OH)3 (Soil)	11.337	2.023	1 Al+3	3 H2O	-3 H+1		
Al2O3	22.678	0.503	2 Al+3	3 H2O	-6 H+1		
Al4(OH)10SO4	23.375	0.675	-10 H+1	4 Al+3	1 SO4-2	10 H2O	
AlOHF2	-10.831	-11.238	1 Al+3	2 F-1	-1 H+1	1 H2O	
AlOHSO4	-10.637	-7.407	-1 H+1	1 Al+3	1 SO4-2	1 H2O	
Alunite	-3.584	-4.233	1 K+1	3 Al+3	2 SO4-2	-6 H+1	6 H2O
Anhydrite	-8.010	-3.721	1 Ca+2	1 SO4-2			
Aragonite	-7.569	0.693	1 Ca+2	1 CO3-2			
Artinite	6.568	-4.206	-2 H+1	2 Mg+2	1 CO3-2	5 H2O	
Birnessite	-8.882	-26.973	-4 H+1	-1 E-1	1 Mn+3	2 H2O	
Bixbyite	-34.152	-34.722	-6 H+1	2 Mn+3	3 H2O		
Boehmite	11.338	1.612	-3 H+1	1 Al+3	2 H2O		
Brucite	14.052	-4.160	1 Mg+2	2 H2O	-2 H+1		
Ca3(PO4)2 (beta)	-29.899	-0.452	3 Ca+2	2 PO4-3			
Ca4H(PO4)3 :3H2O	-51.836	-4.756	4 Ca+2	1 H+1	3 PO4-3	3 H2O	
CaCO3xH2O	-7.571	-0.509	1 Ca+2	1 CO3-2	1 H2O		
CaHPO4	-21.932	-2.355	1 Ca+2	1 H+1	1 PO4-3		
CaHPO4:2H	-21.935	-2.716	1 Ca+2	1 H+1	1 PO4-3	2 H2O	

2O										
Calcite	-7.569	0.833	1 Ca+2	1 CO3-2						
Cryolite	-30.069	4.142	3 Na+1	1 Al+3	6 F-1					
Diaspore	11.338	3.460	-3 H+1	1 Al+3	2 H2O					
Dolomite (disordered)	-15.050	1.038	1 Ca+2	1 Mg+2	2 CO3-2					
Dolomite (ordered)	-15.050	1.655	1 Ca+2	1 Mg+2	2 CO3-2					
Epsomite	-7.931	-5.692	1 Mg+2	1 SO4-2	7 H2O					
Ettringite	40.496	-20.107	6 Ca+2	2 Al+3	3 SO4-2	-12 H+1	38 H2O			
FCO3-Apatite	-90.503	25.505	9.316 Ca+2	.36 Na+1	.144 Mg+2	4.8 PO4-3	1.2 CO3-2	2.48 F-1		
Fe(OH)2 (am)	14.457	0.073	1 Fe+2	2 H2O	-2 H+1					
Fe(OH)2 (c)	14.457	1.567	1 Fe+2	-2 H+1	2 H2O					
Fe(OH)2.7Cl.3	5.558	8.598	-2.7 H+1	1 Fe+3	2.7 H2O	.3 Cl-1				
Fe(OH)3	9.203	12.403	1 Fe+3	3 H2O	-3 H+1					
Fe2(SO4)3	-47.516	-46.143	2 Fe+3	3 SO4-2						
Fe3(Fe(CN)6)2	-145.887	-318.887	3 Fe+2	2 Fe+3	12 CN-1					
Fe3(OH)8	32.862	12.640	-8 H+1	2 Fe+3	1 Fe+2	8 H2O				
Fe4(Fe(CN)6)3	-231.314	-488.314	4 Fe+3	3 Fe+2	18 CN-1					
Ferrihydrite	9.203	5.023	1 Fe+3	3 H2O	-3 H+1					
Ferrihydrite (aged)	9.203	6.513	1 Fe+3	-3 H+1	3 H2O					
Fluorite	-8.204	2.413	1 Ca+2	2 F-1						
Gibbsite (C)	11.337	2.573	1 Al+3	3 H2O	-3 H+1					
Goethite	9.204	8.122	1 Fe+3	2 H2O	-3 H+1					

Gypsum	-8.013	-3.393	1 Ca+2	1 SO4-2	2 H2O		
Halite	-3.781	-5.295	1 Na+1	1 Cl-1			
Hausmannite	19.784	-45.354	3 Mn+2	4 H2O	-8 H+1	-2 E-1	
Hematite	18.409	18.569	2 Fe+3	3 H2O	-6 H+1		
Hercynite	37.137	11.181	-8 H+1	1 Fe+2	2 Al+3	4 H2O	
H-Jarosite	-16.342	-13.131	3 Fe+3	2 SO4-2	-5 H+1	7 H2O	
Huntite	-30.010	-1.094	3 Mg+2	1 Ca+2	4 CO3-2		
Hydromagnesite	-15.875	-9.240	5 Mg+2	4 CO3-2	-2 H+1	6 H2O	
Hydroxyapatite	-37.867	6.466	5 Ca+2	3 PO4-3	1 H2O	-1 H+1	
K-Alum	-26.275	-20.810	1 K+1	1 Al+3	2 SO4-2	12 H2O	
KCl	-5.795	-6.695	1 K+1	1 Cl-1			
KCN (cubic)	-10.953	-12.256	1 CN-1	1 K+1			
K-Jarosite	-9.988	0.019	1 K+1	3 Fe+3	2 SO4-2	-6 H+1	6 H2O
Lepidocrocite	9.204	7.833	-3 H+1	1 Fe+3	2 H2O		
Lime	13.965	-20.627	-2 H+1	1 Ca+2	1 H2O		
Maghemite	18.409	12.023	-6 H+1	2 Fe+3	3 H2O		
Magnesioferrite	32.463	12.881	-8 H+1	1 Mg+2	2 Fe+3	4 H2O	
Magnesite	-7.480	0.175	1 Mg+2	1 CO3-2			
Magnetite	32.868	27.431	-8 H+1	2 Fe+3	1 Fe+2	4 H2O	
Manganite	9.325	-16.015	1 Mn+2	2 H2O	-3 H+1	-1 E-1	
Melanterite	-7.526	-5.117	1 Fe+2	1 SO4-2	7 H2O		
Mg(OH)2 (active)	14.052	-4.742	1 Mg+2	2 H2O	-2 H+1		
Mg2(OH)3Cl: 4H2O	15.952	-10.048	2 Mg+2	1 Cl-1	-3 H+1	7 H2O	
Mg3(PO4)2	-29.632	-6.352	3 Mg+2	2 PO4-3			

MgCO3:5H2O	-7.487	-2.947	1 Mg+2	1 CO3-2	5 H2O		
MgF2	-8.115	-0.084	1 Mg+2	2 F-1			
MgHPO4:3H2O	-21.848	-3.673	1 Mg+2	1 H+1	1 PO4-3	3 H2O	
Mirabilite	-5.256	-3.367	2 Na+1	1 SO4-2	10 H2O		
Mn2(SO4)3	-100.077	-95.960	2 Mn+3	3 SO4-2			
Mn3(PO4)2	-68.398	-44.484	3 Mn+2	2 PO4-3			
Mn3[Fe(CN)6]2	-185.869	-80.469	3 Mn+2	2 Fe+3	12 CN-1		
MnCl2:4H2O	-23.169	-25.990	1 Mn+2	2 Cl-1	4 H2O		
MnCO3 (am)	-20.402	-9.902	1 Mn+2	1 CO3-2			
MnHPO4	-34.765	-9.365	1 Mn+2	1 PO4-3	1 H+1		
MnSO4	-20.843	-24.059	1 Mn+2	1 SO4-2			
NaCN (cubic)	-8.940	-10.531	1 CN-1	1 Na+1			
NaF	-2.718	-2.220	1 Na+1	1 F-1			
Na-Jarosite	-7.974	-3.979	1 Na+1	3 Fe+3	2 SO4-2	-6 H+1	6 H2O
Natron	-4.815	-2.861	2 Na+1	1 CO3-2	10 H2O		
Nesquehonite	-7.484	-3.051	1 Mg+2	1 CO3-2	3 H2O		
Nsutite	-8.882	-26.386	-4 H+1	-1 E-1	1 Mn+3	2 H2O	
Periclase	14.054	-9.006	-2 H+1	1 Mg+2	1 H2O		
Portlandite	13.963	-9.996	1 Ca+2	2 H2O	-2 H+1		
Pyrochroite	1.130	-15.010	1 Mn+2	2 H2O	-2 H+1		
Pyrolusite	17.520	-26.514	1 Mn+2	2 H2O	-4 H+1	-2 E-1	
Rhodochrosite	-20.402	-9.421	1 Mn+2	1 CO3-2			
Siderite	-7.075	3.444	1 Fe+2	1 CO3-2			
Spinel	36.732	-3.902	-8 H+1	1 Mg+2	2 Al+3	4 H2O	

Strengite	-26.694	-0.386	1 Fe+3	1 PO4-3	2 H2O
Thenardite	-5.242	-5.653	2 Na+1	1 SO4-2	
Thermonatrite	-4.803	-5.542	2 Na+1	1 CO3-2	1 H2O
Vaterite	-7.569	0.263	1 Ca+2	1 CO3-2	
Vivianite	-28.427	9.382	3 Fe+2	2 PO4-3	8 H2O

Table des concentrations (2002)

	Concentration	Activity	Log activity
Al DOM1	1,1734E-13	1,1612E-13	-12,935
Al(OH)2+	7,8692E-10	6,0565E-10	-9,218
Al(OH)3 (aq)	2,0453E-07	2,1094E-07	-6,676
Al(OH)4-	0,00030723	0,00023646	-3,626
Al(SO4)2-	8,2553E-19	6,3537E-19	-18,197
Al+3	2,2618E-16	2,1434E-17	-16,669
Al2(OH)2+4	9,1038E-22	1,3802E-23	-22,86
Al2(OH)2CO3+2	6,6346E-13	2,3281E-13	-12,633
Al2PO4+3	1,8855E-22	1,7869E-23	-22,748
Al3(OH)4+5	2,3529E-25	3,3806E-28	-27,471
AlCl+2	7,2876E-20	2,5572E-20	-19,592
AlF+2	1,6036E-11	5,6269E-12	-11,25
AlF2+	7,9644E-08	6,1298E-08	-7,213
AlF3 (aq)	1,9527E-05	2,0139E-05	-4,696
AlF4-	0,00036973	0,00028456	-3,546
AlHPO4+	4,4126E-15	3,3962E-15	-14,469
AlOH+2	6,0428E-13	2,1204E-13	-12,674
AlSCN+2	3,9395E-19	1,3824E-19	-18,859
AlSO4+	5,5598E-17	4,2791E-17	-16,369
Ca DOM1	0,0004461	0,00037728	-3,423
Ca(NO3)2	1,0125E-20	1,0442E-20	-19,981
Ca+2	3,9599E-05	1,3895E-05	-4,857
Ca2Fe(CN)6 (aq)	4,9615E-18	5,1169E-18	-17,291
CaCl+	1,2235E-07	9,4164E-08	-7,026
CaCO3 (aq)	6,7003E-05	6,9102E-05	-4,161
CaF+	5,272E-06	4,0576E-06	-5,392
CaFe(CN)6-	1,3655E-16	1,051E-16	-15,978
CaFe(CN)6-2	3,1077E-14	1,0905E-14	-13,962
CaH2PO4+	1,0067E-11	7,7483E-12	-11,111
CaHCO3+	7,074E-06	5,4445E-06	-5,264
CaHPO4 (aq)	2,4048E-08	2,4801E-08	-7,606
CaNO3+	3,1092E-10	2,393E-10	-9,621
CaOH+	2,5506E-09	1,9631E-09	-8,707
CaPO4-	1,6251E-07	1,2508E-07	-6,903
CaSO4 (aq)	1,0454E-06	1,0782E-06	-5,967
Cl-1	0,0038051	0,0029286	-2,533
CN-1	1,0463E-07	8,0528E-08	-7,094
CO3-2	0,010303	0,0036155	-2,442
DOM1	0,0063058	0,00080965	-3,092
F-1	0,036631	0,028193	-1,55
Fe DOM1	4,5552E-12	4,5078E-12	-11,346
Fe(CN)6-3	1,2299E-13	1,1656E-14	-13,933
Fe(CN)6-4	1,2943E-11	1,9623E-13	-12,707

Fe(OH)2 (aq)	3,3932E-12	3,4995E-12	-11,456
Fe(OH)2+	1,9256E-05	1,4821E-05	-4,829
Fe(OH)3-	3,2987E-13	2,5388E-13	-12,595
Fe(OH)3 (aq)	9,7893E-06	1,0096E-05	-4,996
Fe(OH)4-	0,00013421	0,0001033	-3,986
Fe(SCN)2+	1,0467E-18	8,0561E-19	-18,094
Fe(SCN)3 (aq)	1,0668E-20	1,1002E-20	-19,959
Fe(SO4)2-	8,4915E-20	6,5355E-20	-19,185
Fe+2	5,2729E-09	1,8503E-09	-8,733
Fe+3	2,7766E-17	2,6313E-18	-17,58
Fe2(CN)6 (aq)	6,9272E-29	7,1442E-29	-28,146
Fe2(OH)2+4	1,2575E-18	1,9065E-20	-19,72
Fe3(OH)4+5	2,9946E-19	4,3026E-22	-21,366
Fe3(OH)4+5	8,0732E-20	1,1599E-22	-21,936
FeCl	5,5924E-11	4,3042E-11	-10,366
FeCl+	4,4422E-12	3,4189E-12	-11,466
FeCl+2	4,1373E-19	1,4518E-19	-18,838
FeF+	1,0992E-09	8,4602E-10	-9,073
FeF+2	1,8881E-13	6,6255E-14	-13,179
FeF2+	8,7639E-11	6,7452E-11	-10,171
FeF3 (aq)	1,5806E-09	1,6301E-09	-8,788
FeH2PO4+	2,6535E-14	2,0423E-14	-13,69
FeH2PO4+2	3,1251E-21	1,0966E-21	-20,96
FeHCO3+	8,8737E-10	6,8297E-10	-9,166
FeHPO4 (aq)	2,6225E-11	2,7046E-11	-10,568
FeHPO4+	1,9094E-13	1,4696E-13	-12,833
FeOH+	8,0346E-10	6,1839E-10	-9,209
FeOH+2	1,1211E-10	3,934E-11	-10,405
FeOHSCN+	9,3691E-22	7,2109E-22	-21,142
FeSCN+	1,2035E-10	9,2629E-11	-10,033
FeSCN+2	2,1652E-17	7,5976E-18	-17,119
FeSO4 (aq)	1,4644E-10	1,5102E-10	-9,821
FeSO4+	1,4263E-17	1,0978E-17	-16,959
H DOM1	2,2501E-07	9,6336E-08	-7,016
H+1	4,9397E-10	3,8019E-10	-9,42
H2CO3* (aq)	4,4013E-05	4,5391E-05	-4,343
H2Fe(CN)6-2	3,6654E-25	1,2862E-25	-24,891
H2PO4-	4,1396E-08	3,1861E-08	-7,497
H3PO4	1,4159E-15	1,4603E-15	-14,836
HCN (aq)	1,1775E-07	1,2143E-07	-6,916
HCO3-	0,054042	0,041594	-1,381
HF (aq)	1,1974E-08	1,2349E-08	-7,908
HF2-	1,6556E-09	1,2743E-09	-8,895
HFe(CN)6-3	1,5427E-17	1,462E-18	-17,835
HPO4-2	1,4235E-05	4,9949E-06	-5,301
HSCN (aq)	7,1799E-14	7,4048E-14	-13,13
HSO4-	1,2799E-11	9,851E-12	-11,007

K+1	0,0013885	0,0010687	-2,971
K2Fe(CN)6-2	1,5612E-08	5,4781E-09	-8,261
K2H2Fe(CN)6	1,6339E-24	1,6851E-24	-23,773
K2HPO4 (aq)	5,4222E-11	5,5921E-11	-10,252
K2PO4-	1,0997E-12	8,464E-13	-12,072
K3HFe(CN)6	3,8026E-20	3,9217E-20	-19,407
KCl (aq)	1,651E-06	1,7027E-06	-5,769
KF (aq)	1,3354E-05	1,3772E-05	-4,861
KFe(CN)6-2	9,3841E-16	3,2929E-16	-15,482
KFe(CN)6-3	4,5543E-13	4,316E-14	-13,365
KH2PO4 (aq)	4,5533E-11	4,696E-11	-10,328
KHFe(CN)6-2	1,7242E-12	6,0503E-13	-12,218
KHPO4-	3,8675E-08	2,9766E-08	-7,526
KNO3 (aq)	4,172E-09	4,3027E-09	-8,366
KOH (aq)	1,5118E-08	1,5591E-08	-7,807
KPO4-2	2,4541E-10	8,6114E-11	-10,065
KSO4-	2,9563E-06	2,2753E-06	-5,643
Mg DOM1	4,0014E-05	3,3841E-05	-4,471
Mg+2	0,00003552	1,2464E-05	-4,904
Mg2CO3+2	6,2272E-09	2,1851E-09	-8,661
MgCl+	1,7393E-07	1,3387E-07	-6,873
MgCO3 (aq)	2,9119E-05	3,0031E-05	-4,522
MgF+	2,7776E-05	2,1378E-05	-4,67
MgFe(CN)6-	1,0944E-16	8,423E-17	-16,075
MgFe(CN)6-2	3,5181E-14	1,2345E-14	-13,909
MgHCO3+	6,3955E-06	4,9224E-06	-5,308
MgHPO4 (aq)	2,9776E-08	3,0709E-08	-7,513
MgOH+	4,3557E-08	3,3524E-08	-7,475
MgPO4-	2,2786E-09	1,7537E-09	-8,756
MgSO4 (aq)	7,6502E-07	7,8898E-07	-6,103
Mn(CN)2 (aq)	4,3192E-18	4,4545E-18	-17,351
Mn(NO3)2 (aq)	5,5488E-18	5,7227E-18	-17,242
Mn(OH)4-2	4,0452E-18	1,4194E-18	-17,848
Mn+2	1,6662E-07	5,8466E-08	-7,233
Mn+3	1,1095E-28	1,0514E-29	-28,978
Mn2(OH)3+	1,0266E-10	7,9015E-11	-10,102
Mn2OH+3	2,3903E-15	2,2652E-16	-15,645
MnCl+	2,2246E-10	1,7122E-10	-9,766
MnCl2 (aq)	8,646E-13	8,9169E-13	-12,05
MnCl3-	9,3449E-16	7,1923E-16	-15,143
MnCN+	1,249E-12	9,6128E-13	-12,017
MnCO3 (aq)	1,0272E-05	1,0594E-05	-4,975
MnF+	5,4043E-08	4,1594E-08	-7,381
MnHCO3+	5,5235E-08	4,2512E-08	-7,371
MnHPO4 (aq)	5,5383E-10	5,7118E-10	-9,243
MnNO3+	5,8691E-13	4,5172E-13	-12,345
MnO4-	8,6339E-45	6,6451E-45	-44,177

MnO4-2	1,1995E-38	4,209E-39	-38,376
MnOH+	1,4757E-09	1,1358E-09	-8,945
MnSCN+	3,364E-09	2,5891E-09	-8,587
MnSO4 (aq)	3,3043E-09	3,4078E-09	-8,468
Na+1	0,10993	0,084607	-1,073
Na2Fe(CN)6-2	5,6959E-05	1,9987E-05	-4,699
Na2HPO4 (aq)	2,2454E-07	2,3158E-07	-6,635
Na2PO4-	1,4737E-08	1,1342E-08	-7,945
NaCl (aq)	0,00014189	0,00014633	-3,835
NaCO3-	0,011236	0,0086476	-2,063
NaF (aq)	0,0018934	0,0019527	-2,709
NaFe(CN)6-3	2,5578E-11	2,424E-12	-11,615
NaH2PO4 (aq)	3,6049E-09	3,7178E-09	-8,43
NaHCO3 (aq)	0,0021558	0,0022233	-2,653
NaHFe(CN)6-2	1,2565E-10	4,4089E-11	-10,356
NaHPO4-	4,7423E-06	3,6499E-06	-5,438
NaNO3 (aq)	1,1271E-07	1,1625E-07	-6,935
NaOH (aq)	7,9873E-07	8,2375E-07	-6,084
NaPO4-2	2,243E-08	7,8705E-09	-8,104
NaSO4-	0,0002319	0,00017848	-3,748
NO3-1	6,3339E-06	4,8749E-06	-5,312
OH-	1,0908E-05	8,3951E-06	-5,076
PO4-3	4,2975E-08	4,0726E-09	-8,39
S	0,0018401	0,0018977	-2,722
SCN-1	0,0031858	0,002452	-2,61
SO4-2	0,0011166	0,00039182	-3,407
Zn DOM1	1,1752E-07	9,9387E-08	-7,003
Zn(CN)2 (aq)	1,7454E-12	1,8001E-12	-11,745
Zn(CN)3-	3,9628E-14	3,05E-14	-13,516
Zn(CN)4-2	4,9629E-17	1,7415E-17	-16,759
Zn(CO3)2-2	6,8342E-07	2,3981E-07	-6,62
Zn(NO3)2 (aq)	1,0619E-20	1,0951E-20	-19,961
Zn(OH)2 (aq)	7,8118E-08	8,0565E-08	-7,094
Zn(OH)3-	8,7328E-10	6,7212E-10	-9,173
Zn(OH)4-2	8,0089E-13	2,8103E-13	-12,551
Zn(SCN)2 (aq)	4,4472E-13	4,5865E-13	-12,339
Zn(SCN)3-	1,7903E-15	1,3779E-15	-14,861
Zn(SCN)4-2	4,7124E-18	1,6536E-18	-17,782
Zn(SO4)2-2	7,6655E-13	2,6898E-13	-12,57
Zn+2	2,6203E-09	9,1947E-10	-9,036
Zn2OH+3	6,3557E-18	6,0232E-19	-18,22
ZnCl+	9,032E-12	6,9515E-12	-11,158
ZnCl2 (aq)	1,0381E-14	1,0707E-14	-13,97
ZnCl3-	4,1764E-17	3,2144E-17	-16,493
ZnCl4-2	1,1913E-19	4,1801E-20	-19,379
ZnCO3 (aq)	1,8548E-07	1,913E-07	-6,718
ZnF+	5,3626E-10	4,1274E-10	-9,384

ZnHCO3+	1,1077E-09	8,5252E-10	-9,069
ZnHPO4 (aq)	6,7611E-12	6,9729E-12	-11,157
ZnNO3+	1,6077E-14	1,2374E-14	-13,908
ZnOH+	1,0029E-09	7,7191E-10	-9,112
ZnSCN+	7,054E-11	5,4292E-11	-10,265
ZnSO4 (aq)	6,7296E-11	6,9405E-11	-10,159

Table de distribution des espèces (2002)

Component	% of total component concentration	Species name
NO3-1	98,183	NO3-1
	0,065	KNO3 (aq)
	1,747	NaNO3 (aq)
CO3-2	13,226	CO3-2
	0,013	MnCO3 (aq)
	69,371	HCO3-
	0,056	H2CO3* (aq)
	0,037	MgCO3 (aq)
	0,086	CaCO3 (aq)
	14,423	NaCO3-
	2,767	NaHCO3 (aq)
Fe+3	11,795	Fe(OH)2+
	5,996	Fe(OH)3 (aq)
	82,208	Fe(OH)4-
PO4-3	0,219	PO4-3
	72,682	HPO4-2
	0,211	H2PO4-
	0,012	MgPO4-
	0,152	MgHPO4 (aq)
	0,123	CaHPO4 (aq)
	0,83	CaPO4-
	24,214	NaHPO4-
	0,197	KHPO4-
	1,147	Na2HPO4 (aq)
	0,075	Na2PO4-
	0,018	NaH2PO4 (aq)
	0,115	NaPO4-2
Cl-1	96,358	Cl-1
	0,042	KCl (aq)
	3,593	NaCl (aq)
F-1	91,33	F-1
	0,146	AlF3 (aq)
	3,687	AlF4-
	0,069	MgF+
	0,013	CaF+
	4,721	NaF (aq)
	0,033	KF (aq)
SO4-2	82,512	SO4-2
	0,057	MgSO4 (aq)
	0,077	CaSO4 (aq)
	17,136	NaSO4-
	0,218	KSO4-

SCN-1	100SCN-1
CN-1	0,031CN-1
	99,907Na2Fe(CN)6-2
	0,027K2Fe(CN)6-2
	0,034HCN (aq)
Al+3	0,029Al(OH)3 (aq)
	44,094Al(OH)4-
	0,011AlF2+
	2,802AlF3 (aq)
	53,063AlF4-
Ca+2	6,991Ca+2
	78,76Ca DOM1
	0,931CaF+
	0,022CaCl+
	0,185CaSO4 (aq)
	0,029CaPO4-
	1,249CaHCO3+
	11,83CaCO3 (aq)
Mg+2	25,398Mg+2
	28,612Mg DOM1
	0,031MgOH+
	19,861MgF+
	0,124MgCl+
	0,547MgSO4 (aq)
	0,021MgHPO4 (aq)
	20,821MgCO3 (aq)
	4,573MgHCO3+
S	100S
K+1	98,717K+1
	0,949KF (aq)
	0,117KCl (aq)
	0,21KSO4-
Na+1	87,448Na+1
	0,091Na2Fe(CN)6-2
	1,506NaF (aq)
	0,113NaCl (aq)
	0,184NaSO4-
	8,938NaCO3-
	1,715NaHCO3 (aq)
Mn+3	100Mn+3
Zn+2	0,245Zn+2
	63,821Zn(CO3)2-2
	10,974Zn DOM1
	0,094ZnOH+
	7,295Zn(OH)2 (aq)
	0,082Zn(OH)3-
	0,05ZnF+

	17,321ZnCO3 (aq)
	0,103ZnHCO3+
DOM1	92,838DOM1
	6,568Ca DOM1
	0,589Mg DOM1
Fe+2	99,958Na2Fe(CN)6-2
	0,027K2Fe(CN)6-2
Mn+2	1,578Mn+2
	97,3MnCO3 (aq)
	0,014MnOH+
	0,512MnF+
	0,031MnSO4 (aq)
	0,032MnSCN+
	0,523MnHCO3+

Index de saturation (2002)

Mineral	log IAP	Sat. Index	Stoichiometry				
Al(OH)3 (am)	11.586	-0.203	1Al+3	3H2O	-3H+1		
Al(OH)3 (Soil)	11.586	2.360	1Al+3	3H2O	-3H+1		
Al2O3	23.177	1.221	2Al+3	3H2O	-6H+1		
Al4(OH)10SO4	24.101	1.401	-10H+1	4Al+3	1SO4-2	10H2O	
AlOHF2	-10.350	-10.757	1Al+3	2F-1	-1H+1	1H2O	
AlOHSO4	-10.657	-7.427	-1H+1	1Al+3	1SO4-2	1H2O	
Alunite	-3.282	-3.753	1K+1	3Al+3	2SO4-2	-6H+1	6H2O
Anhydrite	-8.264	-3.968	1Ca+2	1SO4-2			
Aragonite	-7.299	0.970	1Ca+2	1CO3-2			
Artinite	6.581	-4.091	-2H+1	2Mg+2	1CO3-2	5H2O	
Bianchite	-12.454	-10.695	1Zn+2	1SO4-2	6H2O		
Birnessite	13.264	-4.827	-4H+1	-1E-1	1Mn+3	2H2O	
Bixbyite	-1.442	-1.906	-6H+1	2Mn+3	3H2O		
Boehmite	11.588	1.961	-3H+1	1Al+3	2H2O		
Brucite	13.932	-4.184	1Mg+2	2H2O	-2H+1		
Ca3(PO4)2 (beta)	-31.352	-1.951	3Ca+2	2PO4-3			
Ca4H(PO4)3:3H2O	-54.024	-6.944	4Ca+2	1H+1	3PO4-3	3H2O	
CaCO3xH2O	-7.301	-0.232	1Ca+2	1CO3-2	1H2O		
CaHPO4	-22.667	-3.116	1Ca+2	1H+1	1PO4-3		
CaHPO4:2H2O	-22.671	-3.471	1Ca+2	1H+1	1PO4-3	2H2O	
Calcite	-7.299	1.110	1Ca+2	1CO3-2			

Cryolite	-29.186	4.993		3Na+1		1Al+3		6F-1								
Diaspore	11.588	3.797		-3H+1		1Al+3		2H2O								
Dolomite (disordered)	-14.645	1.481		1Ca+2		1Mg+2		2CO3-2								
Dolomite (ordered)	-14.645	2.093		1Ca+2		1Mg+2		2CO3-2								
Epsomite	-8.323	-6.094		1Mg+2		1SO4-2		7H2O								
Ettringite	40.274	-20.003		6Ca+2		2Al+3		3SO4-2		-12H+1		38H2O				
FCO3-Apatite	-93.388	22.481	9.316	Ca+2	.36	Na+1	.144	Mg+2	4.8	PO4-3	1.2	CO3-2	2.48	F-1		
Fe(OH)2 (am)	10.104	-4.202		1Fe+2		2H2O		-2H+1								
Fe(OH)2 (c)	10.104	-2.786		1Fe+2		-2H+1		2H2O								
Fe(OH)2.7Cl.3	7.090	10.130	-2.7	H+1		1Fe+3	2.7	H2O	.3	Cl-1						
Fe(OH)3(s)	10.675	13.875		1Fe+3		3H2O		-3H+1								
Fe2(SO4)3	-45.380	-43.803		2Fe+3		3SO4-2										
Fe3(Fe(CN)6)2(s)	-146.487	-319.487		3Fe+2		2Fe+3		12CN-1								
Fe3(OH)8	31.454	11.232		-8H+1		2Fe+3		1Fe+2		8H2O						
Fe4(Fe(CN)6)3(s)	-224.211	-481.211		4Fe+3		3Fe+2		18CN-1								
Ferrihydrite	10.675	6.580		1Fe+3		3H2O		-3H+1								
Ferrihydrite (aged)	10.675	7.985		1Fe+3		-3H+1		3H2O								
Fluorite	-7.957	2.650		1Ca+2		2F-1										
Gibbsite (C)	11.586	2.910		1Al+3		3H2O		-3H+1								
Goethite	10.677	9.646		1Fe+3		2H2O		-3H+1								
Goslarite	-12.455	-10.317		1Zn+2		1SO4-2		7H2O								
Gypsum	-8.267	-3.649		1Ca+2		1SO4-2		2H2O								

Halite	-3.606	-5.123	1Na+1	1Cl-1			
Hausmannite	62.785	-1.996	3Mn+2	4H2O	-8H+1	-2E-1	
Hematite	21.355	21.624	2Fe+3	3H2O	-6H+1		
Hercynite	33.283	7.593	-8H+1	1Fe+2	2Al+3	4H2O	
H-Jarosite	-12.465	-9.064	3Fe+3	2SO4-2	-5H+1	7H2O	
Huntite	-29.338	-0.330	3Mg+2	1Ca+2	4CO3-2		
Hydromagnesite	-15.459	-8.640	5Mg+2	4CO3-2	-2H+1	6H2O	
Hydroxyapatite	-40.038	4.295	5Ca+2	3PO4-3	1H2O	-1H+1	
Hydrozincite	6.444	-4.363	5Zn+2	2CO3-2	-6H+1	6H2O	
K-Alum	-26.474	-21.035	1K+1	1Al+3	2SO4-2	12H2O	
KCl	-5.504	-6.404	1K+1	1Cl-1			
KCN (cubic)	-10.065	-11.378	1CN-1	1K+1			
K-Jarosite	-6.015	4.078	1K+1	3Fe+3	2SO4-2	-6H+1	6H2O
Lepidocrocite	10.677	9.306	-3H+1	1Fe+3	2H2O		
Lime	13.981	-20.446	-2H+1	1Ca+2	1H2O		
Maghemite	21.355	14.969	-6H+1	2Fe+3	3H2O		
Magnesioferrite	35.289	15.944	-8H+1	1Mg+2	2Fe+3	4H2O	
Magnesite	-7.346	0.292	1Mg+2	1CO3-2			
Magnetite	31.461	26.200	-8H+1	2Fe+3	1Fe+2	4H2O	
Manganite	25.589	0.249	1Mn+2	2H2O	-3H+1	-1E-1	
Melanterite	-12.152	-9.760	1Fe+2	1SO4-2	7H2O		
Mg(OH)2 (active)	13.932	-4.862	1Mg+2	2H2O	-2H+1		
Mg2(OH)3Cl:4H2O	15.906	-10.094	2Mg+2	1Cl-1	-3H+1	7H2O	

Mg3(PO4)2	-31.493	-8.213	3Mg+2	2PO4-3			
MgCO3:5H2O	-7.355	-2.815	1Mg+2	1CO3-2	5H2O		
MgF2	-8.004	0.035	1Mg+2	2F-1			
MgHPO4:3H2O	-22.720	-4.545	1Mg+2	1H+1	1PO4-3	3H2O	
Mirabilite	-5.569	-3.747	2Na+1	1SO4-2	10H2O		
Mn2(SO4)3	-68.177	-63.922	2Mn+3	3SO4-2			
Mn3(PO4)2	-38.480	-14.574	3Mn+2	2PO4-3			
Mn3[Fe(CN)6]2	-141.988	-36.588	3Mn+2	2Fe+3	12CN-1		
MnCl2:4H2O	-12.307	-15.118	1Mn+2	2Cl-1	4H2O		
MnCO3(am)	-9.675	0.825	1Mn+2	1CO3-2			
MnHPO4	-25.043	0.357	1Mn+2	1PO4-3	1H+1		
MnSO4	-10.640	-13.801	1Mn+2	1SO4-2			
NaCN(cubic)	-8.167	-9.759	1CN-1	1Na+1			
NaF	-2.622	-2.125	1Na+1	1F-1			
Na-Jarosite	-4.116	-0.006	1Na+1	3Fe+3	2SO4-2	-6H+1	6H2O
Natron	-4.604	-2.706	2Na+1	1CO3-2	10H2O		
Nesquehonite	-7.351	-2.897	1Mg+2	1CO3-2	3H2O		
Nsutite	13.264	-4.240	-4H+1	-1E-1	1Mn+3	2H2O	
Periclase	13.934	-8.998	-2H+1	1Mg+2	1H2O		
Portlandite	13.979	-9.871	1Ca+2	2H2O	-2H+1		
Pyrochroite	11.604	-4.455	1Mn+2	2H2O	-2H+1		
Pyrolusite	39.574	-4.229	1Mn+2	2H2O	-4H+1	-2E-1	
Rhodochrosite	-9.675	1.308	1Mn+2	1CO3-2			
Siderite	-11.175	-0.650	1Fe+2	1CO3-2			

Smithsonite	-11.478	-0.612	1Zn+2	1CO3-2		
Spinel	37.111	-3.194	-8H+1	1Mg+2	2Al+3	4H2O
Strengite	-25.973	0.343	1Fe+3	1PO4-3	2H2O	
Thenardite	-5.552	-5.955	2Na+1	1SO4-2		
Thermonatrite	-4.589	-5.319	2Na+1	1CO3-2	1H2O	
Vaterite	-7.299	0.540	1Ca+2	1CO3-2		
Vivianite	-42.992	-5.187	3Fe+2	2PO4-3	8H2O	
Zincite	9.802	-2.227	1Zn+2	1H2O	-2H+1	
Zincosite	-12.443	-17.109	1Zn+2	1SO4-2		
Zn metal	-18.167	-45.323	1Zn+2	2E-1		
Zn(NO3)2:6H2O	-19.671	-22.767	1Zn+2	2NO3-1	6H2O	
Zn(OH)2 (am)	9.800	-3.437	1Zn+2	2H2O	-2H+1	
Zn(OH)2 (beta)	9.800	-2.695	1Zn+2	2H2O	-2H+1	
Zn(OH)2 (delta)	9.800	-2.044	1Zn+2	-2H+1	2H2O	
Zn(OH)2 (epsilon)	9.800	-2.434	1Zn+2	2H2O	-2H+1	
Zn(OH)2 (gamma)	9.800	-2.663	1Zn+2	2H2O	-2H+1	
Zn2(OH)2SO4	-2.643	-10.143	-2H+1	2Zn+2	2H2O	1SO4-2
Zn2(OH)3Cl	7.649	-7.542	2Zn+2	3H2O	-3H+1	1Cl-1
Zn2Fe(CN)6	-69.370	-18.290	2Zn+2	1Fe+2	6CN-1	
Zn3(PO4)2:4H2O	-43.896	-8.476	3Zn+2	2PO4-3	4H2O	
Zn3O(SO4)2	-15.085	-36.298	-2H+1	3Zn+2	2SO4-2	1H2O

Zn4(OH)6SO4	16.957	-11.443	-6H+1	4Zn+2		6H2O	1SO4-2	
Zn5(OH)8Cl2	25.097	-13.403	-8H+1	5Zn+2		8H2O	2Cl-1	
Zn-Al LDH	20.547	0.717	2Zn+2	1Al+3	.5	CO3-2	-6H+1	6H2O
ZnCl2	-14.103	-21.799	1Zn+2	2Cl-1				
ZnCO3	-11.478	-0.678	1Zn+2	1CO3-2				
ZnCO3:1H2O	-11.480	-1.220	1Zn+2	1CO3-2		1H2O		
ZnF2	-12.136	-12.134	1Zn+2	2F-1				
ZnSO4:1H2O	-12.445	-12.200	1Zn+2	1SO4-2		1H2O		

ANNEXE II

Fichiers VMINTEQ pour PN3B

Table des concentrations (2003)

	Concentration	Activity	Log activity
Al DOM1	8,4703E-14	8,4298E-14	-13,074
Al(OH)2+	8,2099E-10	7,2824E-10	-9,138
Al(OH)3 (aq)	8,3572E-08	8,3856E-08	-7,076
Al(OH)4-	2,8767E-05	2,5517E-05	-4,593
Al(SO4)2-	1,2318E-18	1,0926E-18	-17,962
Al+3	6,5167E-16	2,2152E-16	-15,655
Al2(OH)2+4	9,5572E-22	1,4036E-22	-21,853
Al2(OH)2CO3+2	8,9322E-14	5,5296E-14	-13,257
Al2PO4+3	1,8746E-21	6,3723E-22	-21,196
Al3(OH)4+5	6,5253E-26	3,2578E-27	-26,487
AlCl+2	2,3567E-19	1,4589E-19	-18,836
AlF+2	2,1853E-11	1,3528E-11	-10,869
AlF2+	3,8504E-08	3,4154E-08	-7,467
AlF3 (aq)	2,556E-06	2,5647E-06	-5,591
AlF4-	9,3228E-06	8,2695E-06	-5,083
AlHPO4+	5,0228E-14	4,4553E-14	-13,351
AlOH+2	1,1414E-12	7,0658E-13	-12,151
AlSO4+	2,0592E-16	1,8266E-16	-15,738
Ca DOM1	1,7812E-05	1,6497E-05	-4,783
Ca+2	1,3972E-05	8,6496E-06	-5,063
Ca2Fe(CN)6 (aq)	2,5465E-19	2,5551E-19	-18,593
CaCl+	3,7094E-08	3,2903E-08	-7,483
CaCO3 (aq)	1,3977E-06	1,4025E-06	-5,853
CaF+	6,8899E-07	6,1115E-07	-6,214
CaFe(CN)6-	5,701E-20	5,0569E-20	-19,296
CaFe(CN)6-2	1,4321E-15	8,8657E-16	-15,052
CaH2PO4+	2,559E-11	2,2699E-11	-10,644
CaHCO3+	4,6188E-07	4,0969E-07	-6,388
CaHPO4 (aq)	1,9287E-08	1,9352E-08	-7,713
CaOH+	4,7556E-10	4,2183E-10	-9,375
CaPO4-	3,0941E-08	2,7445E-08	-7,562
CaSO4 (aq)	2,5987E-07	2,6076E-07	-6,584
Cl-1	0,0018225	0,0016166	-2,791
CN-1	2,609E-08	2,3142E-08	-7,636
CO3-2	0,00018642	0,00011541	-3,938
DOM1	0,00020125	7,8619E-05	-4,104
F-1	0,0072528	0,0064334	-2,192
Fe DOM1	1,4763E-12	1,4693E-12	-11,833
Fe(CN)6-3	2,6283E-17	8,9345E-18	-17,049
Fe(CN)6-4	1,6665E-13	2,4476E-14	-13,611
Fe(OH)2 (aq)	3,9737E-10	3,9872E-10	-9,399

Fe(OH)2+	6,3244E-06	5,6099E-06	-5,251
Fe(OH)3-	8,8562E-12	7,8556E-12	-11,105
Fe(OH)3 (aq)	1,1766E-06	1,1806E-06	-5,928
Fe(OH)4-	5,0138E-06	4,4474E-06	-5,352
Fe(SO4)2-	5,2698E-20	4,6744E-20	-19,33
Fe+2	2,9625E-06	1,834E-06	-5,737
Fe+3	3,5918E-17	1,221E-17	-16,913
Fe2(CN)6 (aq)	3,4666E-31	3,4784E-31	-30,459
Fe2(OH)2+4	2,4659E-19	3,6216E-20	-19,441
Fe3(OH)4+5	1,4803E-21	7,3904E-23	-22,131
Fe3(OH)4+5	4,1786E-21	2,0862E-22	-21,681
FeCl+	2,109E-09	1,8707E-09	-8,728
FeCl+	2,655E-08	2,3551E-08	-7,628
FeCl+2	6,6141E-19	4,0945E-19	-18,388
FeF+	2,1572E-07	1,9135E-07	-6,718
FeF+2	1,1817E-13	7,3152E-14	-13,136
FeF2+	1,9728E-11	1,7499E-11	-10,757
FeF3 (aq)	1,0113E-10	1,0147E-10	-9,994
FeH2PO4+	1,1013E-10	9,7689E-11	-10,01
FeH2PO4+2	3,9667E-20	2,4556E-20	-19,61
FeHCO3+	9,2616E-08	8,2152E-08	-7,085
FeHPO4 (aq)	3,3913E-08	3,4029E-08	-7,468
FeHPO4+	8,587E-13	7,6168E-13	-12,118
FeOH+	2,3039E-07	2,0436E-07	-6,69
FeOH+2	8,6452E-11	5,3519E-11	-10,271
FeSO4 (aq)	5,818E-08	5,8378E-08	-7,234
FeSO4+	1,5173E-17	1,3459E-17	-16,871
H DOM1	3,794E-08	2,5727E-08	-7,59
H+1	1,6295E-09	1,4454E-09	-8,84
H2CO3* (aq)	1,8192E-05	1,8253E-05	-4,739
H2Fe(CN)6-2	3,841E-25	2,3778E-25	-24,624
H2PO4-	1,6076E-07	1,426E-07	-6,846
H3PO4	2,5553E-14	2,564E-14	-13,591
HCN (aq)	1,1017E-07	1,1055E-07	-6,956
HCO3-	0,0052617	0,0046672	-2,331
HF (aq)	1,1289E-08	1,1327E-08	-7,946
HF2-	3,0588E-10	2,7132E-10	-9,567
HFe(CN)6-3	2,0566E-18	6,9911E-19	-18,155
HPO4-2	9,6184E-06	5,9544E-06	-5,225
HSO4-	1,7162E-11	1,5223E-11	-10,818
K+1	0,00010186	9,0355E-05	-4,044
K2Fe(CN)6-2	3,5316E-11	2,1863E-11	-10,66
K2H2Fe(CN)6	9,6879E-26	9,7209E-26	-25,012
K2HPO4 (aq)	5,0569E-13	5,0741E-13	-12,295

K2PO4-	2,2773E-15	2,02E-15	-14,695
K3HFe(CN)6	5,014E-23	5,031E-23	-22,298
KCl (aq)	7,7886E-08	7,815E-08	-7,107
KF (aq)	2,648E-07	2,657E-07	-6,576
KFe(CN)6-2	3,4762E-20	2,152E-20	-19,667
KFe(CN)6-3	1,3621E-15	4,6303E-16	-15,334
KH2PO4 (aq)	1,9096E-11	1,916E-11	-10,718
KHFe(CN)6-2	1,754E-13	1,0858E-13	-12,964
KHPO4-	3,6014E-09	3,1945E-09	-8,496
KOH (aq)	4,3801E-10	4,395E-10	-9,357
KPO4-2	4,1812E-12	2,5884E-12	-11,587
KSO4-	8,634E-08	7,6585E-08	-7,116
Mg DOM1	2,7621E-06	2,5581E-06	-5,592
Mg+2	2,1666E-05	1,3413E-05	-4,872
Mg2CO3+2	1,3048E-10	8,0773E-11	-10,093
MgCl+	9,1165E-08	8,0865E-08	-7,092
MgCO3 (aq)	1,0737E-06	1,0774E-06	-5,968
MgF+	6,2493E-06	5,5432E-06	-5,256
MgFe(CN)6-	7,9319E-20	7,0358E-20	-19,153
MgFe(CN)6-2	2,8146E-15	1,7424E-15	-14,759
MgHCO3+	6,7963E-07	6,0284E-07	-6,22
MgHPO4 (aq)	4,1283E-08	4,1424E-08	-7,383
MgOH+	1,4023E-08	1,2439E-08	-7,905
MgPO4-	7,4999E-10	6,6526E-10	-9,177
MgSO4 (aq)	3,2697E-07	3,2808E-07	-6,484
Mn(CN)2 (aq)	1,6265E-28	1,632E-28	-27,787
Mn(OH)4-2	4,9366E-30	3,0561E-30	-29,515
Mn+2	4,1898E-17	2,5937E-17	-16,586
Mn+3	8,4364E-41	2,8678E-41	-40,542
Mn2(OH)3+	3,2236E-31	2,8594E-31	-30,544
Mn2OH+3	3,4615E-35	1,1767E-35	-34,929
MnCl+	4,7272E-20	4,1931E-20	-19,377
MnCl2 (aq)	1,2014E-22	1,2054E-22	-21,919
MnCl3-	6,051E-26	5,3674E-26	-25,27
MnCN+	1,3816E-22	1,2255E-22	-21,912
MnCO3 (aq)	1,4951E-16	1,5002E-16	-15,824
MnF+	4,9707E-18	4,4091E-18	-17,356
MnHCO3+	2,4683E-18	2,1894E-18	-17,66
MnHPO4 (aq)	3,2056E-19	3,2165E-19	-18,493
MnO4-	2,2237E-69	1,9725E-69	-68,705
MnO4-2	3,2308E-61	2,0001E-61	-60,699
MnOH+	1,9259E-19	1,7083E-19	-18,767
MnSO4 (aq)	5,8931E-19	5,9131E-19	-18,228
Na+1	0,013022	0,011551	-1,937

Na2Fe(CN)6-2	3,3596E-07	2,0798E-07	-6,682
Na2HPO4 (aq)	5,4601E-09	5,4786E-09	-8,261
Na2PO4-	7,9568E-11	7,0578E-11	-10,151
NaCl (aq)	1,0629E-05	1,0665E-05	-4,972
NaCO3-	3,9015E-05	3,4607E-05	-4,461
NaF (aq)	6,3749E-05	6,3965E-05	-4,194
NaFe(CN)6-3	1,2347E-13	4,1973E-14	-13,377
NaH2PO4 (aq)	2,4411E-09	2,4494E-09	-8,611
NaHCO3 (aq)	3,2605E-05	3,2716E-05	-4,485
NaHFe(CN)6-2	2,0639E-11	1,2776E-11	-10,894
NaHPO4-	7,1307E-07	6,3251E-07	-6,199
NaOH (aq)	3,7999E-08	3,8128E-08	-7,419
NaPO4-2	5,9923E-10	3,7096E-10	-9,431
NaSO4-	1,0403E-05	9,228E-06	-5,035
OH-	3,1555E-06	2,799E-06	-5,553
PO4-3	4E-09	1,3597E-09	-8,867
S	9,3563E-05	9,3881E-05	-4,027
SO4-2	0,0002387	0,00014777	-3,83

Table de distribution des espèces (2003)

Component	% of total component concentration	Species name
Na+1	98,802	Na+1
	0,484	NaF (aq)
	0,081	NaCl (aq)
	0,079	NaSO4-
	0,296	NaCO3-
	0,247	NaHCO3 (aq)
DOM1	90,709	DOM1
	0,017	H DOM1
	8,028	Ca DOM1
	1,245	Mg DOM1
K+1	99,577	K+1
	0,259	KF (aq)
	0,076	KCl (aq)
	0,084	KSO4-
Mn+3	100	Mn+3
Fe+2	74,839	Fe+2
	8,487	Na2Fe(CN)6-2
	0,671	FeCl+
	5,82	FeOH+
	0,01	Fe(OH)2 (aq)
	5,45	FeF+
	0,053	FeCl+
	1,47	FeSO4 (aq)
	0,857	FeHPO4 (aq)
	2,34	FeHCO3+
Mg+2	65,844	Mg+2
	8,394	Mg DOM1
	0,043	MgOH+
	18,992	MgF+
	0,277	MgCl+
	0,994	MgSO4 (aq)
	0,125	MgHPO4 (aq)
	3,263	MgCO3 (aq)
	2,065	MgHCO3+
CO3-2	3,364	CO3-2
	94,948	HCO3-
	0,328	H2CO3* (aq)

	0,019	MgCO3 (aq)
	0,012	MgHCO3+
	0,025	CaCO3 (aq)
	0,704	NaCO3-
	0,588	NaHCO3 (aq)
Cl-1	99,407	Cl-1
	0,58	NaCl (aq)
F-1	98,423	F-1
	0,104	AlF3 (aq)
	0,506	AlF4-
	0,085	MgF+
	0,865	NaF (aq)
SO4-2	95,543	SO4-2
	0,023	FeSO4 (aq)
	0,131	MgSO4 (aq)
	0,104	CaSO4 (aq)
	4,164	NaSO4-
	0,035	KSO4-
PO4-3	0,038	PO4-3
	90,443	HPO4-2
	1,512	H2PO4-
	0,319	FeHPO4 (aq)
	0,388	MgHPO4 (aq)
	0,181	CaHPO4 (aq)
	0,291	CaPO4-
	6,705	NaHPO4-
	0,034	KHPO4-
	0,051	Na2HPO4 (aq)
	0,023	NaH2PO4 (aq)
CN-1	1,212	CN-1
	93,654	Na2Fe(CN)6-2
	5,119	HCN (aq)
S	100	S
Al+3	0,205	Al(OH)3 (aq)
	70,561	Al(OH)4-
	0,094	AlF2+
	6,27	AlF3 (aq)
	22,868	AlF4-
Ca+2	40,288	Ca+2
	51,361	Ca DOM1
	1,987	CaF+
	0,107	CaCl+
	0,749	CaSO4 (aq)
	0,056	CaHPO4 (aq)

	0,089	CaPO4-
	1,332	CaHCO3+
	4,03	CaCO3 (aq)
Mn+2	20,949	Mn+2
	74,757	MnCO3 (aq)
	0,096	MnOH+
	2,485	MnF+
	0,024	MnCl+
	0,295	MnSO4 (aq)
	0,16	MnHPO4 (aq)
	1,234	MnHCO3+
Fe+3	50,535	Fe(OH)2+
	9,402	Fe(OH)3 (aq)
	40,062	Fe(OH)4-

Index de saturation (2003)

Mineral	log IAP	Sat. Index					
Al(OH)3 (am)	10.865	-0.722	1 Al+3	3 H2O	-3 H+1		
Al(OH)3 (Soil)	10.865	1.830	1 Al+3	3 H2O	-3 H+1		
Al2O3	21.730	0.244	2 Al+3	3 H2O	-6 H+1		
Al4(OH)10 SO4	21.949	-0.751	-10 H+1	4 Al+3	1 SO4-2	10 H2O	
AlOHF2	-11.198	-11.605	1 Al+3	2 F-1	-1 H+1	1 H2O	
AlOHSO4	-10.645	-7.415	-1 H+1	1 Al+3	1 SO4-2	1 H2O	
Alunite	-5.630	-5.719	1 K+1	3 Al+3	2 SO4-2	-6 H+1	6 H2O
Anhydrite	-8.893	-4.585	1 Ca+2	1 SO4-2			
Aragonite	-9.001	-0.717	1 Ca+2	1 CO3-2			
Artinite	3.996	-6.457	-2 H+1	2 Mg+2	1 CO3-2	5 H2O	
Birnessite	-3.025	-21.116	-4 H+1	-1 E-1	1 Mn+3	2 H2O	
Bixbyite	-28.045	-28.284	-6 H+1	2 Mn+3	3 H2O		
Boehmite	10.865	1.452	-3 H+1	1 Al+3	2 H2O		
Brucite	12.807	-5.101	1 Mg+2	2 H2O	-2 H+1		
Ca3(PO4) 2 (beta)	-32.922	-3.619	3 Ca+2	2 PO4-3			
Ca4H(PO4)3:3H2O	-55.692	-8.612	4 Ca+2	1 H+1	3 PO4-3	3 H2O	
CaCO3xH 2O	-9.001	-1.918	1 Ca+2	1 CO3-2	1 H2O		
CaHPO4	-22.770	-3.275	1 Ca+2	1 H+1	1 PO4-3		
CaHPO4:2 H2O	-22.770	-3.612	1 Ca+2	1 H+1	1 PO4-3	2 H2O	
Calcite	-9.001	-0.577	1 Ca+2	1 CO3-2			

Cryolite	-34.616	-0.507	3 Na+1		1 Al+3		6 F-1								
Diaspore	10.865	3.261	-3 H+1		1 Al+3		2 H2O								
Dolomite (disordered)	-17.811	-1.600	1 Ca+2		1 Mg+2		2 CO3-2								
Dolomite (ordered)	-17.811	-1.001	1 Ca+2		1 Mg+2		2 CO3-2								
Epsomite	-8.704	-6.496	1 Mg+2		1 SO4-2		7 H2O								
Ettringite	32.894	-26.683	6 Ca+2		2 Al+3		3 SO4-2	-12 H+1		38 H2O					
FCO3-Apatite	-101.286	14.283	9.316 Ca+2	.36	Na+1	.144	Mg+2	4.8	PO4-3	1.2	CO3-2	2.48	F-1		
Fe(OH)2 (am)	11.943	-2.197	1 Fe+2		2 H2O		-2 H+1								
Fe(OH)2 (c)	11.943	-0.947	1 Fe+2		-2 H+1		2 H2O								
Fe(OH)2.7 Cl.3	6.117	9.157	-2.7 H+1		1 Fe+3	2.7	H2O	.3	Cl-1						
Fe(OH)3	9.606	12.806	1 Fe+3		3 H2O		-3 H+1								
Fe2(SO4)3	-45.318	-43.300	2 Fe+3		3 SO4-2										
Fe3(Fe(CN)6)2	-142.664	-315.664	3 Fe+2		2 Fe+3		12 CN-1								
Fe3(OH)8	31.155	10.933	-8 H+1		2 Fe+3		1 Fe+2		8 H2O						
Fe4(Fe(CN)6)3	-222.304	-479.304	4 Fe+3		3 Fe+2		18 CN-1								
Ferrihydrite	9.606	5.694	1 Fe+3		3 H2O		-3 H+1								
Ferrihydrite (aged)	9.606	6.916	1 Fe+3		-3 H+1		3 H2O								
Fluorite	-9.446	1.139	1 Ca+2		2 F-1										
Gibbsite (C)	10.865	2.380	1 Al+3		3 H2O		-3 H+1								
Goethite	9.606	8.686	1 Fe+3		2 H2O		-3 H+1								

Gypsum	-8.894	-4.277	1 Ca+2	1 SO4-2	2 H2O		
Halite	-4.729	-6.253	1 Na+1	1 Cl-1			
Hausmannite	25.277	-38.738	3 Mn+2	4 H2O	-8 H+1	-2 E-1	
Hematite	19.213	19.716	2 Fe+3	3 H2O	-6 H+1		
Hercynite	33.673	8.554	-8 H+1	1 Fe+2	2 Al+3	4 H2O	
H-Jarosite	-14.202	-10.395	3 Fe+3	2 SO4-2	-5 H+1	7 H2O	
Huntite	-35.432	-6.228	3 Mg+2	1 Ca+2	4 CO3-2		
Hydromagnesite	-22.435	-15.218	5 Mg+2	4 CO3-2	-2 H+1	6 H2O	
Hydroxyapatite	-43.075	1.258	5 Ca+2	3 PO4-3	1 H2O	-1 H+1	
K-Alum	-27.362	-21.978	1 K+1	1 Al+3	2 SO4-2	12 H2O	
KCl	-6.835	-7.735	1 K+1	1 Cl-1			
KCN (cubic)	-11.680	-13.014	1 CN-1	1 K+1			
K-Jarosite	-9.406	0.872	1 K+1	3 Fe+3	2 SO4-2	-6 H+1	6 H2O
Lepidocrocite	9.606	8.235	-3 H+1	1 Fe+3	2 H2O		
Lime	12.617	-21.458	-2 H+1	1 Ca+2	1 H2O		
Maghemite	19.213	12.827	-6 H+1	2 Fe+3	3 H2O		
Magnesioferrite	32.020	13.182	-8 H+1	1 Mg+2	2 Fe+3	4 H2O	
Magnesite	-8.810	-1.208	1 Mg+2	1 CO3-2			
Magnetite	31.156	26.274	-8 H+1	2 Fe+3	1 Fe+2	4 H2O	
Manganite	12.092	-13.248	1 Mn+2	2 H2O	-3 H+1	-1 E-1	
Melanterite	-9.568	-7.214	1 Fe+2	1 SO4-2	7 H2O		
Mg(OH)2 (active)	12.807	-5.987	1 Mg+2	2 H2O	-2 H+1		
Mg2(OH)3Cl:4H2O	13.982	-12.018	2 Mg+2	1 Cl-1	-3 H+1	7 H2O	

Mg3(PO4)2	-32.351	-9.071	3 Mg+2	2 PO4-3			
MgCO3:5H2O	-8.811	-4.271	1 Mg+2	1 CO3-2	5 H2O		
MgF2	-9.256	-1.202	1 Mg+2	2 F-1			
MgHPO4:3H2O	-22.580	-4.405	1 Mg+2	1 H+1	1 PO4-3	3 H2O	
Mirabilite	-7.707	-6.030	2 Na+1	1 SO4-2	10 H2O		
Mn2(SO4)3	-92.576	-88.024	2 Mn+3	3 SO4-2			
Mn3(PO4)2	-67.491	-43.601	3 Mn+2	2 PO4-3			
Mn3[Fe(CN)6]2	-175.212	-69.812	3 Mn+2	2 Fe+3	12 CN-1		
MnCl2:4H2O	-22.170	-24.962	1 Mn+2	2 Cl-1	4 H2O		
MnCO3(am)	-20.524	-10.024	1 Mn+2	1 CO3-2			
MnHPO4	-34.293	-8.893	1 Mn+2	1 PO4-3	1 H+1		
MnSO4	-20.416	-23.459	1 Mn+2	1 SO4-2			
NaCN(cubic)	-9.573	-11.167	1 CN-1	1 Na+1			
NaF	-4.129	-3.633	1 Na+1	1 F-1			
Na-Jarosite	-7.299	-2.942	1 Na+1	3 Fe+3	2 SO4-2	-6 H+1	6 H2O
Natron	-7.814	-6.036	2 Na+1	1 CO3-2	10 H2O		
Nesquehonite	-8.811	-4.313	1 Mg+2	1 CO3-2	3 H2O		
Nsutite	-3.025	-20.529	-4 H+1	-1 E-1	1 Mn+3	2 H2O	
Periclase	12.807	-9.849	-2 H+1	1 Mg+2	1 H2O		
Portlandite	12.617	-11.000	1 Ca+2	2 H2O	-2 H+1		

Pyrochroite	1.094	-14.788	1 Mn+2	2 H2O	-2 H+1	
Pyrolusite	23.090	-20.219	1 Mn+2	2 H2O	-4 H+1	-2 E-1
Rhodochrosite	-20.524	-9.537	1 Mn+2	1 CO3-2		
Siderite	-9.674	0.864	1 Fe+2	1 CO3-2		
Spinel	34.538	-5.062	-8 H+1	1 Mg+2	2 Al+3	4 H2O
Strengite	-25.780	0.553	1 Fe+3	1 PO4-3	2 H2O	
Thenardite	-7.705	-8.092	2 Na+1	1 SO4-2		
Thermonatrite	-7.813	-8.524	2 Na+1	1 CO3-2	1 H2O	
Vaterite	-9.001	-1.147	1 Ca+2	1 CO3-2		
Vivianite	-34.944	2.851	3 Fe+2	2 PO4-3	8 H2O	

Table des concentrations (2002)

	Concentration	Activity	Log activity
Al(OH)2+	7,7393E-10	6,8927E-10	-9,162
Al(OH)3 (aq)	5,9502E-08	5,9689E-08	-7,224
Al(OH)4-	1,5454E-05	1,3763E-05	-4,861
Al(SO4)2-	8,2657E-19	7,3615E-19	-18,133
Al+3	1,0541E-15	3,7161E-16	-15,43
Al2(OH)2+4	1,4334E-21	2,2459E-22	-21,649
Al2(OH)2CO3+2	8,9618E-14	5,6383E-14	-13,249
Al2PO4+3	3,5479E-21	1,2507E-21	-20,903
Al3(OH)4+5	9,0146E-26	4,9791E-27	-26,303
AlCl+2	3,8469E-19	2,4203E-19	-18,616
AlF+2	3,681E-11	2,3159E-11	-10,635
AlF2+	6,7004E-08	5,9675E-08	-7,224
AlF3 (aq)	4,5618E-06	4,5761E-06	-5,34
AlF4-	1,6919E-05	1,5069E-05	-4,822
AlHPO4+	7,7159E-14	6,8719E-14	-13,163
AlOH+2	1,4182E-12	8,9227E-13	-12,05
AlSCN+2	1,3836E-31	8,7051E-32	-31,06
AlSO4+	2,1797E-16	1,9412E-16	-15,712
Ca(NO3)2	6,5818E-21	6,6024E-21	-20,18
Ca+2	3,8495E-05	2,4219E-05	-4,616
Ca2Fe(CN)6 (aq)	2,6922E-17	2,7007E-17	-16,569
CaCl+	1,0224E-07	9,1052E-08	-7,041
CaCO3 (aq)	2,4625E-06	2,4702E-06	-5,607
CaF+	1,9579E-06	1,7437E-06	-5,759
CaFe(CN)6-	1,2697E-16	1,1308E-16	-15,947
CaFe(CN)6-2	5,3166E-14	3,3449E-14	-13,476
CaH2PO4+	8,6583E-11	7,7112E-11	-10,113
CaHCO3+	1,0694E-06	9,5239E-07	-6,021
CaHPO4 (aq)	4,9691E-08	4,9847E-08	-7,302
CaNO3+	2,7601E-10	2,4581E-10	-9,609
CaOH+	9,9573E-10	8,8681E-10	-9,052
CaPO4-	6,0058E-08	5,3488E-08	-7,272
CaSO4 (aq)	4,6209E-07	4,6354E-07	-6,334
Cl-1	0,0017951	0,0015987	-2,796
CN-1	7,1959E-08	6,4087E-08	-7,193
CO3-2	0,0001155	7,2666E-05	-4,139
F-1	0,0073771	0,0065701	-2,182
Fe(CN)6-3	2,0246E-14	7,1374E-15	-14,146
Fe(CN)6-4	2,1086E-12	3,3038E-13	-12,481
Fe(OH)2 (aq)	6,338E-12	6,3579E-12	-11,197
Fe(OH)2+	6,0869E-06	5,421E-06	-5,266
Fe(OH)3-	1,0658E-13	9,492E-14	-13,023
Fe(OH)3 (aq)	8,5754E-07	8,6023E-07	-6,065

Fe(OH)4-	2,725E-06	2,4269E-06	-5,615
Fe(SCN)2+	8,9141E-45	7,939E-45	-44,1
Fe(SCN)3 (aq)	3,7256E-60	3,7373E-60	-59,427
Fe(SO4)2-	3,5711E-20	3,1805E-20	-19,498
Fe+2	8,2344E-08	5,1807E-08	-7,286
Fe+3	5,8513E-17	2,0628E-17	-16,686
Fe2(CN)6 (aq)	4,6236E-28	4,6381E-28	-27,334
Fe2(OH)2+4	3,7623E-19	5,8947E-20	-19,23
Fe3(OH)4+5	2,1143E-21	1,1678E-22	-21,933
Fe3(OH)4+5	6,0315E-21	3,3314E-22	-21,477
FeCl	7,3871E-10	6,579E-10	-9,182
FeCl+	5,8678E-11	5,2259E-11	-10,282
FeCl+2	1,0833E-18	6,8155E-19	-18,166
FeF+	6,1983E-09	5,5202E-09	-8,258
FeF+2	2,0029E-13	1,2601E-13	-12,9
FeF2+	3,4527E-11	3,075E-11	-10,512
FeF3 (aq)	1,8118E-10	1,8175E-10	-9,741
FeH2PO4+	3,7556E-12	3,3448E-12	-11,476
FeH2PO4+2	7,9925E-20	5,0285E-20	-19,299
FeHCO3+	2,1629E-09	1,9263E-09	-8,715
FeHPO4 (aq)	8,8107E-10	8,8384E-10	-9,054
FeHPO4+	1,335E-12	1,189E-12	-11,925
FeOH+	4,8731E-09	4,3401E-09	-8,363
FeOH+2	1,0858E-10	6,8313E-11	-10,165
FeOHSCN+	4,616E-35	4,1111E-35	-34,386
FeSCN+	1,0578E-22	9,4204E-23	-22,026
FeSCN+2	3,3754E-30	2,1236E-30	-29,673
FeSO4 (aq)	1,0435E-09	1,0468E-09	-8,98
FeSO4+	2,5615E-17	2,2813E-17	-16,642
H+1	2,1395E-09	1,9055E-09	-8,72
H2CO3* (aq)	2,0013E-05	2,0076E-05	-4,697
H2Fe(CN)6-2	8,8569E-24	5,5723E-24	-23,254
H2PO4-	1,9463E-07	1,7334E-07	-6,761
H3PO4	4,091E-14	4,1038E-14	-13,387
HCN (aq)	4,0514E-07	4,0641E-07	-6,391
HCO3-	0,0043627	0,0038854	-2,411
HF (aq)	1,5169E-08	1,5217E-08	-7,818
HF2-	4,1768E-10	3,7199E-10	-9,429
HFe(CN)6-3	3,5277E-17	1,2436E-17	-16,905
HPO4-2	8,723E-06	5,488E-06	-5,261
HSCN (aq)	1,3438E-26	1,348E-26	-25,87
HSO4-	1,428E-11	1,2718E-11	-10,896
K+1	0,00015283	0,00013611	-3,866
K2Fe(CN)6-2	1,0048E-09	6,3215E-10	-9,199
K2H2Fe(CN)6	4,8692E-24	4,8845E-24	-23,311
K2HPO4 (aq)	1,0554E-12	1,0587E-12	-11,975
K2PO4-	3,59E-15	3,1973E-15	-14,495

K3HFe(CN)6	2,8798E-21	2,8888E-21	-20,539
KCl (aq)	1,1614E-07	1,165E-07	-6,934
KF (aq)	4,0749E-07	4,0876E-07	-6,389
KFe(CN)6-2	4,115E-17	2,5889E-17	-16,587
KFe(CN)6-3	2,669E-14	9,409E-15	-14,026
KH2PO4 (aq)	3,4876E-11	3,4985E-11	-10,456
KHFe(CN)6-2	4,3669E-12	2,7474E-12	-11,561
KHPO4-	4,9682E-09	4,4247E-09	-8,354
KNO3 (aq)	3,1351E-10	3,1449E-10	-9,502
KOH (aq)	4,9619E-10	4,9775E-10	-9,303
KPO4-2	4,3123E-12	2,713E-12	-11,567
KSO4-	8,2165E-08	7,3178E-08	-7,136
Mg+2	1,7989E-05	1,1318E-05	-4,946
Mg2CO3+2	5,756E-11	3,6213E-11	-10,441
MgCl+	7,572E-08	6,7437E-08	-7,171
MgCO3 (aq)	5,6969E-07	5,7147E-07	-6,243
MgF+	5,3524E-06	4,7669E-06	-5,322
MgFe(CN)6-	5,3228E-17	4,7405E-17	-16,324
MgFe(CN)6-2	3,1483E-14	1,9808E-14	-13,703
MgHCO3+	4,7524E-07	4,2325E-07	-6,373
MgHPO4 (aq)	3,2054E-08	3,2155E-08	-7,493
MgOH+	8,8486E-09	7,8807E-09	-8,103
MgPO4-	4,3871E-10	3,9072E-10	-9,408
MgSO4 (aq)	1,7525E-07	1,758E-07	-6,755
Mn(CN)2 (aq)	9,9814E-18	1,0013E-17	-16,999
Mn(NO3)2 (aq)	7,2955E-18	7,3184E-18	-17,136
Mn(OH)4-2	1,2869E-20	8,0964E-21	-20,092
Mn+2	3,298E-07	2,0749E-07	-6,683
Mn+3	3,8515E-29	1,3578E-29	-28,867
Mn2(OH)3+	8,9699E-12	7,9887E-12	-11,098
Mn2OH+3	1,6205E-15	5,7126E-16	-15,243
MnCl+	3,7247E-10	3,3173E-10	-9,479
MnCl2 (aq)	9,4016E-13	9,4311E-13	-12,025
MnCl3-	4,6628E-16	4,1528E-16	-15,382
MnCN+	3,0485E-12	2,7151E-12	-11,566
MnCO3 (aq)	7,5332E-07	7,5568E-07	-6,122
MnF+	4,0375E-08	3,5958E-08	-7,444
MnHCO3+	1,6352E-08	1,4563E-08	-7,837
MnHPO4 (aq)	2,3585E-09	2,3659E-09	-8,626
MnNO3+	1,0841E-12	9,6556E-13	-12,015
MnO4-	1,3476E-51	1,2002E-51	-50,921
MnO4-2	3,2704E-45	2,0575E-45	-44,687
MnOH+	1,1529E-09	1,0268E-09	-8,989
MnSCN+	3,7025E-22	3,2975E-22	-21,482
MnSO4 (aq)	2,9931E-09	3,0025E-09	-8,523
Na+1	0,01209	0,010768	-1,968
Na2Fe(CN)6-2	3,6602E-06	2,3028E-06	-5,638

Na2HPO4 (aq)	4,3637E-09	4,3774E-09	-8,359
Na2PO4-	4,8032E-11	4,2778E-11	-10,369
NaCl (aq)	9,8136E-06	9,8444E-06	-5,007
NaCO3-	2,2883E-05	0,00002038	-4,691
NaF (aq)	6,0588E-05	6,0778E-05	-4,216
NaFe(CN)6-3	1,4972E-12	5,278E-13	-12,278
NaH2PO4 (aq)	2,7589E-09	2,7676E-09	-8,558
NaHCO3 (aq)	2,5351E-05	0,00002543	-4,595
NaHFe(CN)6-2	3,1797E-10	2,0005E-10	-9,699
NaHPO4-	6,0872E-07	5,4213E-07	-6,266
NaNO3 (aq)	8,8823E-09	8,9102E-09	-8,05
NaOH (aq)	2,6621E-08	2,6704E-08	-7,573
NaPO4-2	3,8287E-10	2,4088E-10	-9,618
NaSO4-	6,1382E-06	5,4668E-06	-5,262
NO3-1	3,2967E-06	2,9361E-06	-5,532
OH-	2,3628E-06	2,1043E-06	-5,677
PO4-3	2,6903E-09	9,4839E-10	-9,023
SCN-1	1E-16	8,9061E-17	-16,05
SO4-2	0,00014929	9,3924E-05	-4,027
Zn(CN)2 (aq)	1,0343E-20	1,0376E-20	-19,984
Zn(CN)3-	1,3454E-22	1,1982E-22	-21,921
Zn(CN)4-2	7,6234E-26	4,7962E-26	-25,319
Zn(CO3)2-2	1,6863E-18	1,0609E-18	-17,974
Zn(NO3)2 (aq)	4,3371E-29	4,3507E-29	-28,361
Zn(OH)2 (aq)	3,5262E-17	3,5372E-17	-16,451
Zn(OH)3-	6,6343E-20	5,9085E-20	-19,229
Zn(OH)4-2	7,8623E-24	4,9465E-24	-23,306
Zn(SCN)2 (aq)	6,5795E-48	6,6002E-48	-47,18
Zn(SCN)3-	8,0932E-64	7,2079E-64	-63,142
Zn(SCN)4-2	4,861E-80	3,0583E-80	-79,515
Zn(SO4)2-2	2,6904E-22	1,6927E-22	-21,771
Zn+2	1,6005E-17	1,007E-17	-16,997
Zn2OH+3	5,3047E-35	1,8701E-35	-34,728
ZnCl+	4,7691E-20	4,2474E-20	-19,372
ZnCl2 (aq)	4,0202E-23	4,0328E-23	-22,394
ZnCl3-	7,5541E-26	6,7278E-26	-25,172
ZnCl4-2	7,7739E-29	4,8909E-29	-28,311
ZnCO3 (aq)	4,1975E-17	4,2107E-17	-16,376
ZnF+	1,2363E-18	1,1011E-18	-17,958
ZnHCO3+	1,056E-18	9,4049E-19	-18,027
ZnHPO4 (aq)	8,8848E-20	8,9127E-20	-19,05
ZnNO3+	8,996E-23	8,0119E-23	-22,096
ZnOH+	2,3793E-18	2,119E-18	-17,674
ZnSCN+	2,369E-32	2,1098E-32	-31,676
ZnSO4 (aq)	1,8622E-19	1,8681E-19	-18,729

Table de distribution des espèces (2002)

Component	% of total component concentration	Species name
PO4-3	0,028	PO4-3
	90,047	HPO4-2
	2,009	H2PO4-
	0,331	MgHPO4 (aq)
	0,513	CaHPO4 (aq)
	0,62	CaPO4-
	6,284	NaHPO4-
	0,051	KHPO4-
	0,024	MnHPO4 (aq)
	0,045	Na2HPO4 (aq)
	0,028	NaH2PO4 (aq)
CO3-2	2,537	CO3-2
	0,017	MnCO3 (aq)
	95,846	HCO3-
	0,44	H2CO3* (aq)
	0,013	MgCO3 (aq)
	0,01	MgHCO3+
	0,023	CaHCO3+
	0,054	CaCO3 (aq)
	0,503	NaCO3-
	0,557	NaHCO3 (aq)
Fe+3	62,948	Fe(OH)2+
	8,868	Fe(OH)3 (aq)
	28,181	Fe(OH)4-
NO3-1	99,713	NO3-1
	0,269	NaNO3 (aq)
Cl-1	99,44	Cl-1
	0,544	NaCl (aq)
F-1	98,009	F-1
	0,182	AlF3 (aq)
	0,899	AlF4-
	0,071	MgF+
	0,026	CaF+
	0,805	NaF (aq)
SO4-2	95,606	SO4-2
	0,112	MgSO4 (aq)
	0,296	CaSO4 (aq)
	3,931	NaSO4-
	0,053	KSO4-
SCN-1	100	SCN-1
CN-1	0,321	CN-1
	97,839	Na2Fe(CN)6-2

	0,027K2Fe(CN)6-2
	1,805HCN (aq)
Al+3	0,161Al(OH)3 (aq)
	41,697Al(OH)4-
	0,181AlF2+
	12,308AlF3 (aq)
	45,651AlF4-
Ca+2	86,196Ca+2
	4,384CaF+
	0,229CaCl+
	1,035CaSO4 (aq)
	0,111CaHPO4 (aq)
	0,134CaPO4-
	2,394CaHCO3+
	5,514CaCO3 (aq)
Mg+2	72,893Mg+2
	0,036MgOH+
	21,688MgF+
	0,307MgCl+
	0,71MgSO4 (aq)
	0,13MgHPO4 (aq)
	2,308MgCO3 (aq)
	1,926MgHCO3+
Zn+2	16,005Zn+2
	1,686Zn(CO3)2-2
	2,379ZnOH+
	35,262Zn(OH)2 (aq)
	0,066Zn(OH)3-
	1,236ZnF+
	0,048ZnCl+
	0,186ZnSO4 (aq)
	0,01Zn(CN)2 (aq)
	0,089ZnHPO4 (aq)
	41,975ZnCO3 (aq)
	1,056ZnHCO3+
K+1	99,6K+1
	0,266KF (aq)
	0,076KCl (aq)
	0,054KSO4-
Na+1	98,914Na+1
	0,06Na2Fe(CN)6-2
	0,496NaF (aq)
	0,08NaCl (aq)
	0,05NaSO4-
	0,187NaCO3-
	0,207NaHCO3 (aq)
Mn+3	100Mn+3

Fe+2	2,19Fe+2
	97,35Na2Fe(CN)6-2
	0,027K2Fe(CN)6-2
	0,02FeCl
	0,13FeOH+
	0,165FeF+
	0,028FeSO4 (aq)
	0,023FeHPO4 (aq)
	0,058FeHCO3+
Mn+2	28,76Mn+2
	65,692MnCO3 (aq)
	0,101MnOH+
	3,521MnF+
	0,032MnCl+
	0,261MnSO4 (aq)
	0,206MnHPO4 (aq)
	1,426MnHCO3+

Index de saturation (2002)

Mineral	log IAP	Sat. Index	Stoichiometry				
Al(OH)3 (am)	10.730	-0.865	1Al+3	3H2O	-3H+1		
Al(OH)3 (Soil)	10.730	1.688	1Al+3	3H2O	-3H+1		
Al2O3	21.460	-0.045	2Al+3	3H2O	-6H+1		
Al4(OH)10SO4	21.451	-1.249	-10H+1	4Al+3	1SO4-2	10H2O	
AlOHF2	-11.075	-11.482	1Al+3	2F-1	-1H+1	1H2O	
AlOHSO4	-10.737	-7.507	-1H+1	1Al+3	1SO4-2	1H2O	
Alunite	-5.891	-5.995	1K+1	3Al+3	2SO4-2	-6H+1	6H2O
Anhydrite	-8.643	-4.335	1Ca+2	1SO4-2			
Aragonite	-8.755	-0.472	1Ca+2	1CO3-2			
Artinite	3.408	-7.053	-2H+1	2Mg+2	1CO3-2	5H2O	
Bianchite	-21.025	-19.265	1Zn+2	1SO4-2	6H2O		
Birnessite	9.950	-8.141	-4H+1	-1E-1	1Mn+3	2H2O	
Bixbyite	-5.415	-5.662	-6H+1	2Mn+3	3H2O		
Boehmite	10.730	1.309	-3H+1	1Al+3	2H2O		
Brucite	12.493	-5.423	1Mg+2	2H2O	-2H+1		
Ca3(PO4)2 (beta)	-31.894	-2.587	3Ca+2	2PO4-3			
Ca4H(PO4)3:3H2O	-54.253	-7.173	4Ca+2	1H+1	3PO4-3	3H2O	
CaCO3xH2O	-8.755	-1.672	1Ca+2	1CO3-2	1H2O		
CaHPO4	-22.359	-2.862	1Ca+2	1H+1	1PO4-3		
CaHPO4:2H2O	-22.359	-3.200	1Ca+2	1H+1	1PO4-3	2H2O	
Calcite	-8.755	-0.332	1Ca+2	1CO3-2			

Cryolite	-34.428	-0.316	3Na+1		1Al+3		6F-1								
Diaspore	10.730	3.119	-3H+1		1Al+3		2H2O								
Dolomite (disordered)	-17.839	-1.632	1Ca+2		1Mg+2		2CO3-2								
Dolomite (ordered)	-17.839	-1.032	1Ca+2		1Mg+2		2CO3-2								
Epsomite	-8.975	-6.765	1Mg+2		1SO4-2		7H2O								
Ettringite	33.997	-25.608	6Ca+2		2Al+3		3SO4-2		-12H+1		38H2O				
FCO3-Apatite	-98.111	17.469	9.316	Ca+2	.36	Na+1	.144	Mg+2	4.8	PO4-3	1.2	CO3-2	2.48	F-1	
Fe(OH)2 (am)	10.154	-3.992	1Fe+2		2H2O		-2H+1								
Fe(OH)2 (c)	10.154	-2.736	1Fe+2		-2H+1		2H2O								
Fe(OH)2.7 Cl.3	6.019	9.059	-2.7	H+1	1Fe+3		2.7	H2O	.3	Cl-1					
Fe(OH)3(s)	9.474	12.674	1Fe+3		3H2O		-3H+1								
Fe2(SO4)3	-45.453	-43.452	2Fe+3		3SO4-2										
Fe3(Fe(CN)6)2(s)	-141.547	-314.547	3Fe+2		2Fe+3		12CN-1								
Fe3(OH)8	29.102	8.880	-8H+1		2Fe+3		1Fe+2		8H2O						
Fe4(Fe(CN)6)3(s)	-218.077	-475.077	4Fe+3		3Fe+2		18CN-1								
Ferrihydrite	9.474	5.555	1Fe+3		3H2O		-3H+1								
Ferrihydrite (aged)	9.474	6.784	1Fe+3		-3H+1		3H2O								
Fluorite	-8.981	1.605	1Ca+2		2F-1										
Gibbsite (C)	10.730	2.238	1Al+3		3H2O		-3H+1								
Goethite	9.474	8.549	1Fe+3		2H2O		-3H+1								
Goslarite	-21.025	-18.912	1Zn+2		1SO4-2		7H2O								
Gypsum	-8.643	-4.026	1Ca+2		1SO4-2		2H2O								

Halite	-4.764	-6.288	1Na+1	1Cl-1			
Hausmannite	57.586	-6.459	3Mn+2	4H2O	-8H+1	-2E-1	
Hematite	18.948	19.443	2Fe+3	3H2O	-6H+1		
Hercynite	31.614	6.473	-8H+1	1Fe+2	2Al+3	4H2O	
H-Jarosite	-14.512	-10.721	3Fe+3	2SO4-2	-5H+1	7H2O	
Huntite	-36.009	-6.813	3Mg+2	1Ca+2	4CO3-2		
Hydromagnesite	-23.847	-16.645	5Mg+2	4CO3-2	-2H+1	6H2O	
Hydroxyapatite	-41.428	2.905	5Ca+2	3PO4-3	1H2O	-1H+1	
Hydrozincite	-40.943	-51.337	5Zn+2	2CO3-2	-6H+1	6H2O	
K-Alum	-27.353	-21.966	1K+1	1Al+3	2SO4-2	12H2O	
KCl	-6.662	-7.562	1K+1	1Cl-1			
KCN (cubic)	-11.059	-12.393	1CN-1	1K+1			
K-Jarosite	-9.658	0.613	1K+1	3Fe+3	2SO4-2	-6H+1	6H2O
Lepidocrocite	9.474	8.103	-3H+1	1Fe+3	2H2O		
Lime	12.824	-21.264	-2H+1	1Ca+2	1H2O		
Maghemite	18.948	12.562	-6H+1	2Fe+3	3H2O		
Magnesioferrite	31.442	12.585	-8H+1	1Mg+2	2Fe+3	4H2O	
Magnesite	-9.085	-1.482	1Mg+2	1CO3-2			
Magnetite	29.103	24.206	-8H+1	2Fe+3	1Fe+2	4H2O	
Manganite	23.415	-1.925	1Mn+2	2H2O	-3H+1	-1E-1	
Melanterite	-11.314	-8.958	1Fe+2	1SO4-2	7H2O		
Mg(OH)2 (active)	12.493	-6.301	1Mg+2	2H2O	-2H+1		
Mg2(OH)3Cl:4H2O	13.470	-12.530	2Mg+2	1Cl-1	-3H+1	7H2O	

Mg3(PO4)2	-32.885	-9.605	3Mg+2	2PO4-3			
MgCO3:5H2O	-9.086	-4.546	1Mg+2	1CO3-2	5H2O		
MgF2	-9.311	-1.258	1Mg+2	2F-1			
MgHPO4:3H2O	-22.690	-4.515	1Mg+2	1H+1	1PO4-3	3H2O	
Mirabilite	-7.965	-6.282	2Na+1	1SO4-2	10H2O		
Mn2(SO4)3	-69.816	-65.276	2Mn+3	3SO4-2			
Mn3(PO4)2	-38.095	-14.205	3Mn+2	2PO4-3			
Mn3[Fe(CN)6]2	-139.739	-34.339	3Mn+2	2Fe+3	12CN-1		
MnCl2:4H2O	-12.276	-15.069	1Mn+2	2Cl-1	4H2O		
MnCO3(am)	-10.822	-0.322	1Mn+2	1CO3-2			
MnHPO4	-24.426	0.974	1Mn+2	1PO4-3	1H+1		
MnSO4	-10.710	-13.758	1Mn+2	1SO4-2			
NaCN(cubic)	-9.161	-10.755	1CN-1	1Na+1			
NaF	-4.150	-3.655	1Na+1	1F-1			
Na-Jarosite	-7.760	-3.412	1Na+1	3Fe+3	2SO4-2	-6H+1	6H2O
Natron	-8.076	-6.293	2Na+1	1CO3-2	10H2O		
Nesquehonite	-9.085	-4.589	1Mg+2	1CO3-2	3H2O		
Nsutite	9.950	-7.554	-4H+1	-1E-1	1Mn+3	2H2O	
Periclase	12.494	-10.174	-2H+1	1Mg+2	1H2O		
Portlandite	12.824	-10.801	1Ca+2	2H2O	-2H+1		
Pyrochroite	10.757	-5.132	1Mn+2	2H2O	-2H+1		
Pyrolusite	36.072	-7.256	1Mn+2	2H2O	-4H+1	-2E-1	
Rhodochrosite	-10.822	0.165	1Mn+2	1CO3-2			
Siderite	-11.424	-0.887	1Fe+2	1CO3-2			

Smithsonite	-21.136	-10.263	1Zn+2	1CO3-2		
Spinel	33.953	-5.673	-8H+1	1Mg+2	2Al+3	4H2O
Strengite	-25.709	0.624	1Fe+3	1PO4-3	2H2O	
Thenardite	-7.963	-8.350	2Na+1	1SO4-2		
Thermonatrite	-8.075	-8.787	2Na+1	1CO3-2	1H2O	
Vaterite	-8.755	-0.902	1Ca+2	1CO3-2		
Vivianite	-39.904	-2.108	3Fe+2	2PO4-3	8H2O	
Zincite	0.443	-11.429	1Zn+2	1H2O	-2H+1	
Zincosite	-21.024	-25.545	1Zn+2	1SO4-2		
Zn metal	-24.873	-51.760	1Zn+2	2E-1		
Zn(NO3)2:6H2O	-28.063	-31.202	1Zn+2	2NO3-1	6H2O	
Zn(OH)2 (am)	0.443	-12.645	1Zn+2	2H2O	-2H+1	
Zn(OH)2 (beta)	0.443	-11.907	1Zn+2	2H2O	-2H+1	
Zn(OH)2 (delta)	0.443	-11.401	1Zn+2	-2H+1	2H2O	
Zn(OH)2 (epsilon)	0.443	-11.654	1Zn+2	2H2O	-2H+1	
Zn(OH)2 (gamma)	0.443	-11.877	1Zn+2	2H2O	-2H+1	
Zn2(OH)2SO4	-20.582	-28.082	-2H+1	2Zn+2	2H2O	1SO4-2
Zn2(OH)3Cl	-10.631	-25.822	2Zn+2	3H2O	-3H+1	1Cl-1
Zn2Fe(CN)6	-84.439	-33.359	2Zn+2	1Fe+2	6CN-1	
Zn3(PO4)2:4H2O	-69.038	-33.618	3Zn+2	2PO4-3	4H2O	
Zn3O(SO4)2	-41.606	-62.367	-2H+1	3Zn+2	2SO4-2	1H2O

Zn4(OH)6SO4	-19.696	-48.096	-6H+1	4Zn+2		6H2O	1SO4-2	
Zn5(OH)8Cl2	-20.819	-59.319	-8H+1	5Zn+2		8H2O	2Cl-1	
Zn-Al LDH	0.826	-19.004	2Zn+2	1Al+3	.5	CO3-2	-6H+1	6H2O
ZnCl2	-22.589	-30.159	1Zn+2	2Cl-1				
ZnCO3	-21.136	-10.336	1Zn+2	1CO3-2				
ZnCO3:1H2O	-21.136	-10.876	1Zn+2	1CO3-2		1H2O		
ZnF2	-21.362	-21.255	1Zn+2	2F-1				
ZnSO4:1H2O	-21.024	-20.702	1Zn+2	1SO4-2		1H2O		

ANNEXE III

Fichiers VMINTEQ pour MW12A

Table des concentrations (2003)

	Concentration	Activity	Log activity
Al DOM1	1,0873E-13	1,0807E-13	-12,966
Al(OH)2+	4,114E-10	3,5392E-10	-9,451
Al(OH)3 (aq)	3,428E-08	3,4487E-08	-7,462
Al(OH)4-	1,3754E-05	1,1832E-05	-4,927
Al(SO4)2-	2,2269E-18	1,9157E-18	-17,718
Al+3	6,3787E-16	1,6462E-16	-15,784
Al2(OH)2+4	7,5407E-22	6,7865E-23	-22,168
Al2(OH)2CO3+2	1,2002E-13	6,5739E-14	-13,182
Al2PO4+3	5,526E-21	1,4261E-21	-20,846
Al3(OH)4+5	4,6607E-26	1,0825E-27	-26,966
AlCl+2	2,6466E-19	1,4496E-19	-18,839
AlF+2	3,3944E-11	1,8592E-11	-10,731
AlF2+	1,0146E-07	8,7281E-08	-7,059
AlF3 (aq)	1,2361E-05	1,2435E-05	-4,905
AlF4-	8,8643E-05	7,6257E-05	-4,118
AlHPO4+	1,3275E-13	1,142E-13	-12,942
AlOH+2	8,4142E-13	4,6086E-13	-12,336
AlSCN+2	1,6392E-19	8,9781E-20	-19,047
AlSO4+	2,3718E-16	2,0404E-16	-15,69
Ca DOM1	4,6803E-05	4,2505E-05	-4,372
Ca+2	2,3586E-05	1,2918E-05	-4,889
Ca2Fe(CN)6 (aq)	7,4709E-17	7,5159E-17	-16,124
CaCl+	7,4539E-08	6,4124E-08	-7,193
CaCO3 (aq)	3,1602E-06	3,1792E-06	-5,498
CaF+	1,853E-06	1,5941E-06	-5,797
CaFe(CN)6-	1,8871E-23	1,6234E-23	-22,79
CaFe(CN)6-2	3,1264E-13	1,7124E-13	-12,766
CaH2PO4+	1,2E-10	1,0323E-10	-9,986
CaHCO3+	9,4902E-07	8,1642E-07	-6,088
CaHPO4 (aq)	1,0093E-07	1,0153E-07	-6,993
CaOH+	5,8201E-10	5,0069E-10	-9,3
CaPO4-	1,7842E-07	1,5349E-07	-6,814
CaSO4 (aq)	6,3961E-07	6,4346E-07	-6,191
Cl-1	0,0025126	0,0021615	-2,665
CN-1	3,0464E-08	2,6208E-08	-7,582
CO3-2	0,00032883	0,00018011	-3,744
DOM1	0,00052164	0,00016031	-3,795
F-1	0,014223	0,012236	-1,912
Fe DOM1	4,4128E-17	4,3863E-17	-16,358
Fe(CN)6-3	7,5323E-21	1,944E-21	-20,711
Fe(CN)6-4	3,7608E-11	3,3846E-12	-11,47

Fe(OH)2 (aq)	1,9524E-09	1,9642E-09	-8,707
Fe(OH)2+	1,2371E-10	1,0643E-10	-9,973
Fe(OH)3-	5,0684E-11	4,3603E-11	-10,36
Fe(OH)3 (aq)	2,0795E-11	2,092E-11	-10,679
Fe(OH)4-	6,6284E-11	5,7023E-11	-10,244
Fe(SCN)2+	5,5014E-25	4,7327E-25	-24,325
Fe(SCN)3 (aq)	5,5692E-28	5,6028E-28	-27,252
Fe(SO4)2-	2,4898E-24	2,1419E-24	-23,669
Fe+2	2,4783E-05	1,3574E-05	-4,867
Fe+3	8,1868E-22	2,1128E-22	-21,675
Fe2(CN)6 (aq)	8,2433E-40	8,2929E-40	-39,081
Fe2(OH)2+4	1,1787E-28	1,0608E-29	-28,974
Fe3(OH)4+5	2,1083E-35	4,8968E-37	-36,31
Fe3(OH)4+5	8,8559E-35	2,0569E-36	-35,687
FeCl+	2,152E-08	1,8513E-08	-7,733
FeCl+	2,7092E-07	2,3307E-07	-6,633
FeCl+2	1,5035E-23	8,2348E-24	-23,084
FeF+	3,1312E-06	2,6937E-06	-5,57
FeF+2	4,1358E-18	2,2652E-18	-17,645
FeF2+	1,148E-15	9,8759E-16	-15,005
FeF3 (aq)	1,0063E-14	1,0124E-14	-13,995
FeH2PO4+	2,4676E-09	2,1228E-09	-8,673
FeH2PO4+2	2,2777E-24	1,2475E-24	-23,904
FeHCO3+	9,3888E-07	8,077E-07	-6,093
FeHPO4 (aq)	8,6357E-07	8,6877E-07	-6,061
FeHPO4+	6,3656E-17	5,4762E-17	-16,262
FeOH+	1,4698E-06	1,2644E-06	-5,898
FeOH+2	1,7043E-15	9,3347E-16	-15,03
FeOHSCN+	1,7643E-27	1,5178E-27	-26,819
FeSCN+	6,68E-08	5,7466E-08	-7,241
FeSCN+2	9,5016E-23	5,2042E-23	-22,284
FeSO4 (aq)	7,0576E-07	7,1001E-07	-6,149
FeSO4+	4,0108E-22	3,4504E-22	-21,462
H DOM1	6,1517E-08	3,7777E-08	-7,423
H+1	1,4301E-09	1,2303E-09	-8,91
H2CO3* (aq)	2,5125E-05	2,5276E-05	-4,597
H2Fe(CN)6-2	4,193E-23	2,2966E-23	-22,639
H2PO4-	5,4304E-07	4,6716E-07	-6,331
H3PO4	6,7894E-14	6,8302E-14	-13,166
HCN (aq)	1,3814E-07	1,3897E-07	-6,857
HCO3-	0,0080864	0,0069565	-2,158
HF (aq)	1,6808E-08	1,6909E-08	-7,772
HF2-	8,7333E-10	7,513E-10	-9,124
HFe(CN)6-3	3,1497E-16	8,1288E-17	-16,09

HPO4-2	4,1086E-05	2,2504E-05	-4,648
HSCN (aq)	2,0141E-14	2,0263E-14	-13,693
HSO4-	2,332E-11	2,0062E-11	-10,698
K+1	0,00033005	0,00028394	-3,547
K2Fe(CN)6-2	6,1546E-09	3,371E-09	-8,472
K2H2Fe(CN)6	1,0793E-23	1,0858E-23	-22,964
K2HPO4 (aq)	1,718E-11	1,7283E-11	-10,762
K2PO4-	9,397E-14	8,084E-14	-13,092
K3HFe(CN)6	2,0624E-20	2,0748E-20	-19,683
KCl (aq)	3,3445E-07	3,3646E-07	-6,473
KF (aq)	1,5785E-06	1,588E-06	-5,799
KFe(CN)6-2	2,6538E-23	1,4536E-23	-22,838
KFe(CN)6-3	7,6041E-13	1,9625E-13	-12,707
KH2PO4 (aq)	1,7571E-10	1,7677E-10	-9,753
KHFe(CN)6-2	8,279E-12	4,5346E-12	-11,343
KHPO4-	4,025E-08	3,4626E-08	-7,461
KOH (aq)	1,1476E-09	1,1545E-09	-8,938
KPO4-2	5,4926E-11	3,0084E-11	-10,522
KSO4-	4,461E-07	3,8377E-07	-6,416
Mg DOM1	1,4507E-05	1,3175E-05	-4,88
Mg+2	7,3108E-05	4,0043E-05	-4,397
Mg2CO3+2	2,0512E-09	1,1235E-09	-8,949
MgCl+	3,6618E-07	3,1501E-07	-6,502
MgCO3 (aq)	4,6852E-06	4,7134E-06	-5,327
MgF+	0,0000338	2,9077E-05	-4,536
MgFe(CN)6-	5,2162E-23	4,4874E-23	-22,348
MgFe(CN)6-2	1,2207E-12	6,6861E-13	-12,175
MgHCO3+	3,0554E-06	2,6285E-06	-5,58
MgHPO4 (aq)	4,3183E-07	4,3443E-07	-6,362
MgOH+	3,4371E-08	2,9568E-08	-7,529
MgPO4-	8,645E-09	7,4371E-09	-8,129
MgSO4 (aq)	1,6214E-06	1,6311E-06	-5,788
Mn(CN)2 (aq)	1,4096E-28	1,418E-28	-27,848
Mn(OH)4-2	7,1926E-30	3,9395E-30	-29,405
Mn+2	3,2082E-17	1,7572E-17	-16,755
Mn+3	1,1838E-46	3,0551E-47	-46,515
Mn2(OH)3+	2,4715E-31	2,1262E-31	-30,672
Mn2OH+3	2,4578E-35	6,343E-36	-35,198
MnCl+	4,4151E-20	3,7982E-20	-19,42
MnCl2 (aq)	1,4512E-22	1,46E-22	-21,836
MnCl3-	1,0103E-25	8,6917E-26	-25,061
MnCN+	1,093E-22	9,4027E-23	-22,027
MnCO3 (aq)	1,5767E-16	1,5862E-16	-15,8
MnF+	6,1758E-18	5,3129E-18	-17,275

MnHCO3+	2,4431E-18	2,1017E-18	-17,677
MnHPO4 (aq)	7,4714E-19	7,5164E-19	-18,124
MnO4-	9,615E-99	8,272E-99	-98,082
MnO4-2	9,9667E-85	5,459E-85	-84,263
MnOH+	1,0975E-19	9,4417E-20	-19,025
MnSCN+	7,6929E-20	6,6181E-20	-19,179
MnSO4 (aq)	6,5154E-19	6,5547E-19	-18,183
Na+1	0,02248	0,019339	-1,714
Na2Fe(CN)6-2	0,00001662	9,1032E-06	-5,041
Na2HPO4 (aq)	5,2657E-08	5,2974E-08	-7,276
Na2PO4-	9,3202E-10	8,018E-10	-9,096
NaCl (aq)	2,4917E-05	2,5067E-05	-4,601
NaCO3-	0,00011899	0,00010236	-3,99
NaF (aq)	0,00018819	0,00018933	-3,723
NaFe(CN)6-3	3,6748E-11	9,484E-12	-11,023
NaH2PO4 (aq)	1,1968E-08	1,204E-08	-7,919
NaHCO3 (aq)	8,5949E-05	8,6467E-05	-4,063
NaHFe(CN)6-2	5,1904E-10	2,8429E-10	-9,546
NaHPO4-	4,2461E-06	3,6528E-06	-5,437
NaOH (aq)	5,1768E-08	5,208E-08	-7,283
NaPO4-2	4,3769E-09	2,3973E-09	-8,62
NaSO4-	3,0797E-05	2,6494E-05	-4,577
OH-	2,7198E-06	2,3398E-06	-5,631
PO4-3	2,1352E-08	5,5104E-09	-8,259
S	0,00021831	0,00021963	-3,658
SCN-1	0,00024102	0,00020735	-3,683
SO4-2	0,00046547	0,00025495	-3,594

Table de distribution des espèces (2003)

Component	% of total component concentration	Species name
Na+1	97,882	Na+1
	0,145	Na2Fe(CN)6-2
	0,819	NaF (aq)
	0,108	NaCl (aq)
	0,134	NaSO4-
	0,018	NaHPO4-
	0,518	NaCO3-
	0,374	NaHCO3 (aq)
Fe+2	50,699	Fe+2
	34	Na2Fe(CN)6-2
	0,013	K2Fe(CN)6-2
	0,554	FeCl+
	3,007	FeOH+
	6,405	FeF+
	0,044	FeCl+
	1,444	FeSO4 (aq)
	0,137	FeSCN+
	1,767	FeHPO4 (aq)
	1,921	FeHCO3+
DOM1	89,473	DOM1
	0,011	H DOM1
	8,028	Ca DOM1
	2,488	Mg DOM1
K+1	99,274	K+1
	0,475	KF (aq)
	0,101	KCl (aq)
	0,134	KSO4-
	0,012	KHPO4-
Mg+2	55,544	Mg+2
	11,022	Mg DOM1
	0,026	MgOH+
	25,68	MgF+
	0,278	MgCl+
	1,232	MgSO4 (aq)
	0,328	MgHPO4 (aq)
	3,56	MgCO3 (aq)
	2,321	MgHCO3+

Mn+3	100	Mn+3
CO3-2	3,798	CO3-2
	93,397	HCO3-
	0,29	H2CO3* (aq)
	0,011	FeHCO3+
	0,054	MgCO3 (aq)
	0,035	MgHCO3+
	0,011	CaHCO3+
	0,036	CaCO3 (aq)
	1,374	NaCO3-
	0,993	NaHCO3 (aq)
Cl-1	98,976	Cl-1
	0,011	FeCl+
	0,014	MgCl+
	0,013	KCl (aq)
	0,982	NaCl (aq)
F-1	95,82	F-1
	0,25	AlF3 (aq)
	2,389	AlF4-
	0,228	MgF+
	0,012	CaF+
	1,268	NaF (aq)
	0,021	FeF+
	0,011	KF (aq)
SO4-2	93,154	SO4-2
	0,141	FeSO4 (aq)
	0,324	MgSO4 (aq)
	0,128	CaSO4 (aq)
	6,163	NaSO4-
	0,089	KSO4-
PO4-3	0,045	PO4-3
	86,328	HPO4-2
	1,141	H2PO4-
	1,814	FeHPO4 (aq)
	0,018	MgPO4-
	0,907	MgHPO4 (aq)
	0,212	CaHPO4 (aq)
	0,375	CaPO4-
	8,922	NaHPO4-
	0,085	KHPO4-
	0,111	Na2HPO4 (aq)
	0,025	NaH2PO4 (aq)
CN-1	0,03	CN-1
	99,791	Na2Fe(CN)6-2

	0,037	K2Fe(CN)6-2
	0,138	HCN (aq)
SCN-1	99,972	SCN-1
	0,028	FeSCN+
S	100	S
Al+3	0,03	Al(OH)3 (aq)
	11,971	Al(OH)4-
	0,088	AlF2+
	10,759	AlF3 (aq)
	77,152	AlF4-
Ca+2	30,494	Ca+2
	60,512	Ca DOM1
	2,396	CaF+
	0,096	CaCl+
	0,827	CaSO4 (aq)
	0,13	CaHPO4 (aq)
	0,231	CaPO4-
	1,227	CaHCO3+
	4,086	CaCO3 (aq)
Fe+3	58,686	Fe(OH)2+
	9,865	Fe(OH)3 (aq)
	31,443	Fe(OH)4-
Mn+2	16,041	Mn+2
	78,835	MnCO3 (aq)
	0,055	MnOH+
	3,088	MnF+
	0,022	MnCl+
	0,326	MnSO4 (aq)
	0,038	MnSCN+
	0,374	MnHPO4 (aq)
	1,222	MnHCO3+

Index de saturation (2003)

Mineral	log IAP	Sat. Index	Stoichiometry				
Al(OH)3 (am)	10.945	-0.935	1 Al+3	3 H2O	-3 H+1		
Al(OH)3 (Soil)	10.945	1.633	1 Al+3	3 H2O	-3 H+1		
Al2O3	21.892	-0.279	2 Al+3	3 H2O	-6 H+1		
Al4(OH)10 SO4	22.369	-0.331	-10 H+1	4 Al+3	1 SO4-2	10 H2O	
AlOHF2	-10.699	-11.106	1 Al+3	2 F-1	-1 H+1	1 H2O	
AlOHSO4	-10.467	-7.237	-1 H+1	1 Al+3	1 SO4-2	1 H2O	
Alunite	-4.626	-5.271	1 K+1	3 Al+3	2 SO4-2	-6 H+1	6 H2O
Anhydrite	-8.482	-4.192	1 Ca+2	1 SO4-2			
Aragonite	-8.633	-0.371	1 Ca+2	1 CO3-2			
Artinite	5.279	-5.492	-2 H+1	2 Mg+2	1 CO3-2	5 H2O	
Birnessite	-14.236	-32.327	-4 H+1	-1 E-1	1 Mn+3	2 H2O	
Bixbyite	-39.571	-40.139	-6 H+1	2 Mn+3	3 H2O		
Boehmite	10.946	1.222	-3 H+1	1 Al+3	2 H2O		
Brucite	13.422	-4.788	1 Mg+2	2 H2O	-2 H+1		
Ca3(PO4) 2 (beta)	-31.184	-1.738	3 Ca+2	2 PO4-3			
Ca4H(PO4)3:3H2O	-53.243	-6.163	4 Ca+2	1 H+1	3 PO4-3	3 H2O	
CaCO3xH 2O	-8.634	-1.572	1 Ca+2	1 CO3-2	1 H2O		
CaHPO4	-22.058	-2.481	1 Ca+2	1 H+1	1 PO4-3		
CaHPO4:2 H2O	-22.058	-2.839	1 Ca+2	1 H+1	1 PO4-3	2 H2O	
Calcite	-8.633	-0.231	1 Ca+2	1 CO3-2			

Cryolite	-32.398	1.812	3	Na+1	1	Al+3	6	F-1							
Diaspore	10.946	3.069	-3	H+1	1	Al+3	2	H2O							
Dolomite (disordered)	-16.775	-0.687	1	Ca+2	1	Mg+2	2	CO3-2							
Dolomite (ordered)	-16.775	-0.070	1	Ca+2	1	Mg+2	2	CO3-2							
Epsomite	-7.993	-5.754	1	Mg+2	1	SO4-2	7	H2O							
Ettringite	35.226	-25.369	6	Ca+2	2	Al+3	3	SO4-2	-12	H+1	38	H2O			
FCO3-Apatite	-95.672	20.332	9.316	Ca+2	.36	Na+1	.144	Mg+2	4.8	PO4-3	1.2	CO3-2	2.48	F-1	
Fe(OH)2 (am)	12.952	-1.430	1	Fe+2	2	H2O	-2	H+1							
Fe(OH)2 (c)	12.952	0.062	1	Fe+2	-2	H+1	2	H2O							
Fe(OH)2.7Cl.3	1.581	4.621	-2.7	H+1	1	Fe+3	2.7	H2O	.3	Cl-1					
Fe(OH)3	5.054	8.254	1	Fe+3	3	H2O	-3	H+1							
Fe2(SO4)3	-54.131	-52.754	2	Fe+3	3	SO4-2									
Fe3(Fe(CN)6)2	-148.931	-321.931	3	Fe+2	2	Fe+3	12	CN-1							
Fe3(OH)8	23.060	2.838	-8	H+1	2	Fe+3	1	Fe+2	8	H2O					
Fe4(Fe(CN)6)3	-237.771	-494.771	4	Fe+3	3	Fe+2	18	CN-1							
Ferrihydrite	5.054	0.876	1	Fe+3	3	H2O	-3	H+1							
Ferrihydrite (aged)	5.054	2.364	1	Fe+3	-3	H+1	3	H2O							
Fluorite	-8.714	1.903	1	Ca+2	2	F-1									
Gibbsite (C)	10.945	2.183	1	Al+3	3	H2O	-3	H+1							
Goethite	5.054	3.973	1	Fe+3	2	H2O	-3	H+1							

Gypsum	-8.483	-3.863	1 Ca+2	1 SO4-2	2 H2O		
Halite	-4.379	-5.893	1 Na+1	1 Cl-1			
Hausmannite	14.293	-50.837	3 Mn+2	4 H2O	-8 H+1	-2 E-1	
Hematite	10.109	10.271	2 Fe+3	3 H2O	-6 H+1		
Hercynite	34.844	8.894	-8 H+1	1 Fe+2	2 Al+3	4 H2O	
H-Jarosite	-27.665	-24.449	3 Fe+3	2 SO4-2	-5 H+1	7 H2O	
Huntite	-33.059	-4.141	3 Mg+2	1 Ca+2	4 CO3-2		
Hydromagnesite	-19.147	-12.509	5 Mg+2	4 CO3-2	-2 H+1	6 H2O	
Hydroxyapatite	-40.311	4.022	5 Ca+2	3 PO4-3	1 H2O	-1 H+1	
K-Alum	-26.522	-21.057	1 K+1	1 Al+3	2 SO4-2	12 H2O	
KCl	-6.212	-7.112	1 K+1	1 Cl-1			
KCN (cubic)	-11.128	-12.431	1 CN-1	1 K+1			
K-Jarosite	-22.301	-12.293	1 K+1	3 Fe+3	2 SO4-2	-6 H+1	6 H2O
Lepidocrocite	5.054	3.683	-3 H+1	1 Fe+3	2 H2O		
Lime	12.931	-21.657	-2 H+1	1 Ca+2	1 H2O		
Maghemite	10.109	3.723	-6 H+1	2 Fe+3	3 H2O		
Magnesioferrite	23.531	3.955	-8 H+1	1 Mg+2	2 Fe+3	4 H2O	
Magnesite	-8.142	-0.487	1 Mg+2	1 CO3-2			
Magnetite	23.061	17.628	-8 H+1	2 Fe+3	1 Fe+2	4 H2O	
Manganite	6.614	-18.726	1 Mn+2	2 H2O	-3 H+1	-1 E-1	
Melanterite	-8.463	-6.055	1 Fe+2	1 SO4-2	7 H2O		
Mg(OH)2 (active)	13.422	-5.372	1 Mg+2	2 H2O	-2 H+1		
Mg2(OH)3Cl:4H2O	15.267	-10.733	2 Mg+2	1 Cl-1	-3 H+1	7 H2O	

Mg3(PO4)2	-29.710	-6.430	3 Mg+2	2 PO4-3			
MgCO3:5H2O	-8.144	-3.604	1 Mg+2	1 CO3-2	5 H2O		
MgF2	-8.222	-0.190	1 Mg+2	2 F-1			
MgHPO4:3H2O	-21.567	-3.392	1 Mg+2	1 H+1	1 PO4-3	3 H2O	
Mirabilite	-7.024	-5.137	2 Na+1	1 SO4-2	10 H2O		
Mn2(SO4)3	-103.811	-99.691	2 Mn+3	3 SO4-2			
Mn3(PO4)2	-66.783	-42.870	3 Mn+2	2 PO4-3			
Mn3[Fe(CN)6]2	-184.595	-79.195	3 Mn+2	2 Fe+3	12 CN-1		
MnCl2:4H2O	-22.087	-24.908	1 Mn+2	2 Cl-1	4 H2O		
MnCO3(am)	-20.500	-10.000	1 Mn+2	1 CO3-2			
MnHPO4	-33.924	-8.524	1 Mn+2	1 PO4-3	1 H+1		
MnSO4	-20.349	-23.563	1 Mn+2	1 SO4-2			
NaCN(cubic)	-9.295	-10.887	1 CN-1	1 Na+1			
NaF	-3.626	-3.128	1 Na+1	1 F-1			
Na-Jarosite	-20.468	-16.470	1 Na+1	3 Fe+3	2 SO4-2	-6 H+1	6 H2O
Natron	-7.175	-5.223	2 Na+1	1 CO3-2	10 H2O		
Nesquehonite	-8.143	-3.709	1 Mg+2	1 CO3-2	3 H2O		
Nsutite	-14.236	-31.740	-4 H+1	-1 E-1	1 Mn+3	2 H2O	
Periclase	13.422	-9.635	-2 H+1	1 Mg+2	1 H2O		
Portlandite	12.931	-11.026	1 Ca+2	2 H2O	-2 H+1		

Pyrochroite	1.064	-15.075	1 Mn+2	2 H2O	-2 H+1	
Pyrolusite	12.164	-31.865	1 Mn+2	2 H2O	-4 H+1	-2 E-1
Rhodochrosite	-20.500	-9.518	1 Mn+2	1 CO3-2		
Siderite	-8.612	1.907	1 Fe+2	1 CO3-2		
Spinel	35.314	-5.312	-8 H+1	1 Mg+2	2 Al+3	4 H2O
Strengite	-29.935	-3.626	1 Fe+3	1 PO4-3	2 H2O	
Thenardite	-7.021	-7.431	2 Na+1	1 SO4-2		
Thermonatrite	-7.172	-7.911	2 Na+1	1 CO3-2	1 H2O	
Vaterite	-8.633	-0.801	1 Ca+2	1 CO3-2		
Vivianite	-31.122	6.687	3 Fe+2	2 PO4-3	8 H2O	

Table des concentrations (2002)

	Concentration	Activity	Log activity
Al(OH)2+	4,1668E-10	3,5209E-10	-9,453
Al(OH)3 (aq)	6,303E-08	6,3537E-08	-7,197
Al(OH)4-	4,7036E-05	3,9745E-05	-4,401
Al(SO4)2-	2,5475E-19	2,1526E-19	-18,667
Al+3	2,1637E-16	4,7518E-17	-16,323
Al2(OH)2+4	2,8395E-22	1,9181E-23	-22,717
Al2(OH)2CO3+2	7,0026E-14	3,57E-14	-13,447
Al2PO4+3	1,0369E-21	2,2772E-22	-21,643
Al3(OH)4+5	2,0134E-26	2,987E-28	-27,525
AlCl+2	3,6712E-19	1,8716E-19	-18,728
AlF+2	1,371E-11	6,9894E-12	-11,156
AlF2+	5,056E-08	4,2723E-08	-7,369
AlF3 (aq)	7,8535E-06	7,9167E-06	-5,101
AlF4-	7,4715E-05	6,3134E-05	-4,2
AlHPO4+	4,1085E-14	3,4717E-14	-13,459
AlOH+2	4,8227E-13	2,4587E-13	-12,609
AlSCN+2	6,0645E-20	3,0917E-20	-19,51
AlSO4+	4,3564E-17	3,6811E-17	-16,434
Ca+2	0,00006207	3,1644E-05	-4,5
Ca2Fe(CN)6 (aq)	4,0594E-16	4,092E-16	-15,388
CaCl+	8,3256E-07	7,0351E-07	-6,153
CaCO3 (aq)	1,5231E-05	1,5353E-05	-4,814
CaF+	6,0373E-06	5,1014E-06	-5,292
CaFe(CN)6-	4,281E-17	3,6174E-17	-16,442
CaFe(CN)6-2	7,4736E-13	3,8101E-13	-12,419
CaH2PO4+	1,7286E-10	1,4606E-10	-9,835
CaHCO3+	2,5614E-06	2,1644E-06	-5,665
CaHPO4 (aq)	2,5958E-07	2,6167E-07	-6,582
CaOH+	2,6971E-09	2,279E-09	-8,642
CaPO4-	8,5641E-07	7,2366E-07	-6,14
CaSO4 (aq)	9,7137E-07	9,7918E-07	-6,009
Cl-1	0,011442	0,0096684	-2,015
CN-1	6,3206E-08	5,3408E-08	-7,272
CO3-2	0,0006958	0,00035472	-3,45
Cu(CO3)2-2	1,0196E-07	5,1979E-08	-7,284
Cu(OH)2 (aq)	4,2504E-10	4,2846E-10	-9,368
Cu(OH)3-	2,2793E-10	1,926E-10	-9,715
Cu(OH)4-2	8,7951E-16	4,4838E-16	-15,348
Cu(SCN)2 (aq)	1,2278E-14	1,2376E-14	-13,907
Cu+2	5,1126E-11	2,6064E-11	-10,584
Cu2(OH)2+2	1,844E-14	9,4008E-15	-14,027
Cu2OH+3	4,9083E-19	1,0779E-19	-18,967
Cu3(OH)4+2	2,5799E-17	1,3152E-17	-16,881

CuCl+	4,9536E-13	4,1858E-13	-12,378
CuCl2 (aq)	5,0048E-16	5,0451E-16	-15,297
CuCl3-	4,0339E-20	3,4086E-20	-19,467
CuCl4-2 1	5,5945E-24	2,8521E-24	-23,545
CuCO3 (aq)	5,4008E-08	5,4443E-08	-7,264
CuF+	1,8458E-11	1,5597E-11	-10,807
CuHCO3+	9,956E-12	8,4128E-12	-11,075
CuHPO4 (aq)	5,8379E-12	5,8848E-12	-11,23
CuHSO4+	7,2092E-22	6,0917E-22	-21,215
CuOH+	6,5791E-10	5,5593E-10	-9,255
CuSCN+	2,1265E-12	1,7969E-12	-11,745
CuSO4 (aq)	7,7231E-13	7,7852E-13	-12,109
F-1	0,018831	0,015912	-1,798
Fe(CN)6-3	8,0469E-15	1,7672E-15	-14,753
Fe(CN)6-4	4,5348E-11	3,0633E-12	-11,514
Fe(OH)2 (aq)	9,5462E-11	9,6229E-11	-10,017
Fe(OH)2+	5,9037E-06	4,9885E-06	-5,302
Fe(OH)3-	4,6095E-12	3,895E-12	-11,409
Fe(OH)3 (aq)	1,7918E-06	1,8062E-06	-5,743
Fe(OH)4-	1,0882E-05	9,1955E-06	-5,036
Fe(SCN)2+	1,1106E-20	9,3848E-21	-20,028
Fe(SCN)3 (aq)	1,3092E-23	1,3198E-23	-22,88
Fe(SO4)2-	1,3706E-20	1,1582E-20	-19,936
Fe+2	3,7886E-07	1,9314E-07	-6,714
Fe+3	1,3457E-17	2,9553E-18	-17,529
Fe2(CN)6 (aq)	1,0724E-29	1,0811E-29	-28,966
Fe2(OH)2+4	1,036E-19	6,998E-21	-20,155
Fe3(OH)4+5	1,011E-21	1,4998E-23	-22,824
Fe3(OH)4+5	4,1557E-21	6,1651E-23	-22,21
FeCl	1,7554E-08	1,4833E-08	-7,829
FeCl+	1,3944E-09	1,1782E-09	-8,929
FeCl+2	1,0183E-18	5,1915E-19	-18,285
FeF+	5,8986E-08	4,9842E-08	-7,302
FeF+2	8,1091E-14	4,1341E-14	-13,384
FeF2+	2,7803E-11	2,3493E-11	-10,629
FeF3 (aq)	3,1193E-10	3,1444E-10	-9,502
FeH2PO4+	2,0688E-11	1,7481E-11	-10,757
FeH2PO4+2	1,981E-20	1,0099E-20	-19,996
FeHCO3+	1,472E-08	1,2439E-08	-7,905
FeHPO4 (aq)	1,2915E-08	1,3019E-08	-7,885
FeHPO4+	9,4508E-13	7,9858E-13	-12,098
FeOH+	3,9456E-08	3,334E-08	-7,477
FeOH+2	4,6981E-11	2,3951E-11	-10,621
FeOHSCN+	5,4529E-23	4,6077E-23	-22,337
FeSCN+	1,1544E-09	9,755E-10	-9,011
FeSCN+2	1,7009E-18	8,6713E-19	-18,062
FeSO4 (aq)	6,2279E-09	6,2779E-09	-8,202

FeSO4+	5,657E-18	4,7801E-18	-17,321
H+1	8,0011E-10	6,7608E-10	-9,17
H2CO3* (aq)	1,4744E-05	1,4862E-05	-4,828
H2Fe(CN)6-2	1,2337E-23	6,2896E-24	-23,201
H2PO4-	3,1807E-07	2,6877E-07	-6,571
H3PO4	2,1475E-14	2,1648E-14	-13,665
HCN (aq)	1,5217E-07	1,5339E-07	-6,814
HCO3-	0,0088531	0,0074808	-2,126
HF (aq)	1,204E-08	1,2137E-08	-7,916
HF2-	8,3109E-10	7,0226E-10	-9,153
HFe(CN)6-3	1,8422E-16	4,0457E-17	-16,393
HPO4-2	4,6258E-05	2,3583E-05	-4,627
HSCN (aq)	1,3179E-14	1,3285E-14	-13,877
HSO4-	8,1332E-12	6,8725E-12	-11,163
K+1	0,00048035	0,00040589	-3,392
K2Fe(CN)6-2	1,377E-08	7,0201E-09	-8,154
K2H2Fe(CN)6	6,7743E-24	6,8288E-24	-23,166
K2HPO4 (aq)	3,69E-11	3,7197E-11	-10,429
K2PO4-	3,7467E-13	3,166E-13	-12,499
K3HFe(CN)6	3,3672E-20	3,3943E-20	-19,469
KCl (aq)	2,1314E-06	2,1485E-06	-5,668
KF (aq)	2,9285E-06	2,9521E-06	-5,53
KFe(CN)6-2	3,7078E-17	1,8902E-17	-16,723
KFe(CN)6-3	1,1577E-12	2,5425E-13	-12,595
KH2PO4 (aq)	1,4508E-10	1,4625E-10	-9,835
KHFe(CN)6-2	7,1208E-12	3,6302E-12	-11,44
KHPO4-	6,1694E-08	5,2131E-08	-7,283
KOH (aq)	3,0341E-09	3,0584E-09	-8,514
KPO4-2	1,6247E-10	8,2829E-11	-10,082
KSO4-	4,0416E-07	3,4151E-07	-6,467
Mg+2	9,2771E-05	4,7295E-05	-4,325
Mg2CO3+2	6,0551E-09	3,0869E-09	-8,51
MgCl+	1,9722E-06	1,6665E-06	-5,778
MgCO3 (aq)	1,0914E-05	1,1002E-05	-4,959
MgF+	5,3084E-05	4,4855E-05	-4,348
MgFe(CN)6-	5,7079E-17	4,8232E-17	-16,317
MgFe(CN)6-2	1,4076E-12	7,1759E-13	-12,144
MgHCO3+	3,9552E-06	3,3421E-06	-5,476
MgHPO4 (aq)	5,3556E-07	5,3986E-07	-6,268
MgOH+	7,6792E-08	6,4889E-08	-7,188
MgPO4-	2,0008E-08	1,6907E-08	-7,772
MgSO4 (aq)	1,1868E-06	1,1964E-06	-5,922
Mn(CN)2 (aq)	5,9579E-19	6,0058E-19	-18,221
Mn(OH)4-2	8,6314E-20	4,4004E-20	-19,357
Mn+2	3,5152E-08	1,7921E-08	-7,747
Mn+3	1,4251E-31	3,1297E-32	-31,504
Mn2(OH)3+	1,5756E-12	1,3314E-12	-11,876

Mn2OH+3	5,4649E-17	1,2002E-17	-16,921
MnCl+	2,0505E-10	1,7327E-10	-9,761
MnCl2 (aq)	2,9552E-12	2,979E-12	-11,526
MnCl3-	9,3879E-15	7,9327E-15	-14,101
MnCN+	2,3127E-13	1,9542E-13	-12,709
MnCO3 (aq)	3,1606E-07	3,186E-07	-6,497
MnF+	8,3693E-09	7,072E-09	-8,15
MnHCO3+	2,7358E-09	2,3118E-09	-8,636
MnHPO4 (aq)	8,0087E-10	8,0731E-10	-9,093
MnO4-	1,347E-57	1,1382E-57	-56,944
MnO4-2	1,4649E-49	7,4682E-50	-49,127
MnOH+	2,1145E-10	1,7868E-10	-9,748
MnSCN+	9,5199E-11	8,0442E-11	-10,095
MnSO4 (aq)	4,1219E-10	4,1551E-10	-9,381
Na+1	0,024262	0,020501	-1,688
Na2Fe(CN)6-2	2,0449E-05	1,0425E-05	-4,982
Na2HPO4 (aq)	6,2195E-08	6,2695E-08	-7,203
Na2PO4-	2,0435E-09	1,7268E-09	-8,763
NaCl (aq)	0,0001176	0,00011854	-3,926
NaCO3-	0,00025122	0,00021228	-3,673
NaF (aq)	0,00025995	0,00026204	-3,582
NaFe(CN)6-3	4,1487E-11	9,1113E-12	-11,04
NaH2PO4 (aq)	7,3279E-09	7,3868E-09	-8,132
NaHCO3 (aq)	9,7496E-05	0,00009828	-4,008
NaHFe(CN)6-2	3,3104E-10	1,6877E-10	-9,773
NaHPO4-	4,8262E-06	4,0781E-06	-5,39
NaOH (aq)	1,0163E-07	1,0244E-07	-6,99
NaPO4-2	9,5785E-09	4,8832E-09	-8,311
NaSO4-	2,0607E-05	1,7413E-05	-4,759
OH-	5,1314E-06	4,336E-06	-5,363
PO4-3	4,8086E-08	1,056E-08	-7,976
SCN-1	0,00029275	0,00024737	-3,607
SO4-2	0,00030994	0,00015801	-3,801
Zn(CN)2 (aq)	2,5074E-12	2,5275E-12	-11,597
Zn(CN)3-	3,5713E-14	3,0177E-14	-13,52
Zn(CN)4-2	2,3555E-17	1,2009E-17	-16,921
Zn(CO3)2-2	1,3444E-08	6,8539E-09	-8,164
Zn(OH)2 (aq)	7,5465E-08	7,6072E-08	-7,119
Zn(OH)3-	4,2355E-10	3,579E-10	-9,446
Zn(OH)4-2	1,6553E-13	8,439E-14	-13,074
Zn(SCN)2 (aq)	1,3771E-14	1,3882E-14	-13,858
Zn(SCN)3-	4,9776E-18	4,2061E-18	-17,376
Zn(SCN)4-2	1,0095E-21	5,1464E-22	-21,288
Zn(SO4)2-2	2,5476E-13	1,2988E-13	-12,886
Zn+2	5,3549E-09	2,73E-09	-8,564
Zn2OH+3	1,2331E-17	2,7081E-18	-17,567
ZnCl+	7,9957E-11	6,7563E-11	-10,17

ZnCl2 (aq)	3,2497E-13	3,2758E-13	-12,485
ZnCl3-	3,816E-15	3,2245E-15	-14,492
ZnCl4-2	2,6904E-17	1,3716E-17	-16,863
ZnCO3 (aq)	5,5281E-08	5,5725E-08	-7,254
ZnF+	8,0444E-10	6,7974E-10	-9,168
ZnHCO3+	5,2264E-10	4,4162E-10	-9,355
ZnHPO4 (aq)	9,4703E-11	9,5465E-11	-10,02
ZnOH+	1,4009E-09	1,1837E-09	-8,927
ZnSCN+	1,9422E-11	1,6412E-11	-10,785
ZnSO4 (aq)	8,1637E-11	8,2294E-11	-10,085

Table de distribution des espèces (2002)

Component	% of total component concentration	Species name
PO4-3	0,09	PO4-3
	86,822	HPO4-2
	0,597	H2PO4-
	0,024	FeHPO4 (aq)
	0,038	MgPO4-
	1,005	MgHPO4 (aq)
	0,487	CaHPO4 (aq)
	1,607	CaPO4-
	9,058	NaHPO4-
	0,116	KHPO4-
	0,117	Na2HPO4 (aq)
	0,014	NaH2PO4 (aq)
	0,018	NaPO4-2
CO3-2	6,996	CO3-2
	89,014	HCO3-
	0,148	H2CO3* (aq)
	0,11	MgCO3 (aq)
	0,04	MgHCO3+
	0,026	CaHCO3+
	0,153	CaCO3 (aq)
	2,526	NaCO3-
	0,98	NaHCO3 (aq)
Fe+3	31,777	Fe(OH)2+
	9,645	Fe(OH)3 (aq)
	58,576	Fe(OH)4-
Cu+2	0,032	Cu+2
	0,418	CuOH+
	0,145	Cu(OH)3-
	0,27	Cu(OH)2 (aq)
	0,012	CuF+
	34,32	CuCO3 (aq)
	64,79	Cu(CO3)2-2
Cl-1	98,94	Cl-1
	0,017	MgCl+
	0,018	KCl (aq)
	1,017	NaCl (aq)
F-1	96,69	F-1
	0,121	AlF3 (aq)
	1,535	AlF4-
	0,273	MgF+
	0,031	CaF+
	1,335	NaF (aq)

	0,015KF (aq)
SO4-2	93,043SO4-2
	0,356MgSO4 (aq)
	0,292CaSO4 (aq)
	6,186NaSO4-
	0,121KSO4-
SCN-1	100SCN-1
CN-1	0,051CN-1
	99,756Na2Fe(CN)6-2
	0,067K2Fe(CN)6-2
	0,124HCN (aq)
Al+3	0,049Al(OH)3 (aq)
	36,26Al(OH)4-
	0,039AlF2+
	6,054AlF3 (aq)
	57,598AlF4-
Ca+2	69,881Ca+2
	6,797CaF+
	0,937CaCl+
	1,094CaSO4 (aq)
	0,292CaHPO4 (aq)
	0,964CaPO4-
	2,884CaHCO3+
	17,147CaCO3 (aq)
Mg+2	56,386Mg+2
	0,047MgOH+
	32,264MgF+
	1,199MgCl+
	0,721MgSO4 (aq)
	0,012MgPO4-
	0,326MgHPO4 (aq)
	6,633MgCO3 (aq)
	2,404MgHCO3+
Zn+2	3,501Zn+2
	8,788Zn(CO3)2-2
	0,916ZnOH+
	49,332Zn(OH)2 (aq)
	0,277Zn(OH)3-
	0,526ZnF+
	0,052ZnCl+
	0,053ZnSO4 (aq)
	0,013ZnSCN+
	0,062ZnHPO4 (aq)
	36,137ZnCO3 (aq)
	0,342ZnHCO3+
K+1	98,856K+1
	0,603KF (aq)

	0,439KCl (aq)
	0,083KSO4-
	0,013KHPO4-
Na+1	96,836Na+1
	0,163Na2Fe(CN)6-2
	1,038NaF (aq)
	0,469NaCl (aq)
	0,082NaSO4-
	0,019NaHPO4-
	1,003NaCO3-
	0,389NaHCO3 (aq)
Mn+3	100Mn+3
Fe+2	1,805Fe+2
	97,401Na2Fe(CN)6-2
	0,066K2Fe(CN)6-2
	0,084FeCl
	0,188FeOH+
	0,281FeF+
	0,03FeSO4 (aq)
	0,062FeHPO4 (aq)
	0,07FeHCO3+
Mn+2	9,656Mn+2
	86,818MnCO3 (aq)
	0,058MnOH+
	2,299MnF+
	0,056MnCl+
	0,113MnSO4 (aq)
	0,026MnSCN+
	0,22MnHPO4 (aq)
	0,752MnHCO3+

Index de saturation (2002)

Mineral	log IAP	Sat. Index	Stoichiometry				
Al(OH)3 (am)	11.185	-0.679	1Al+3	3H2O	-3H+1		
Al(OH)3 (Soil)	11.185	1.888	1Al+3	3H2O	-3H+1		
Al2O3	22.372	0.239	2Al+3	3H2O	-6H+1		
Al4(OH)10SO4	22.601	-0.099	-10H+1	4Al+3	1SO4-2	10H2O	
AlOHF2	-10.750	-11.157	1Al+3	2F-1	-1H+1	1H2O	
AlOHSO4	-10.955	-7.725	-1H+1	1Al+3	1SO4-2	1H2O	
Alunite	-4.946	-5.561	1K+1	3Al+3	2SO4-2	-6H+1	6H2O
Anhydrite	-8.301	-4.010	1Ca+2	1SO4-2			
Antlerite	1.125	-7.663	3Cu+2	4H2O	-4H+1	1SO4-2	
Aragonite	-7.950	0.313	1Ca+2	1CO3-2			
Artinite	6.237	-4.517	-2H+1	2Mg+2	1CO3-2	5H2O	
Atacamite	4.326	-3.961	2Cu+2	3H2O	-3H+1	1Cl-1	
Azurite	-20.313	-3.303	3Cu+2	2H2O	-2H+1	2CO3-2	
Bianchite	-12.368	-10.609	1Zn+2	1SO4-2	6H2O		
Birnessite	7.801	-10.290	-4H+1	-1E-1	1Mn+3	2H2O	
Bixbyite	-7.990	-8.540	-6H+1	2Mn+3	3H2O		
Boehmite	11.186	1.479	-3H+1	1Al+3	2H2O		
Brochantite	8.880	-8.288	4Cu+2	6H2O	-6H+1	1SO4-2	
Brucite	14.014	-4.180	1Mg+2	2H2O	-2H+1		
Ca3(PO4)2 (beta)	-29.452	-0.014	3Ca+2	2PO4-3			
Ca4H(PO4)3:3H2O	-51.099	-4.019	4Ca+2	1H+1	3PO4-3	3H2O	
CaCO3xH2O	-7.950	-0.887	1Ca+2	1CO3-2	1H2O		
CaHPO4	-21.646	-2.074	1Ca+2	1H+1	1PO4-3		
CaHPO4:2H2O	-21.647	-2.431	1Ca+2	1H+1	1PO4-3	2H2O	

Calcite	-7.950	0.453	1Ca+2	1CO3-2										
Chalcanthite	-14.388	-11.690	1Cu+2	1SO4-2	5H2O									
Cryolite	-32.178	2.027	3Na+1	1Al+3	6F-1									
Cu(OH)2	7.755	-2.044	1Cu+2	2H2O	-2H+1									
Cu3(PO4)2	-47.704	-10.854	3Cu+2	2PO4-3										
Cu3(PO4)2:3 H2O	-47.706	-12.586	3Cu+2	2PO4-3	3H2O									
CuCO3	-14.034	-2.534	1Cu+2	1CO3-2										
CuF2	-14.181	-15.937	1Cu+2	2F-1										
CuF2:2H2O	-14.181	-9.778	1Cu+2	2F-1	2H2O									
CuOCuSO4	-6.630	-18.255	-2H+1	2Cu+2	1H2O	1SO4-2								
Cupric Ferrite	27.715	19.710	-8H+1	1Cu+2	2Fe+3	4H2O								
CuSO4	-14.385	-18.025	1Cu+2	1SO4-2										
Diaspore	11.186	3.324	-3H+1	1Al+3	2H2O									
Dolomite (disordered)	-15.725	0.370	1Ca+2	1Mg+2	2CO3-2									
Dolomite (ordered)	-15.725	0.986	1Ca+2	1Mg+2	2CO3-2									
Epsomite	-8.130	-5.892	1Mg+2	1SO4-2	7H2O									
Ettringite	38.974	-21.566	6Ca+2	2Al+3	3SO4-2	-12H+1	38H2O							
FCO3-Apatite	-90.036	25.945	9.316 Ca+2	.36 Na+1	.144 Mg+2	4.8	PO4-3	1.2	CO3-2	2.48	F-1			
Fe(OH)2 (am)	11.625	-2.744	1Fe+2	2H2O	-2H+1									
Fe(OH)2 (c)	11.625	-1.265	1Fe+2	-2H+1	2H2O									
Fe(OH)2.7Cl.3	6.624	9.664	-2.7 H+1	1Fe+3	2.7 H2O	.3	Cl-1							
Fe(OH)3(s)	9.979	13.179	1Fe+3	3H2O	-3H+1									
Fe2(SO4)3	-46.463	-45.050	2Fe+3	3SO4-2										
Fe3(Fe(CN)6)2(s)	-142.470	-315.470	3Fe+2	2Fe+3	12CN-1									
Fe3(OH)8	31.583	11.361	-8H+1	2Fe+3	1Fe+2	8H2O								
Fe4(Fe(CN)6)	-221.163	-478.163	4Fe+3	3Fe+2	18CN-1									

3(s)							
Ferrihydrite	9.979	5.816	1Fe+3	3H2O	-3H+1		
Ferrihydrite (aged)	9.979	7.289	1Fe+3	-3H+1	3H2O		
Fluorite	-8.096	2.519	1Ca+2	2F-1			
Gibbsite (C)	11.185	2.438	1Al+3	3H2O	-3H+1		
Goethite	9.980	8.907	1Fe+3	2H2O	-3H+1		
Goslarite	-12.368	-10.221	1Zn+2	1SO4-2	7H2O		
Gypsum	-8.302	-3.682	1Ca+2	1SO4-2	2H2O		
Halite	-3.703	-5.217	1Na+1	1Cl-1			
Hausmannite	55.371	-9.698	3Mn+2	4H2O	-8H+1	-2E-1	
Hematite	19.960	20.140	2Fe+3	3H2O	-6H+1		
Hercynite	33.998	8.093	-8H+1	1Fe+2	2Al+3	4H2O	
H-Jarosite	-14.344	-11.096	3Fe+3	2SO4-2	-5H+1	7H2O	
Huntite	-31.276	-2.342	3Mg+2	1Ca+2	4CO3-2		
Hydromagnesite	-17.089	-10.419	5Mg+2	4CO3-2	-2H+1	6H2O	
Hydroxyapatite	-37.258	7.075	5Ca+2	3PO4-3	1H2O	-1H+1	
Hydrozincite	5.298	-5.671	5Zn+2	2CO3-2	-6H+1	6H2O	
K-Alum	-27.323	-21.863	1K+1	1Al+3	2SO4-2	12H2O	
KCl	-5.406	-6.306	1K+1	1Cl-1			
KCN (cubic)	-10.664	-11.968	1CN-1	1K+1			
K-Jarosite	-8.565	1.458	1K+1	3Fe+3	2SO4-2	-6H+1	6H2O
Langite	8.880	-10.197	-6H+1	4Cu+2	7H2O	1SO4-2	
Lepidocrocite	9.980	8.609	-3H+1	1Fe+3	2H2O		
Lime	13.840	-20.720	-2H+1	1Ca+2	1H2O		
Maghemite	19.960	13.574	-6H+1	2Fe+3	3H2O		
Magnesioferrite	33.974	14.438	-8H+1	1Mg+2	2Fe+3	4H2O	
Magnesite	-7.775	-0.123	1Mg+2	1CO3-2			

Magnetite	31.585	26.182	-8H+1	2Fe+3	1Fe+2	4H2O	
Malachite	-6.279	-1.234	2Cu+2	2H2O	-2H+1	1CO3-2	
Manganite	22.389	-2.951	1Mn+2	2H2O	-3H+1	-1E-1	
Melanothallite	-14.613	-21.479	1Cu+2	2Cl-1			
Melanterite	-10.519	-8.113	1Fe+2	1SO4-2	7H2O		
Mg(OH)2 (active)	14.014	-4.780	1Mg+2	2H2O	-2H+1		
Mg2(OH)3Cl:4H2O	16.842	-9.158	2Mg+2	1Cl-1	-3H+1	7H2O	
Mg3(PO4)2	-28.928	-5.648	3Mg+2	2PO4-3			
MgCO3:5H2O	-7.778	-3.238	1Mg+2	1CO3-2	5H2O		
MgF2	-7.922	0.111	1Mg+2	2F-1			
MgHPO4:3H2O	-21.473	-3.298	1Mg+2	1H+1	1PO4-3	3H2O	
Mirabilite	-7.182	-5.306	2Na+1	1SO4-2	10H2O		
Mn2(SO4)3	-74.413	-70.270	2Mn+3	3SO4-2			
Mn3(PO4)2	-39.193	-15.280	3Mn+2	2PO4-3			
Mn3[Fe(CN)6]2	-145.567	-40.167	3Mn+2	2Fe+3	12CN-1		
MnCl2:4H2O	-11.778	-14.597	1Mn+2	2Cl-1	4H2O		
MnCO3 (am)	-11.197	-0.697	1Mn+2	1CO3-2			
MnHPO4	-24.893	0.507	1Mn+2	1PO4-3	1H+1		
MnSO4	-11.548	-14.753	1Mn+2	1SO4-2			
NaCN (cubic)	-8.961	-10.553	1CN-1	1Na+1			
NaF	-3.487	-2.989	1Na+1	1F-1			
Na-Jarosite	-6.862	-2.844	1Na+1	3Fe+3	2SO4-2	-6H+1	6H2O
Natron	-6.831	-4.888	2Na+1	1CO3-2	10H2O		
Nesquehonite	-7.777	-3.339	1Mg+2	1CO3-2	3H2O		
Nsutite	7.801	-9.703	-4H+1	-1E-1	1Mn+3	2H2O	
Periclase	14.014	-9.021	-2H+1	1Mg+2	1H2O		

Portlandite	13.839	-10.099	1Ca+2	2H2O	-2H+1	
Pyrochroite	10.592	-5.532	1Mn+2	2H2O	-2H+1	
Pyrolusite	34.185	-9.804	1Mn+2	2H2O	-4H+1	-2E-1
Rhodochrosite	-11.197	-0.215	1Mn+2	1CO3-2		
Siderite	-10.164	0.356	1Fe+2	1CO3-2		
Smithsonite	-12.014	-1.150	1Zn+2	1CO3-2		
Spinel	36.387	-4.184	-8H+1	1Mg+2	2Al+3	4H2O
Strengite	-25.507	0.804	1Fe+3	1PO4-3	2H2O	
Tenorite(am)	7.756	-1.357	1Cu+2	1H2O	-2H+1	
Tenorite(c)	7.756	-0.507	1Cu+2	-2H+1	1H2O	
Thenardite	-7.178	-7.587	2Na+1	1SO4-2		
Thermonatrite	-6.827	-7.565	2Na+1	1CO3-2	1H2O	
Vaterite	-7.950	-0.117	1Ca+2	1CO3-2		
Vivianite	-36.099	1.710	3Fe+2	2PO4-3	8H2O	
Zincite	9.776	-2.314	1Zn+2	1H2O	-2H+1	
Zincosite	-12.365	-17.087	1Zn+2	1SO4-2		
Zn metal	-13.817	-41.077	1Zn+2	2E-1		
Zn(OH)2 (am)	9.775	-3.520	1Zn+2	2H2O	-2H+1	
Zn(OH)2 (beta)	9.775	-2.776	1Zn+2	2H2O	-2H+1	
Zn(OH)2 (delta)	9.775	-2.069	1Zn+2	-2H+1	2H2O	
Zn(OH)2 (epsilon)	9.775	-2.513	1Zn+2	2H2O	-2H+1	
Zn(OH)2 (gamma)	9.775	-2.744	1Zn+2	2H2O	-2H+1	
Zn2(OH)2SO4	-2.590	-10.090	-2H+1	2Zn+2	2H2O	1SO4-2
Zn2(OH)3Cl	8.366	-6.825	2Zn+2	3H2O	-3H+1	1Cl-1
Zn2Fe(CN)6	-67.476	-16.396	2Zn+2	1Fe+2	6CN-1	
Zn3(PO4)2:4	-41.646	-6.226	3Zn+2	2PO4-3	4H2O	

H2O								
Zn3O(SO4)2	-14.955	-36.344	-2H+1	3Zn+2		2SO4-2	1H2O	
Zn4(OH)6SO4	16.961	-11.439	-6H+1	4Zn+2		6H2O	1SO4-2	
Zn5(OH)8Cl2	26.508	-11.992	-8H+1	5Zn+2		8H2O	2Cl-1	
Zn-Al LDH	19.841	0.011	2Zn+2	1Al+3	.5	CO3-2	-6H+1	6H2O
ZnCl2	-12.593	-20.339	1Zn+2	2Cl-1				
ZnCO3	-12.014	-1.214	1Zn+2	1CO3-2				
ZnCO3:1H2O	-12.014	-1.754	1Zn+2	1CO3-2		1H2O		
ZnF2	-12.160	-12.199	1Zn+2	2F-1				
ZnSO4:1H2O	-12.366	-12.150	1Zn+2	1SO4-2		1H2O		

ANNEXE IV

Fichiers VMINTEQ pour PZ3

Table des concentrations (2003)

	Concentration	Activity	Log activity
Al DOM1	2,1025E-10	2,0957E-10	-9,679
Al(OH)2+	5,4603E-10	5,033E-10	-9,298
Al(OH)3 (aq)	3,5214E-10	3,5264E-10	-9,453
Al(OH)4-	8,2544E-10	7,6084E-10	-9,119
Al(SO4)2-	4,3073E-16	3,9703E-16	-15,401
Al+3	9,0365E-12	4,3402E-12	-11,362
Al2(OH)2+4	8,1778E-18	2,2204E-18	-17,654
Al2(OH)2CO3+2	9,0067E-12	6,5015E-12	-11,187
Al2PO4+3	2,0178E-17	9,6915E-18	-17,014
Al3(OH)4+5	3,2853E-22	4,2842E-23	-22,368
AlCl+2	3,1731E-16	2,2905E-16	-15,64
AlF+2	5,3302E-08	3,8476E-08	-7,415
AlF2+	1,5343E-05	1,4143E-05	-4,849
AlF3 (aq)	0,00015607	0,00015629	-3,806
AlF4-	8,0558E-05	7,4254E-05	-4,129
AlHPO4+	5,1793E-12	4,774E-12	-11,321
AlOH+2	1,1898E-10	8,5889E-11	-10,066
AlSO4+	5,2416E-13	4,8314E-13	-12,316
Ca DOM1	1,3485E-05	0,0000128	-4,893
Ca+2	7,3273E-05	5,2892E-05	-4,277
Ca2Fe(CN)6 (aq)	1,224E-23	1,2257E-23	-22,912
CaCl+	1,7266E-08	1,5915E-08	-7,798
CaCO3 (aq)	4,9102E-08	4,9172E-08	-7,308
CaF+	5,7088E-07	5,2621E-07	-6,279
CaFe(CN)6-	5,2896E-28	4,8757E-28	-27,312
CaFe(CN)6-2	9,5351E-21	6,8829E-21	-20,162
CaH2PO4+	1,1592E-10	1,0685E-10	-9,971
CaHCO3+	2,1959E-06	2,0241E-06	-5,694
CaHPO4 (aq)	6,5263E-10	6,5355E-10	-9,185
CaOH+	1,6468E-11	1,5179E-11	-10,819
CaPO4-	6,9164E-12	6,3752E-12	-11,196
CaSO4 (aq)	2,2507E-07	2,2539E-07	-6,647
Cl-1	0,00014054	0,00012955	-3,888
CN-1	1,7566E-09	1,6192E-09	-8,791
CO3-2	9,3261E-07	6,732E-07	-6,172
DOM1	7,1965E-05	3,7991E-05	-4,42
F-1	0,0010285	0,00094797	-3,023
Fe DOM1	9,7711E-16	9,7393E-16	-15,011
Fe(CN)6-3	2,9522E-26	1,4179E-26	-25,848
Fe(CN)6-4	1,1861E-19	3,2204E-20	-19,492
Fe(OH)2 (aq)	4,9718E-14	4,9788E-14	-13,303

Fe(OH)2+	1,4771E-12	1,3615E-12	-11,866
Fe(OH)3-	7,543E-18	6,9527E-18	-17,158
Fe(OH)3 (aq)	1,8351E-15	1,8377E-15	-14,736
Fe(OH)4-	4,2039E-17	3,8749E-17	-16,412
Fe(SO4)2-	5,2078E-24	4,8003E-24	-23,319
Fe+2	8,9098E-06	6,4316E-06	-5,192
Fe+3	1,328E-19	6,3783E-20	-19,195
Fe2(CN)6 (aq)	2,2572E-42	2,2604E-42	-41,646
Fe2(OH)2+4	1,5914E-28	4,3209E-29	-28,364
Fe3(OH)4+5	1,8024E-37	2,3504E-38	-37,629
Fe3(OH)4+5	6,2883E-37	8,2003E-38	-37,086
FeCl+	5,7034E-10	5,2571E-10	-9,279
FeCl+	7,1801E-09	6,6183E-09	-8,179
FeCl+2	2,2036E-22	1,5907E-22	-21,798
FeF+	1,0728E-07	9,8881E-08	-7,005
FeF+2	7,5515E-17	5,4511E-17	-16,264
FeF2+	2,0377E-15	1,8783E-15	-14,726
FeF3 (aq)	1,5414E-15	1,5436E-15	-14,811
FeH2PO4+	2,806E-10	2,5864E-10	-9,587
FeH2PO4+2	1,3416E-22	9,6847E-23	-22,014
FeHCO3+	2,5168E-07	2,3199E-07	-6,635
FeHPO4 (aq)	6,5175E-10	6,5267E-10	-9,185
FeHPO4+	2,6071E-17	2,4031E-17	-16,619
FeOH+	4,7002E-09	4,3324E-09	-8,363
FeOH+2	2,5869E-15	1,8674E-15	-14,729
FeSO4 (aq)	2,8813E-08	2,8854E-08	-7,54
FeSO4+	1,0173E-20	9,3768E-21	-20,028
H DOM1	5,8678E-07	4,5063E-07	-6,346
H+1	2,1647E-07	1,9953E-07	-6,7
H2CO3* (aq)	0,0022524	0,0022556	-2,647
H2Fe(CN)6-2	8,0993E-27	5,8465E-27	-26,233
H2PO4-	1,2382E-07	1,1413E-07	-6,943
H3PO4	2,7608E-12	2,7647E-12	-11,558
HCN (aq)	1,2283E-06	0,00000123	-5,91
HCO3-	0,0043314	0,0039925	-2,399
HF (aq)	2,2034E-07	2,2066E-07	-6,656
HF2-	8,3376E-10	7,6852E-10	-9,114
HFe(CN)6-3	2,6266E-22	1,2615E-22	-21,899
HPO4-2	4,7366E-08	3,4191E-08	-7,466
HSO4-	3,1109E-10	2,8674E-10	-9,543
K+1	0,00023003	0,00021203	-3,674
K2Fe(CN)6-2	6,8618E-17	4,9532E-17	-16,305
K2H2Fe(CN)6	4,1906E-27	4,1965E-27	-26,377
K2HPO4 (aq)	1,526E-14	1,5282E-14	-13,816

K2PO4-	4,7815E-19	4,4074E-19	-18,356
K3HFe(CN)6	3,687E-26	3,6922E-26	-25,433
KCl (aq)	1,4867E-08	1,4888E-08	-7,827
KF (aq)	9,1745E-08	9,1875E-08	-7,037
KFe(CN)6-2	1,1031E-28	7,9624E-29	-28,099
KFe(CN)6-3	2,9372E-21	1,4107E-21	-20,851
KH2PO4 (aq)	3,3897E-11	3,3945E-11	-10,469
KHFe(CN)6-2	2,0047E-17	1,4471E-17	-16,84
KHPO4-	4,448E-11	4,0999E-11	-10,387
KOH (aq)	6,2259E-12	6,2347E-12	-11,205
KPO4-2	3,1754E-16	2,2922E-16	-15,64
KSO4-	2,7045E-08	2,4929E-08	-7,603
Mg DOM1	5,8648E-06	5,5667E-06	-5,254
Mg+2	0,00031866	0,00023003	-3,638
Mg2CO3+2	1,9198E-10	1,3858E-10	-9,858
MgCl+	1,1901E-07	1,097E-07	-6,96
MgCO3 (aq)	1,0406E-07	1,042E-07	-6,982
MgF+	1,4569E-05	1,3429E-05	-4,872
MgFe(CN)6-	2,0574E-27	1,8964E-27	-26,722
MgFe(CN)6-2	5,2386E-20	3,7815E-20	-19,422
MgHCO3+	9,4897E-06	8,7471E-06	-5,058
MgHPO4 (aq)	3,9179E-09	3,9234E-09	-8,406
MgOH+	1,363E-09	1,2564E-09	-8,901
MgPO4-	4,7018E-13	4,3339E-13	-12,363
MgSO4 (aq)	7,9755E-07	7,9868E-07	-6,098
Mn(CN)2 (aq)	4,0339E-30	4,0396E-30	-29,394
Mn(OH)4-2	5,9021E-38	4,2605E-38	-37,371
Mn+2	1,8168E-16	1,3114E-16	-15,882
Mn+3	3,6403E-43	1,7484E-43	-42,757
Mn2(OH)3+	3,0176E-36	2,7815E-36	-35,556
Mn2OH+3	4,5385E-36	2,1798E-36	-35,662
MnCl+	1,8432E-20	1,6989E-20	-19,77
MnCl2 (aq)	3,9083E-24	3,9138E-24	-23,407
MnCl3-	1,515E-28	1,3965E-28	-27,855
MnCN+	4,7036E-23	4,3355E-23	-22,363
MnCO3 (aq)	4,4185E-18	4,4248E-18	-17,354
MnF+	3,4388E-18	3,1697E-18	-17,499
MnHCO3+	1,0009E-17	9,2261E-18	-17,035
MnHPO4 (aq)	8,882E-21	8,8946E-21	-20,051
MnO4-	8,336E-101	7,684E-101	-100,114
MnO4-2	9,0623E-90	6,5416E-90	-89,184
MnOH+	5,5916E-21	5,1541E-21	-20,288
MnSO4 (aq)	4,1982E-19	4,2042E-19	-18,376
Na+1	0,0046826	0,0043162	-2,365

Na2Fe(CN)6-2	1,6551E-14	1,1948E-14	-13,923
Na2HPO4 (aq)	4,1779E-12	4,1838E-12	-11,378
Na2PO4-	4,2361E-16	3,9046E-16	-15,408
NaCl (aq)	3,2729E-07	3,2775E-07	-6,484
NaCO3-	8,7429E-08	8,0587E-08	-7,094
NaF (aq)	3,3826E-06	3,3874E-06	-5,47
NaFe(CN)6-3	4,2412E-20	2,037E-20	-19,691
NaH2PO4 (aq)	6,9002E-10	6,91E-10	-9,161
NaHCO3 (aq)	1,0777E-05	1,0792E-05	-4,967
NaHFe(CN)6-2	3,7561E-16	2,7113E-16	-15,567
NaHPO4-	1,4024E-09	1,2926E-09	-8,889
NaOH (aq)	8,4896E-11	8,5016E-11	-10,07
NaPO4-2	7,4133E-15	5,3513E-15	-14,272
NaSO4-	5,3937E-07	4,9716E-07	-6,304
OH-	1,8357E-08	1,6921E-08	-7,772
PO4-3	1,1217E-13	5,3874E-14	-13,269
S	2,8069E-05	2,8109E-05	-4,551
SO4-2	2,9611E-05	2,1375E-05	-4,67

Table de distribution des espèces (2003)

Component	% of total component concentration	Species name
Mg+2	91,147	Mg+2
	1,677	Mg DOM1
	4,167	MgF+
	0,034	MgCl+
	0,228	MgSO4 (aq)
	0,03	MgCO3 (aq)
	2,714	MgHCO3+
Fe+2	95,692	Fe+2
	0,077	FeCl+
	0,05	FeOH+
	1,152	FeF+
	0,309	FeSO4 (aq)
	2,703	FeHCO3+
Na+1	99,678	Na+1
	0,072	NaF (aq)
	0,011	NaSO4-
	0,229	NaHCO3 (aq)
K+1	99,942	K+1
	0,04	KF (aq)
	0,012	KSO4-
Ca+2	81,58	Ca+2
	15,014	Ca DOM1
	0,636	CaF+
	0,019	CaCl+
	0,251	CaSO4 (aq)
	2,445	CaHCO3+
	0,055	CaCO3 (aq)
Mn+3	100	Mn+3
CO3-2	0,014	CO3-2
	65,551	HCO3-
	34,087	H2CO3* (aq)
	0,144	MgHCO3+
	0,033	CaHCO3+
	0,163	NaHCO3 (aq)
DOM1	78,306	DOM1
	0,638	H DOM1
	14,674	Ca DOM1

	6,382	Mg DOM1
Cl-1	99,655	Cl-1
	0,012	CaCl+
	0,084	MgCl+
	0,011	KCl (aq)
	0,232	NaCl (aq)
F-1	55,04	F-1
	0,012	HF (aq)
	1,642	AlF2+
	25,057	AlF3 (aq)
	17,245	AlF4-
	0,78	MgF+
	0,031	CaF+
	0,181	NaF (aq)
SO4-2	94,818	SO4-2
	0,092	FeSO4 (aq)
	2,554	MgSO4 (aq)
	0,721	CaSO4 (aq)
	1,727	NaSO4-
	0,087	KSO4-
PO4-3	26,461	HPO4-2
	69,176	H2PO4-
	0,157	FeH2PO4+
	0,364	FeHPO4 (aq)
	2,189	MgHPO4 (aq)
	0,365	CaHPO4 (aq)
	0,065	CaH2PO4+
	0,783	NaHPO4-
	0,025	KHPO4-
	0,019	KH2PO4 (aq)
	0,385	NaH2PO4 (aq)
CN-1	0,143	CN-1
	99,857	HCN (aq)
S	100	S
Al+3	0,021	AlF+2
	6,088	AlF2+
	61,926	AlF3 (aq)
	31,964	AlF4-
Fe+3	0,066	Fe DOM1
	0,174	FeOH+2
	99,386	Fe(OH)2+
	0,123	Fe(OH)3 (aq)
	0,137	FeF2+
	0,104	FeF3 (aq)

Mn+2	90,84	Mn+2
	2,209	MnCO3 (aq)
	1,719	MnF+
	0,21	MnSO4 (aq)
	5,005	MnHCO3+

Index de saturation (2003)

Mineral	log IAP	Sat. Index	Stoichiometry				
Al(OH)3 (am)	8.737	-3.007	1 Al+3	3 H2O	-3 H+1		
Al(OH)3 (Soil)	8.737	-0.445	1 Al+3	3 H2O	-3 H+1		
Al2O3	17.475	-4.376	2 Al+3	3 H2O	-6 H+1		
Al4(OH)10SO4	16.879	-5.821	-10 H+1	4 Al+3	1 SO4-2	10 H2O	
AlOHF2	-10.709	-11.116	1 Al+3	2 F-1	-1 H+1	1 H2O	
AlOHSO4	-9.333	-6.103	-1 H+1	1 Al+3	1 SO4-2	1 H2O	
Alunite	-6.902	-7.287	1 K+1	3 Al+3	2 SO4-2	-6 H+1	6 H2O
Anhydrite	-8.947	-4.648	1 Ca+2	1 SO4-2			
Aragonite	-10.448	-2.176	1 Ca+2	1 CO3-2			
Artinite	-0.049	-10.671	-2 H+1	2 Mg+2	1 CO3-2	5 H2O	
Birnessite	-16.566	-34.657	-4 H+1	-1 E-1	1 Mn+3	2 H2O	
Bixbyite	-45.315	-45.729	-6 H+1	2 Mn+3	3 H2O		
Boehmite	8.737	-0.841	-3 H+1	1 Al+3	2 H2O		
Brucite	9.762	-8.308	1 Mg+2	2 H2O	-2 H+1		
Ca3(PO4)2 (beta)	-39.367	-9.988	3 Ca+2	2 PO4-3			
Ca4H(PO4)3:3H2O	-63.613	-16.533	4 Ca+2	1 H+1	3 PO4-3	3 H2O	
CaCO3xH2O	-10.449	-3.377	1 Ca+2	1 CO3-2	1 H2O		
CaHPO4	-24.245	-4.707	1 Ca+2	1 H+1	1 PO4-3		
CaHPO4:2H2O	-24.245	-5.055	1 Ca+2	1 H+1	1 PO4-3	2 H2O	
Calcite	-10.448	-2.036	1 Ca+2	1 CO3-2			
Cryolite	-36.596	-2.433	3 Na+1	1 Al+3	6 F-1		
Diaspore	8.737	0.988	-3 H+1	1 Al+3	2 H2O		
Dolomite (disordered)	-20.259	-4.113	1 Ca+2	1 Mg+2	2 CO3-2		
Dolomite	-20.259	-3.504	1 Ca+2	1 Mg+2	2 CO3-2		

(ordered)															
Epsomite	-8.309	-6.084	1	Mg+2	1	SO4-2	7	H2O							
Ettringite	18.002	-42.118	6	Ca+2	2	Al+3	3	SO4-2	-12	H+1	38	H2O			
FCO3-Apatite	-119.809	-4.008	9.316	Ca+2	.36	Na+1	.144	Mg+2	4.8	PO4-3	1.2	CO3-2	2.48	F-1	
Fe(OH)2 (am)	8.208	-6.061	1	Fe+2	2	H2O	-2	H+1							
Fe(OH)2 (c)	8.208	-4.682	1	Fe+2	-2	H+1	2	H2O							
Fe(OH)2.7Cl.3	-2.272	0.768	-2.7	H+1	1	Fe+3	2.7	H2O	.3	Cl-1					
Fe(OH)3	0.904	4.104	1	Fe+3	3	H2O	-3	H+1							
Fe2(SO4)3	-52.401	-50.724	2	Fe+3	3	SO4-2									
Fe3(Fe(CN)6)2	-159.454	-332.454	3	Fe+2	2	Fe+3	12	CN-1							
Fe3(OH)8	10.017	-10.205	-8	H+1	2	Fe+3	1	Fe+2	8	H2O					
Ferrihydrite	0.904	-3.149	1	Fe+3	3	H2O	-3	H+1							
Ferrihydrite (aged)	0.904	-1.786	1	Fe+3	-3	H+1	3	H2O							
Fluorite	-10.323	0.279	1	Ca+2	2	F-1									
Gibbsite (C)	8.737	0.105	1	Al+3	3	H2O	-3	H+1							
Goethite	0.905	-0.102	1	Fe+3	2	H2O	-3	H+1							
Gypsum	-8.947	-4.328	1	Ca+2	1	SO4-2	2	H2O							
Halite	-6.252	-7.771	1	Na+1	1	Cl-1									
Hausmannite	4.736	-59.874	3	Mn+2	4	H2O	-8	H+1	-2	E-1					
Hematite	1.809	2.130	2	Fe+3	3	H2O	-6	H+1							
Hercynite	25.683	0.121	-8	H+1	1	Fe+2	2	Al+3	4	H2O					
H-Jarosite	-33.427	-29.935	3	Fe+3	2	SO4-2	-5	H+1	7	H2O					
Huntite	-39.879	-10.827	3	Mg+2	1	Ca+2	4	CO3-2							
Hydromagnesite	-29.479	-22.570	5	Mg+2	4	CO3-2	-2	H+1	6	H2O					
Hydroxyapatite	-54.489	-10.156	5	Ca+2	3	PO4-3	1	H2O	-1	H+1					
K-Alum	-24.377	-18.950	1	K+1	1	Al+3	2	SO4-2	12	H2O					
KCl	-7.561	-8.461	1	K+1	1	Cl-1									
KCN (cubic)	-12.464	-13.782	1	CN-1	1	K+1									

K-Jarosite	-30.400	-20.266	1 K+1	3 Fe+3	2 SO4-2	-6 H+1	6 H2O
Lepidocrocite	0.905	-0.466	-3 H+1	1 Fe+3	2 H2O		
Lime	9.123	-25.225	-2 H+1	1 Ca+2	1 H2O		
Maghemite	1.809	-4.577	-6 H+1	2 Fe+3	3 H2O		
Magnesioferrite	11.571	-7.660	-8 H+1	1 Mg+2	2 Fe+3	4 H2O	
Magnesite	-9.810	-2.180	1 Mg+2	1 CO3-2			
Magnetite	10.017	4.842	-8 H+1	2 Fe+3	1 Fe+2	4 H2O	
Manganite	3.609	-21.731	1 Mn+2	2 H2O	-3 H+1	-1 E-1	
Melanterite	-9.862	-7.479	1 Fe+2	1 SO4-2	7 H2O		
Mg(OH)2 (active)	9.762	-9.032	1 Mg+2	2 H2O	-2 H+1		
Mg2(OH)3Cl:4H2O	8.935	-17.065	2 Mg+2	1 Cl-1	-3 H+1	7 H2O	
Mg3(PO4)2	-37.452	-14.172	3 Mg+2	2 PO4-3			
MgCO3:5H2O	-9.810	-5.270	1 Mg+2	1 CO3-2	5 H2O		
MgF2	-9.685	-1.643	1 Mg+2	2 F-1			
MgHPO4:3H2O	-23.607	-5.432	1 Mg+2	1 H+1	1 PO4-3	3 H2O	
Mirabilite	-9.401	-7.611	2 Na+1	1 SO4-2	10 H2O		
Mn2(SO4)3	-99.525	-95.204	2 Mn+3	3 SO4-2			
Mn3(PO4)2	-74.184	-50.282	3 Mn+2	2 PO4-3			
Mn3[Fe(CN)6]2	-191.526	-86.126	3 Mn+2	2 Fe+3	12 CN-1		
MnCl2:4H2O	-23.658	-26.465	1 Mn+2	2 Cl-1	4 H2O		
MnCO3 (am)	-22.054	-11.554	1 Mn+2	1 CO3-2			
MnHPO4	-35.851	-10.451	1 Mn+2	1 PO4-3	1 H+1		
MnSO4	-20.552	-23.687	1 Mn+2	1 SO4-2			
NaCN (cubic)	-11.156	-12.749	1 CN-1	1 Na+1			
NaF	-5.388	-4.891	1 Na+1	1 F-1			
Na-Jarosite	-29.091	-24.926	1 Na+1	3 Fe+3	2 SO4-2	-6 H+1	6 H2O
Natron	-10.902	-9.031	2 Na+1	1 CO3-2	10 H2O		
Nesquehonite	-9.810	-5.346	1 Mg+2	1 CO3-2	3 H2O		

Nsutite	-16.566	-34.070	-4 H+1	-1 E-1	1 Mn+3	2 H2O
Periclase	9.762	-13.108	-2 H+1	1 Mg+2	1 H2O	
Portlandite	9.123	-14.674	1 Ca+2	2 H2O	-2 H+1	
Pyrochroite	-2.482	-18.501	1 Mn+2	2 H2O	-2 H+1	
Pyrolusite	9.700	-33.992	1 Mn+2	2 H2O	-4 H+1	-2 E-1
Rhodochrosite	-22.054	-11.070	1 Mn+2	1 CO3-2		
Siderite	-11.364	-0.836	1 Fe+2	1 CO3-2		
Spinel	27.237	-12.910	-8 H+1	1 Mg+2	2 Al+3	4 H2O
Strengite	-32.464	-6.144	1 Fe+3	1 PO4-3	2 H2O	
Thenardite	-9.400	-9.799	2 Na+1	1 SO4-2		
Thermonatrite	-10.902	-11.628	2 Na+1	1 CO3-2	1 H2O	
Vaterite	-10.448	-2.606	1 Ca+2	1 CO3-2		
Vivianite	-42.113	-4.310	3 Fe+2	2 PO4-3	8 H2O	

Table des concentrations (2002)

	Concentration	Activity	Log activity
Al DOM1	4,7778E-07	4,7266E-07	-6,325
Al(OH)2+	0,00001392	1,0634E-05	-4,973
Al(OH)3 (aq)	2,1053E-06	2,1797E-06	-5,662
Al(OH)4-	1,9598E-06	1,497E-06	-5,825
Al(SO4)2-	7,8028E-07	5,9604E-07	-6,225
Al+3	1,2424E-05	1,1004E-06	-5,958
Al2(OH)2+4	9,6407E-07	1,2959E-08	-7,887
Al2(OH)2CO3+2	0,00080638	0,00027457	-3,561
Al3(OH)4+5	4,9138E-06	5,8501E-09	-8,233
AlCl+2	1,3158E-07	4,4805E-08	-7,349
AlF+2	0,0002339	7,9644E-05	-4,099
AlF2+	0,0003134	0,0002394	-3,621
AlF3 (aq)	0,00002102	2,1763E-05	-4,662
AlF4-	1,1143E-07	8,5118E-08	-7,07
AlOH+2	1,8911E-05	6,4394E-06	-5,191
AlSCN+2	6,487E-22	2,2088E-22	-21,656
AlSO4+	1,2246E-05	9,3547E-06	-5,029
Ca DOM1	2,6128E-06	2,1991E-06	-5,658
Ca+2	0,003	0,0010215	-2,991
Ca2Fe(CN)6 (aq)	2,9169E-24	3,0201E-24	-23,52
CaCl+	0,00030823	0,00023545	-3,628
CaCO3 (aq)	5,7644E-09	5,9682E-09	-8,224
CaF+	1,068E-07	8,1586E-08	-7,088
CaFe(CN)6-	3,7984E-22	2,9015E-22	-21,537
CaFe(CN)6-2	2,5642E-22	8,7311E-23	-22,059
CaHCO3+	1,0019E-06	7,6534E-07	-6,116
CaOH+	1,1021E-10	8,4191E-11	-10,075
CaSO4 (aq)	0,00033077	0,00034246	-3,465
Cl-1	0,13084	0,09995	-1
CN-1	4,1024E-10	3,1337E-10	-9,504
CO3-2	1,2515E-08	4,2613E-09	-8,37
DOM1	7,5502E-06	9,1393E-07	-6,039
F-1	1,0216E-05	7,8038E-06	-5,108
Fe DOM1	3,0478E-09	3,0152E-09	-8,521
Fe(CN)6-3	4,9509E-21	4,3848E-22	-21,358
Fe(CN)6-4	1,6049E-21	2,1574E-23	-22,666
Fe(OH)2 (aq)	2,7028E-14	2,7983E-14	-13,553
Fe(OH)2+	6,0177E-05	4,5968E-05	-4,338
Fe(OH)3-	1,6281E-18	1,2437E-18	-17,905
Fe(OH)3 (aq)	1,8048E-08	1,8686E-08	-7,728
Fe(OH)4-	1,4411E-10	1,1008E-10	-9,958
Fe(SCN)2+	8,7074E-39	6,6515E-39	-38,177
Fe(SCN)3 (aq)	2,7613E-54	2,8589E-54	-53,544

Fe(SO4)2-	1,3416E-11	1,0248E-11	-10,989
Fe+2	0,00012674	4,3154E-05	-4,365
Fe+3	2,5063E-10	2,2197E-11	-10,654
Fe2(CN)6 (aq)	2,0541E-29	2,1267E-29	-28,672
Fe2(OH)2+4	3,6521E-11	4,9094E-13	-12,309
Fe3(OH)4+5	3,1278E-11	3,7238E-14	-13,429
Fe3(OH)4+5	7,9756E-12	9,4953E-15	-14,022
FeCl	4,4852E-05	3,4262E-05	-4,465
FeCl+	3,5627E-06	2,7215E-06	-5,565
FeCl+2	1,2037E-10	4,0986E-11	-10,387
FeF+	7,1499E-09	5,4617E-09	-8,263
FeF+2	4,5049E-10	1,5339E-10	-9,814
FeF2+	5,6249E-11	4,2968E-11	-10,367
FeF3 (aq)	2,7479E-13	2,845E-13	-12,546
FeHCO3+	3,986E-08	3,0448E-08	-7,516
FeOH+	1,1093E-08	8,4739E-09	-8,072
FeOH+2	5,8784E-07	2,0016E-07	-6,699
FeOHSCN+	1,5273E-31	1,1667E-31	-30,933
FeSCN+	8,8027E-20	6,7243E-20	-19,172
FeSCN+2	5,8817E-24	2,0027E-24	-23,698
FeSO4 (aq)	1,4688E-05	1,5207E-05	-4,818
FeSO4+	5,1585E-10	3,9405E-10	-9,404
H DOM1	2,9648E-08	1,2388E-08	-7,907
H+1	8,0718E-07	6,166E-07	-6,21
H2CO3* (aq)	0,00013992	0,00014486	-3,839
H2Fe(CN)6-2	1,0867E-28	3,7003E-29	-28,432
HCN (aq)	7,6829E-07	7,9545E-07	-6,099
HCO3-	0,0001058	8,0821E-05	-4,092
HF (aq)	5,294E-09	5,4812E-09	-8,261
HF2-	2,0422E-13	1,56E-13	-12,807
HFe(CN)6-3	2,9383E-24	2,6023E-25	-24,585
HSCN (aq)	3,6102E-24	3,7379E-24	-23,427
HSO4-	8,9563E-08	6,8416E-08	-7,165
K+1	0,0027294	0,002085	-2,681
K2Fe(CN)6-2	4,9601E-18	1,6889E-18	-17,772
K2H2Fe(CN)6	1,3198E-27	1,3665E-27	-26,864
K3HFe(CN)6	3,6951E-26	3,8257E-26	-25,417
KCl (aq)	0,00010988	0,00011377	-3,944
KF (aq)	7,1833E-09	7,4372E-09	-8,129
KFe(CN)6-2	7,0856E-23	2,4126E-23	-22,618
KFe(CN)6-3	1,0416E-22	9,2251E-24	-23,035
KHFe(CN)6-2	4,554E-19	1,5506E-19	-18,809
KOH (aq)	1,7261E-11	1,7872E-11	-10,748
KSO4-	2,4983E-05	1,9084E-05	-4,719
Mg DOM1	8,1448E-07	6,8552E-07	-6,164
Mg+2	0,0093517	0,0031843	-2,497
Mg2CO3+2	4,9368E-10	1,681E-10	-9,774

MgCl+	0,0015228	0,0011632	-2,934
MgCO3 (aq)	8,6579E-09	8,964E-09	-8,047
MgF+	1,9572E-06	1,4951E-06	-5,825
MgFe(CN)6-	1,057E-21	8,0746E-22	-21,093
MgFe(CN)6-2	1,008E-21	3,4321E-22	-21,464
MgHCO3+	3,1899E-06	2,4368E-06	-5,613
MgOH+	6,543E-09	4,9981E-09	-8,301
MgSO4 (aq)	0,00084211	0,00087187	-3,06
Mn(CN)2 (aq)	2,9233E-21	3,0266E-21	-20,519
Mn(OH)4-2	2,6964E-29	9,1815E-30	-29,037
Mn+2	7,7039E-06	2,6232E-06	-5,581
Mn+3	1,8225E-24	1,6141E-25	-24,792
Mn2(OH)3+	4,8718E-17	3,7215E-17	-16,429
Mn2OH+3	3,1726E-15	2,8099E-16	-15,551
MnCl+	3,4323E-07	2,6219E-07	-6,581
MnCl2 (aq)	4,5011E-08	4,6602E-08	-7,332
MnCl3-	1,6794E-09	1,2829E-09	-8,892
MnCN+	2,1972E-13	1,6784E-13	-12,775
MnCO3 (aq)	5,4111E-10	5,6024E-10	-9,252
MnF+	6,6992E-10	5,1174E-10	-9,291
MnHCO3+	4,8163E-09	3,6791E-09	-8,434
MnO4-	2,9937E-56	2,2869E-56	-55,641
MnO4-2	1,2474E-52	4,2473E-53	-52,372
MnOH+	3,9061E-11	2,9838E-11	-10,525
MnSCN+	4,7454E-21	3,6249E-21	-20,441
MnSO4 (aq)	6,372E-07	6,5972E-07	-6,181
Na+1	0,09046	0,069102	-1,161
Na2Fe(CN)6-2	3,1715E-15	1,0799E-15	-14,967
NaCl (aq)	0,0039667	0,0041069	-2,386
NaCO3-	1,1088E-08	8,4701E-09	-8,072
NaF (aq)	4,2202E-07	4,3694E-07	-6,36
NaFe(CN)6-3	2,4492E-21	2,1691E-22	-21,664
NaHCO3 (aq)	3,4345E-06	3,5559E-06	-5,449
NaHFe(CN)6-2	1,3892E-17	4,7303E-18	-17,325
NaOH (aq)	3,8048E-10	3,9393E-10	-9,405
NaSO4-	0,0008288	0,00063311	-3,199
OH-	6,457E-09	4,9324E-09	-8,307
S	0,0063935	0,0066195	-2,179
SCN-1	9,9907E-17	7,6317E-17	-16,117
SO4-2	0,0050021	0,0017032	-2,769

Table de distribution des espèces (2002)

Component	% of total component concentration	Species name
S		100S
CO3-2		76,087Al2(OH)2CO3+2
		9,983HCO3-
		13,202H2CO3* (aq)
		0,301MgHCO3+
		0,095CaHCO3+
		0,324NaHCO3 (aq)
Fe+3		0,967FeOH+2
		98,995Fe(OH)2+
		0,03Fe(OH)3 (aq)
DOM1		65,723DOM1
		0,258H DOM1
		4,159Al DOM1
		22,744Ca DOM1
		0,027Fe DOM1
		7,09Mg DOM1
Cl-1		95,646Cl-1
		0,033FeCl
		0,225CaCl+
		1,113MgCl+
		0,08KCl (aq)
		2,9NaCl (aq)
F-1		1,09F-1
		24,965AlF+2
		66,899AlF2+
		6,731AlF3 (aq)
		0,048AlF4-
		0,209MgF+
		0,011CaF+
		0,045NaF (aq)
SO4-2		70,872SO4-2
		0,174AlSO4+
		0,022Al(SO4)2-
		0,208FeSO4 (aq)
		11,931MgSO4 (aq)
		4,687CaSO4 (aq)
		11,743NaSO4-
		0,354KSO4-
SCN-1		99,907SCN-1
		0,088FeSCN+
CN-1		0,053CN-1
		99,947HCN (aq)

Al+3	0,55Al+3
	71,335Al2(OH)2CO3+2
	0,021Al DOM1
	0,836AlOH+2
	0,616Al(OH)2+
	0,093Al(OH)3 (aq)
	0,087Al(OH)4-
	0,652Al3(OH)4+5
	0,085Al2(OH)2+4
	10,346AlF+2
	13,862AlF2+
	0,93AlF3 (aq)
	0,542AlSO4+
	0,035Al(SO4)2-
Ca+2	82,356Ca+2
	0,072Ca DOM1
	8,461CaCl+
	9,08CaSO4 (aq)
	0,028CaHCO3+
Mg+2	79,775Mg+2
	0,017MgF+
	12,99MgCl+
	7,184MgSO4 (aq)
	0,027MgHCO3+
Mn+3	100Mn+3
K+1	95,291K+1
	3,836KCl (aq)
	0,872KSO4-
Na+1	94,962Na+1
	4,164NaCl (aq)
	0,87NaSO4-
Fe+2	66,74Fe+2
	23,619FeCl
	1,876FeCl+
	7,735FeSO4 (aq)
	0,021FeHCO3+
Mn+2	88,175Mn+2
	0,019MnCl3-
	0,515MnCl2 (aq)
	3,928MnCl+
	7,293MnSO4 (aq)
	0,055MnHCO3+

Index de saturation (2002)

Mineral	log IAP	Sat. Index	Stoichiometry									
Al(OH)3 (am)	12.666	0.835		1Al+3		3H2O		-3H+1				
Al(OH)3 (Soil)	12.666	3.401		1Al+3		3H2O		-3H+1				
Al2O3	25.337	3.285		2Al+3		3H2O		-6H+1				
Al4(OH)10SO4	35.478	12.778		-10H+1		4Al+3		1SO4-2		10H2O		
AlOHF2	-9.966	-10.373		1Al+3		2F-1		-1H+1		1H2O		
AlOHSO4	-2.519	0.711		-1H+1		1Al+3		1SO4-2		1H2O		
Alunite	11.154	10.605		1K+1		3Al+3		2SO4-2		-6H+1		6H2O
Anhydrite	-5.759	-1.466		1Ca+2		1SO4-2						
Aragonite	-11.361	-3.095		1Ca+2		1CO3-2						
Artinite	-0.954	-11.670		-2H+1		2Mg+2		1CO3-2		5H2O		
Birnessite	7.184	-10.907		-4H+1		-1E-1		1Mn+3		2H2O		
Bixbyite	-12.330	-12.841		-6H+1		2Mn+3		3H2O				
Boehmite	12.668	2.997		-3H+1		1Al+3		2H2O				
Brucite	9.919	-8.239		1Mg+2		2H2O		-2H+1				
CaCO3xH2O	-11.363	-4.297		1Ca+2		1CO3-2		1H2O				
Calcite	-11.361	-2.955		1Ca+2		1CO3-2						
Cryolite	-40.086	-5.893		3Na+1		1Al+3		6F-1				
Diaspore	12.668	4.838		-3H+1		1Al+3		2H2O				
Dolomite (disordered)	-22.229	-6.119		1Ca+2		1Mg+2		2CO3-2				
Dolomite (ordered)	-22.229	-5.505		1Ca+2		1Mg+2		2CO3-2				
Epsomite	-5.280	-3.046		1Mg+2		1SO4-2		7H2O				
Ettringite	36.277	-24.142		6Ca+2		2Al+3		3SO4-2		-12H+1		38H2O
Fe(OH)2 (am)	8.051	-6.289		1Fe+2		2H2O		-2H+1				
Fe(OH)2 (c)	8.051	-4.839		1Fe+2		-2H+1		2H2O				
Fe(OH)2.7Cl.3	5.808	8.848	-2.7	H+1		1Fe+3	2.7	H2O	.3	Cl-1		

Fe(OH)3(s)	7.970	11.170	1Fe+3	3H2O	-3H+1		
Fe2(SO4)3	-29.614	-28.125	2Fe+3	3SO4-2			
Fe3(Fe(CN)6)2(s)	-148.450	-321.450	3Fe+2	2Fe+3	12CN-1		
Fe3(OH)8	23.992	3.770	-8H+1	2Fe+3	1Fe+2	8H2O	
Fe4(Fe(CN)6)3(s)	-226.781	-483.781	4Fe+3	3Fe+2	18CN-1		
Ferrihydrite	7.970	3.839	1Fe+3	3H2O	-3H+1		
Ferrihydrite (aged)	7.970	5.280	1Fe+3	-3H+1	3H2O		
Fluorite	-13.206	-2.595	1Ca+2	2F-1			
Gibbsite (C)	12.666	3.951	1Al+3	3H2O	-3H+1		
Goethite	7.972	6.919	1Fe+3	2H2O	-3H+1		
Gypsum	-5.763	-1.144	1Ca+2	1SO4-2	2H2O		
Halite	-2.161	-3.676	1Na+1	1Cl-1			
Hausmannite	47.208	-17.729	3Mn+2	4H2O	-8H+1	-2E-1	
Hematite	15.947	16.168	2Fe+3	3H2O	-6H+1		
Hercynite	33.390	7.584	-8H+1	1Fe+2	2Al+3	4H2O	
H-Jarosite	-6.462	-3.144	3Fe+3	2SO4-2	-5H+1	7H2O	
Huntite	-43.964	-14.996	3Mg+2	1Ca+2	4CO3-2		
Hydromagnesite	-33.559	-26.820	5Mg+2	4CO3-2	-2H+1	6H2O	
K-Alum	-14.201	-8.750	1K+1	1Al+3	2SO4-2	12H2O	
KCl	-3.681	-4.581	1K+1	1Cl-1			
KCN (cubic)	-12.185	-13.493	1CN-1	1K+1			
K-Jarosite	-2.931	7.124	1K+1	3Fe+3	2SO4-2	-6H+1	6H2O
Lepidocrocite	7.972	6.601	-3H+1	1Fe+3	2H2O		
Lime	9.427	-25.072	-2H+1	1Ca+2	1H2O		
Maghemite	15.947	9.561	-6H+1	2Fe+3	3H2O		
Magnesioferrite	25.868	6.419	-8H+1	1Mg+2	2Fe+3	4H2O	
Magnesite	-10.867	-3.222	1Mg+2	1CO3-2			

Magnetite	24.000	18.662	-8H+1	2Fe+3	1Fe+2	4H2O	
Manganite	20.184	-5.156	1Mn+2	2H2O	-3H+1	-1E-1	
Melanterite	-7.148	-4.748	1Fe+2	1SO4-2	7H2O		
Mg(OH)2 (active)	9.919	-8.875	1Mg+2	2H2O	-2H+1		
Mg2(OH)3Cl:4H2O	12.622	-13.378	2Mg+2	1Cl-1	-3H+1	7H2O	
MgCO3:5H2O	-10.877	-6.337	1Mg+2	1CO3-2	5H2O		
MgF2	-12.712	-4.677	1Mg+2	2F-1			
Mirabilite	-5.110	-3.258	2Na+1	1SO4-2	10H2O		
Mn2(SO4)3	-57.890	-53.696	2Mn+3	3SO4-2			
Mn3[Fe(CN)6]2	-152.098	-46.698	3Mn+2	2Fe+3	12CN-1		
MnCl2:4H2O	-7.590	-10.405	1Mn+2	2Cl-1	4H2O		
MnCO3 (am)	-13.952	-3.452	1Mn+2	1CO3-2			
MnSO4	-8.350	-11.535	1Mn+2	1SO4-2			
NaCN (cubic)	-10.664	-12.257	1CN-1	1Na+1			
NaF	-6.268	-5.771	1Na+1	1F-1			
Na-Jarosite	-1.411	2.649	1Na+1	3Fe+3	2SO4-2	-6H+1	6H2O
Natron	-10.711	-8.789	2Na+1	1CO3-2	10H2O		
Nesquehonite	-10.873	-6.428	1Mg+2	1CO3-2	3H2O		
Nsutite	7.184	-10.320	-4H+1	-1E-1	1Mn+3	2H2O	
Periclase	9.921	-13.067	-2H+1	1Mg+2	1H2O		
Portlandite	9.425	-14.472	1Ca+2	2H2O	-2H+1		
Pyrochroite	6.835	-9.259	1Mn+2	2H2O	-2H+1		
Pyrolusite	33.534	-10.370	1Mn+2	2H2O	-4H+1	-2E-1	
Rhodochrosite	-13.952	-2.969	1Mn+2	1CO3-2			
Siderite	-12.735	-2.213	1Fe+2	1CO3-2			
Spinel	35.258	-5.191	-8H+1	1Mg+2	2Al+3	4H2O	
Thenardite	-5.090	-5.496	2Na+1	1SO4-2			
Thermonatrite	-10.693	-11.428	2Na+1	1CO3-2	1H2O		
Vaterite	-11.361	-3.525	1Ca+2	1CO3-2			

ANNEXE V

Protocole A - *Préparation de 4 sols en vue de réaliser des essais d'adsorption : récupération des sols des tubages d'échantillonnages et lavage du sol*



PROTOCOLE STANDARD
D'OPÉRATION

Protocole # :P61-A	Nombres de pages :7
Version :2	Date : 6-04-2004
Auteur(s): Ian Gagnon	
Approuvé par : Gérald Zagury Manon Leduc	Signatures : Date : ☐ ____ ____ ☐ ____ ____ ☐ ____ ____

Titre : Préparation de 4 sols en vue de réaliser des essais d'adsorption : récupération des sols des tubages d'échantillonnages et lavage du sol.
Mots clés : Adsorption, cyanure, fer-cyanure, cyanure libre, «batch», eau du site, eau synthétique

1. OBJECTIF

- Récupérer du sol provenant de 4 puits d'échantillonnage du site pour la caractérisation et des essais futurs.
- Préparer les sols qui seront utilisés lors des tests d'adsorption des cyanures en les pesant, les lavant et les entreposant.

2. PRINCIPE DE LA MÉTHODE

Les échantillons de sols ont été conservés dans des tubages. Ces tubages seront ouverts sous atmosphère d'azote pour en prélever le sol nécessaire aux essais d'adsorption. Il suffira à ce moment de peser les quantités désirées de sol ainsi que d'en extraire une certaine quantité pour la caractérisation. Une portion du sol recueilli sera lavée pour en extraire l'eau des pores (disponible) en vue des tests d'adsorption. Le sol sera ensuite entreposé jusqu'au début des essais d'adsorption sous atmosphère d'azote.

3. MATÉRIEL

- 4 erlenmeyers de 2L;
- 8 bouteilles autoclavables de 500 mL;
- Agitateur orbital;
- Bain d'acide 10% HNO_3;
- Balance 16,0 kg
- Balance de précision 0,01 g;
- Bombonne d'azote;
- Bouchons pour les erlenmeyers;
- Bouteilles autoclavables de 1 L (selon la quantité de sol);
- Bouteilles du laboratoire d'analyse;
- Contenant à déchets (pour utilisation dans le sac à gants);

- Cuillères en plastique (8);
- Cylindre gradué de 2 L;
- Entonnoir Buchner à filtration (#60243);
- Erlenmeyers à vide de 1L;
- Filtres en fibre de verre 90 mm, rétention de particule 1,2 µm, Watman #0987439;
- Four (105 C);
- Gants de latex;
- Gants de nitrile;
- Gants isolants;
- Parafilm;
- Pince à papier;
- Plateaux en verre (8 po x 12 po) allant au four (4);
- Sacs à gants;
- Sacs Ziploc;
- Seringues 60 mL (avec filtre);
- Tubages de sol : MW12A, PN2A, PN3B, PZ3 (environ 6,2 L).

4. MODE OPÉRATOIRE

** Toutes les manipulations de sols et/ou d'eaux contaminés doivent être faites sous la hotte.

4.1 Nettoyage de la verrerie

4.1.1 Nettoyer toute la verrerie ainsi que le matériel en PPCO et en Teflon à l'aide d'un détergent doux et de l'eau distillée, puis rincer trois fois à l'eau distillée et à l'eau déionisée;

4.1.2 Déposer, à l'aide de gants en nitrile le matériel propre dans le bac de lavage no.1 à l'acide nitrique HNO_3 10% situé sous la hotte no. 4;

4.1.3 Laisser tremper dans l'acide toute une nuit;

4.1.4 Sortir la vaisselle énumérée à l'étape 1 et la rincer trois fois à l'eau distillée et trois fois à l'eau déionisée;

4.1.5 Mettre le matériel dans le bac no.2 à l'acide nitrique HNO_3 10% pour 1 heure;

4.1.6 Sortir le matériel et rincer trois fois à l'eau distillée et à l'eau déionisée.

4.2 Récupération de 4 sols (MW-12A, PN-2A, PN-3B, PZ3)

* Les manipulations suivantes seront faites pour un sol à la fois.

4.2.1 À la balance de 16,0 kg, peser le tubage contenant le sol. Noter;

4.2.2 Identifier les 2 bouteilles autoclavables de 500 mL selon le puits et le sol (lavé ou non) ainsi que l'erlenmeyer de 2 L et le contenant d'analyse de 250 mL de Philip pour la caractérisation en CN_{TOT} et CN disponibles (CN_{WAD}) ainsi que 4 bouteilles autoclavables de 1 L;

4.2.3 Peser (pour les 4 puits) tous les contenants énumérés à l'étape précédente. Noter.

4.2.4 Sous la hotte, installer le sac à gants et le tuyau d'entrée et de sortie d'air;

4.2.5 Éteindre la lumière de la hotte;

4.2.6 Introduire dans le sac à gants le tubage contenant le sol (identifié selon le puits d'origine), la balance (précision 0,01g, deux cuillères en plastique, un contenant à déchets et les contenants identifiés en 4.2.2 (bouchons ouverts));

4.2.7 Fermer le sac en utilisant une pince à papier;

4.2.8 Aspirer l'air contenu dans le sac en reliant le tuyau du sac à la valve du vide de la hotte;

4.2.9 Remplir le sac d'azote en fixant le tuyau du sac anaérobie à la bombonne d'azote;

4.2.10 Répéter les étapes 4.2.8 et 4.2.9 à deux reprises;

4.2.11 Ouvrir le tubage. Rejeter les 2 premiers et les 2 derniers pouces de sol;

4.2.12 À l'aide de la cuillère en plastique, déposer le sol dans la bouteille autoclavable (0,5 kg) et l'erlenmeyer (0,25 kg) et la bouteille d'analyse de la

caractérisation (mi-bouteille). Déposer l'excédant de sol dans des bouteilles autoclavables de 1 L;

4.2.13 Refermer les bouteilles hermétiquement et les sortir du sac;

4.2.14 Sceller le bouchon des bouteilles à l'aide d'un film de Parafilm et boucher l'erlenmeyer à l'aide d'un bouchon;

4.2.15 Répéter pour les 3 autres sols.

N.B. Noter toute observation sur le sol (texture, couleur, humidité).

4.3 Récupération de l'eau des pores des échantillons de sol

4.3.1 Identifier aux 4 puits 4 contenants de 500 mL centrifugeables en PPCO;

4.3.2 Remplir ces contenants environ à la moitié de sol entreposés provenant des tubages (voir P61-A);

4.3.3 Centrifuger à 10 000 rpm pendant 30 minutes (rotor JA-10, 17 700g);

4.3.4 Recueillir, dans chaque contenant centrifugé, à l'aide d'une seringue de 60 mL environ 50 mL du surnageant et l'insérer à travers un filtre dans les bouteilles fournies par le laboratoire d'analyse;

4.3.5 Mesurer le pH et le potentiel redox des échantillons et les envoyer au laboratoire pour analyse de CN_T.

4.4 Caractérisation

4.4.1 Les bouteilles d'analyse pour la caractérisation remplies en 4.2.12 seront envoyées au laboratoire pour caractérisation : cyanures disponibles (CN_{WAD}) et cyanures totaux.

4.4.2 Les analyses à faire à la chaire : pH, teneur en eau (poids sec), solides volatils totaux, distribution des particules, capacité d'échange cationique et capacité tampon (Zagury et al. 2004).

4.5 Lavage du sol

(répéter pour les 4 sols)

4.5.1 Installer l'agitateur orbital dans la chambre à 10 °C;

4.5.2 Introduire, à l'aide d'un cylindre gradué, dans l'erlenmeyer contenant 250g de sol de chaque puits environ 1,25 L d'eau déionisée (ratio sol : eau = 1 :5);

4.5.3 Mettre l'erlenmeyer sur l'agitateur orbital pendant 3 heures à 150 rpm. S'assurer que la lumière de la pièce est fermée;

4.5.4 Sous la hotte, préparer l'erlenmeyer à vide de 1L : installer le filtre en fibre de verre de 90 mm de diamètre sur l'entonnoir Buchner #60243; brancher sur le robinet à vide;

4.5.5 Vider le contenu de l'erlenmeyer sur le filtre dans l'entonnoir à filtration;

4.5.6 Récupérer le sol à l'aide d'une cuillère en plastique;

4.5.7 Remettre le sol dans l'erlenmeyer de 2 L et répéter les étapes 4.4.2 à 4.4.6 deux fois;

4.5.8 Étendre le sol sur un plateau en verre pouvant aller dans le four;

4.5.9 Sécher le sol dans un four à 105 °C pendant 24h pour enlever l'eau libre;

4.5.10 Sous la hotte, mettre tout le sol séché dans une bouteille autoclavable de 500 mL. Refermer la bouteille.

4.6 Conservation des échantillons

4.6.1 Conserver les 8 bouteilles autoclavables de 500 mL et les bouteilles de 1 L refermées et scellées dans la chambre froide (4 °C), dans un sac Ziploc sous atmosphère d'azote, dans le noir jusqu'à leur utilisation.

5. RÉSULTATS

Les échantillons de sols préparés seront utilisés pour les tests d'adsorption.

6. RÉFÉRENCE(S)

Ghosh, R.S., Dzombak, D.A., Luthy, R.G. and Smith, J.R. (1999b). "In Situ Treatment of Cyanide-Contaminated Groundwater by Iron Cyanide Precipitation." Water Environment Research 71(6): 1217-1228.

PE-55A, Essai de lixiviation du sol propre avec de l'eau contaminée aux cyanures, aluminium, fer et fluor en condition anaérobie.

PE-55B, Essai de lixiviation du sol contaminé aux cyanures, aluminium, fer et fluor avec de l'eau souterraine synthétique en condition anaérobie.

Zagury, G.J. et al., Characterization and availability of cyanide in solid mine tailings from gold extraction plants, *Science of the Total Environment*, v 320, n 2-3, Mar 29, 2004, p 211-224.

7. NOTE(S)

ANNEXE VI

Protocole B - *Préparation de trois eaux synthétiques pour des essais d'adsorption soit : eau déionisée, eau déionisée contaminée au NaCN et eau déionisée contaminée au* $KFe(CN)_6^{-3}$



PROTOCOLE STANDARD
D'OPÉRATION

Protocole # :P61-B	Nombres de pages : 5
Version :1	Date : 6-04-2004
Auteur(s): Ian Gagnon	
Approuvé par : Gérald Zagury Louise Deschênes	Signatures : Date : ☐ ☐ ☐ ☐ ☐ ☐

Titre : Préparation de trois eaux synthétiques pour des essais d'adsorption soit : eau déionisée, eau déionisée contaminée au NaCN et eau déionisée contaminée au $KFe(CN)_6^{-3}$.
Mots clés : Adsorption, cyanure, fer-cyanure, cyanure libre, «batch», eau du site, eau synthétique

1. OBJECTIF

L'objectif consiste à préparer une solution d'eau déionisée et des solutions d'eau synthétique contaminée pour réaliser des tests d'adsorption avec des échantillons de sols (voir P61-A). Deux types d'eau synthétique contaminée seront produites, une contaminée au cyanure libre (NaCN) et l'autre à un complexe fer-cyanure ($K_4Fe(CN)_6$).

2. PRINCIPE DE LA MÉTHODE

L'eau synthétique contaminée est constitué de deux éléments de base : l'eau déionisée et un contaminant. Pour préparer ces eaux, une quantité de contaminant est rajoutée à de l'eau déionisée de façon à reproduire les concentrations de contaminants sur le site. Ces eaux seront utilisées pour mesurer le potentiel d'adsorption des sols du site contaminé.

3. MATÉRIEL

- Bain d'acide;
- Balances (0,01 mg et 1 mg);
- Ballons de 2 L;
- Ballons de 100 mL et 250 mL;
- Bécher de 2 L;
- Bouteilles à centrifugeuse de 500 mL;
- Bouteilles d'analyse du laboratoire;
- Bouteilles de 1 L (8) et de 250 mL (2);
- Centrifugeuse Beckman J2-21;
- Gants de nitrile;
- HCl (10 M et 3M);
- $K_4Fe(CN)_6$ (Sigma-Aldrich, P9387);

- NaCl (Anachemia, 81708-380);
- NaCN (Anachemia, AC8325);
- NaOH (10M et 1 M);
- Pèse-matière en plastique;
- Pipettes de 25 mL et 50 mL;
- Sondes à pH et à redox (pH mètre);
- Spatules.

8. MODE OPÉRATOIRE

4.1 Nettoyage de la verrerie

4.1.1 Nettoyer toute la verrerie ainsi que les tubes en PPCO et en Teflon à l'aide d'un détergent doux et de l'eau distillée, puis rincer trois fois à l'eau distillée et à l'eau déionisée;

8.1.2. Déposer, à l'aide de gants en nitrile le matériel propre dans le bac de lavage no.1 à l'acide nitrique HNO_3 10% situé sous la hotte no. 1;

4.1.3 Laisser tremper dans l'acide toute une nuit;

4.1.4 Sortir la vaisselle énumérée à l'étape 1 et la rincer trois fois à l'eau distillée et trois fois à l'eau déionisée;

4.1.5 Mettre le matériel dans le bac no.2 à l'acide nitrique HNO_3 10% pour 1 heure;

8.1.6. Sortir le matériel et rincer trois fois à l'eau distillée et à l'eau déionisée.

8.2.Préparation de l'eau synthétique déioinisée

Recueillir à la sortie du distributeur d'eau déionisée environ 2 L d'eau déionisée dans un bécher de 2 L;

8.3.Préparation de la solution concentrée contaminée au $K_4Fe(CN)_6$ (250 mg/L CN^-)

Identifier un ballon de 100 mL;

Peser 58,9 mg de $K_4Fe(CN)_6$ à l'aide d'une spatule dans un pèse-matière en plastique;

Introduire le contaminant dans le ballon de façon quantitative à l'aide d'eau déionisée;

Jauger à l'eau déionisée;

8.3.2. Transvider la solution concentrée dans une bouteille de 250 mL identifiée. Conserver la bouteille jusqu'à utilisation (voir P61-C).

8.4.Préparation de la solution concentrée contaminée au NaCN (250 mg/L CN^-)

Identifier un ballon de 250 mL;

Peser 117,8 mg de NaCN à l'aide d'une spatule dans un pèse-matière en plastique;

Introduire le contaminant dans le ballon de façon quantitative à l'aide d'eau déionisée;

Jauger à l'eau déionisée;

8.4.2. Transvider la solution concentrée dans une bouteille de 250 mL identifiée. Conserver la bouteille jusqu'à utilisation (voir P61-C).

8.5.Préparation de l'eau synthétique avec NaCl (0,01M) et pH 9 ou 6,5

Identifier 4 bouteilles de 2 L aux noms des 4 puits;

Identifier les 4 ballons de 2 L aux noms des 2 puits;

8.5.2. Peser précisément 585 mg de NaCl dans un pèse-matière en plastique à la balance (précision 1 mg) et introduire le NaCl dans un ballon de façon quantitative avec de l'eau déionisée. Répéter pour les autres ballons;

8.5.3. Jauger à l'eau déionisée;

8.5.4. Introduire à l'aide d'une pipette une solution de HCl dilué (10M ou 3M) ou de NaOH (10M ou 1M) jusqu'à l'obtention d'un pH de 9 ± 0,1 pour les ballons associés aux puits PN2A, PN3B et MW12A et d'un pH de 6,5 ± 0,1 pour le puits PZ3;

8.5.5. Transvider le contenu d'un ballon dans une bouteille de 2 L et refermer celle-ci;

4. RÉSULTATS

L'eau synthétique préparée doit être conservée à 4 C jusqu'à son utilisation dans les tests d'adsorption (voir P61C-adsorption).

5. RÉFÉRENCE(S)

Ghosh, R.S., Dzombak, D.A., Luthy, R.G. and Smith, J.R. (1999b). "In Situ Treatment of Cyanide-Contaminated Groundwater by Iron Cyanide Precipitation." Water Environment Research 71(6): 1217-1228.

PE-55A, Essai de lixiviation du sol propre avec de l'eau contaminée aux cyanures, aluminium, fer et fluor en condition anaérobie.

PE-55B, Essai de lixiviation du sol contaminé aux cyanures, aluminium, fer et fluor avec de l'eau souterraine synthétique en condition anaérobie.

PE-61A, Préparation de 4 sols en vue de réaliser des essais d'adsorption : récupération des sols des tubages d'échantillonnages et lavage du sol

PE-61C, Essais d'adsorption en «batch» des espèces de cyanure contenues dans de l'eau, synthétique et du site, contaminée au cyanure libre et aux complexes fer-cyanure sur du sol provenant du site contaminé.

6. NOTE(S)

ANNEXE VII

Protocole C - *Essais d'adsorption en «batch» des espèces de cyanure contenues dans de l'eau, synthétique et du site, contaminée au cyanure libre et aux complexes fer-cyanure sur du matériel géologique provenant du site étudié*

Chaire industrielle CRSNG en assainissement et gestion des sites	PROTOCOLE STANDARD D'OPÉRATION
Protocole # :P61-C	Nombres de pages : 7
Version :1	Date : 6-04-2004
Auteur(s): Ian Gagnon	
Approuvé par : Gérald Zagury Manon Leduc	Signatures : Date : ☐ ☐ ☐ ☐ ☐ ☐

Titre : Essais d'adsorption en «batch» des espèces de cyanure contenues dans de l'eau, synthétique et du site, contaminée au cyanure libre et aux complexes fer-cyanure sur du sol provenant du site contaminé.
Mots clés : Adsorption, cyanure, fer-cyanure, cyanure libre, «batch», eau du site, eau synthétique

1. OBJECTIF

L'objectif des essais d'adsorption en «batch» est de prouver la présence ou non d'un potentiel d'adsorption du cyanure sur le site. La méthode consiste à ajouter de l'eau contaminée à une certaine quantité de sol et de mélanger physiquement sur un agitateur «wrist-action» pendant un temps donné. Les essais seront fait à l'aide d'eau souterraine recueillie sur le site ainsi que d'une eau synthétique contaminée. Ceci permettra de simuler le devenir du cyanure dans le panache.

2. PRINCIPE DE LA MÉTHODE

L'adsorption du cyanure sur le sol souterrain est un des mécanismes pouvant expliquer la diminution de la concentration en cyanure au fil du panache. Dans le but de tester ce potentiel, on réalise en laboratoire des essais où on met en contact de l'eau contaminée et du sol pendant une certaine période de temps. L'analyse subséquente du cyanure total permettra de déterminer la concentration finale du cyanure, donc la répartition, dans chacune des deux phases.

3. MATÉRIEL

- Agitateur de type «wrist action»;
- Bain d'acide;
- Balance 0,1 g;
- Bonbonne d'azote;
- Bouteilles de sol de 500 mL(voir P61a);
- Bouteilles du laboratoire externe;
- Centrifugeuse (Beckman J2-21);
- Cuillères en plastique;
- Eau déionisée;
- Eau synthétique (eau déionisée NaCl (0,01M) à pH ajusté (voir P61B)

- Eau souterraine du site (échantillonnée 12/05/2003, conservée à 4 C dans le noir);
- Pipettes 1 mL;
- Sacs anaérobies;
- Seringues avec filtres 0,45 µm;
- Solutions de NaCN et de $K_4Fe(CN)_6$ (250 mg/l CN^-);
- Spatule;
- Tubes à centrifugeuse de 40 mL en PPCO (96);
- Unités filtrantes stériles de 250 mL (filtre de 0,45 µm).

9. MODE OPÉRATOIRE

4.1 Nettoyage de la verrerie

4.1.1 Nettoyer toute la verrerie ainsi que les tubes en PPCO et en Teflon à l'aide d'un détergent doux et de l'eau distillée, puis rincer trois fois à l'eau distillée et à l'eau déionisée;

9.1.1. Déposer, à l'aide de gants en nitrile le matériel propre dans le bac de lavage no.1 à l'acide nitrique HNO_3 10% situé sous la hotte no. 4;

4.1.3 Laisser tremper dans l'acide toute une nuit;

4.1.4 Sortir la vaisselle énumérée à l'étape 1 et la rincer trois fois à l'eau distillée et trois fois à l'eau déionisée;

4.1.5 Mettre le matériel dans le bac no.2 à l'acide nitrique HNO_3 10% pour 1 heure;

9.1.2. Sortir le matériel et rincer trois fois à l'eau distillée et à l'eau déionisée.

4.2 Mélanges eau-sol à étudier

4.2.1 Tous les essais seront faits en duplicata et pour chacun des 4 puits;

4.2.2 Pour chaque mélange avec ajout de contaminant à 48h, 12 préparations (24 avec les duplicatas) seront nécessaires, tandis que pour chaque mélange

sans ajout de contaminant, 11 préparations (22 avec les duplicatas) seront nécessaires pour effectuer les différents échantillonnages;

4.2.3 Vu le grand nombre d'essais à préparer (376), l'expérience sera faite en plusieurs parties, c'est-à-dire un puits à la fois.

Sol	Lavage	Eau utilisée	Ajout à 48h	#
PZ3	Non-lavé	Eau synthétique déionisée (0,01 M NaCl, pH = 6,5)	NaCN (5 mg/L CN^-)	1101 à 1112
	Non-lavé	Eau synthétique déionisée (0,01 M NaCl, pH = 6,5)	$K_4Fe(CN)_6$ (5 mg/L CN^-)	1201 à 1212
	Non-lavé	Eau souterraine du site (0,032 mg/L CN_{tot})	NaCN (5 mg/L CN^-)	1301 à 1312
	Lavé	Eau souterraine du site (0,032 mg/L CN_{tot})	NaCN (5 mg/L CN^-)	1401 à 1412
PN2A	Non-lavé	Eau synthétique déionisée (0,01 M NaCl, pH = 9)	NaCN (5 mg/L CN^-)	2101 à 2112
	Non-lavé	Eau synthétique déionisée (0,01 M NaCl, pH = 9)	$K_4Fe(CN)_6$ (5 mg/L CN^-)	2201 à 2212
	Non-lavé	Eau souterraine du site (4,8 mg/L CN_{tot})	Aucun	2301 à 2312
	Lavé	Eau souterraine du site (4,8 mg/L CN_{tot})	Aucun	2401 à 2412
PN3B	Non-lavé	Eau synthétique déionisée (0,01 M NaCl, pH = 9)	NaCN (5 mg/L CN^-)	3101 à 3112
	Non-lavé	Eau synthétique déionisée (0,01 M NaCl, pH = 9)	$K_4Fe(CN)_6$ (5 mg/L CN^-)	3201 à 3212
	Non-lavé	Eau souterraine du site (0,056 mg/L CN_{tot})	NaCN (5 mg/L CN^-)	3301 à 3312
	Lavé	Eau souterraine du site (0,056 mg/L CN_{tot})	NaCN (5 mg/L CN^-)	3401 à 3412
MW12A	Non-lavé	Eau synthétique déionisée (0,01 M NaCl, pH = 9)	NaCN (5 mg/L CN^-)	4101 à 4112
	Non-lavé	Eau synthétique déionisée (0,01 M NaCl, pH = 9)	$K_4Fe(CN)_6$ (5 mg/L CN^-)	4201 à 4212
	Non-lavé	Eau souterraine du site (2,6 mg/L CN_{tot})	Aucun	4301 à 4312
	Lavé	Eau souterraine du site (2,6 mg/L CN_{tot})	Aucun	4401 à 4412

4.3 Essais d'adsorption

(Répéter pour chaque mélange eau-sol)

4.3.1 Identifier selon le mélange (voir tableau) les tubes à centrifugeuses de 40 mL;

4.3.2 Dans le sac anaérobie, introduire les bouteilles de sol, la préparation d'eau appropriée, la balance 0,0001 g, les bouteilles à centrifugeuses de 40 mL en PPCO, la spatule et la cuillère en plastique;

4.3.3 À l'aide de la balance, peser environ précisément directement dans chaque tube à centrifugeuse de 40 mL une quantité de 3,5 g de sol humide (voir tableau) ;

4.3.4 Déterminer, à l'aide du protocole A7, la teneur en eau du sol;

4.3.5 Incorporer dans les tubes à centrifugeuse 35 mL d'eau (voir tableau) à l'aide d'une pipette de 50 mL;

4.3.6 Purger les tubes à centrifugeuse à l'aide d'azote pendant 30 secondes environ;

4.3.7 Boucher hermétiquement le tube à centrifugeuse à l'aide d'un bouchon. Faire des paquets de 8 tubes à centrifugeuse;

4.3.8 Mettre les tubes sur un agitateur de type «wrist action» (à vitesse maximale) pour une durée de 216h;

4.3.9 Après 48h, sous la hotte dans un sac anaérobie, incorporer dans chaque tube 0,71 mL de la solution concentrée (250 mg/l de CN^-) à l'aide d'une seringue de 1 mL: solution avec NaCN ou $K_4Fe(CN)_6$ (voir tableau);

4.3.10 À la suite du l'ajout de la solution concentrée de contaminant, réinstaller les tubes sur le mélangeur «wrist action».

4.4 Échantillonnage

4.4.1 L'échantillonnage, pour chaque série avec ajout de contaminant, se fera au temps 0, après 12h, 24h, 48h, 51h, 54h, 60h, 72h, 96h, 120h, 168h et 216h (note : à 48h, les tubes sont retirés pour y introduire une solution concentrée en CN^-);

4.4.2 L'échantillonnage, pour chaque série sans ajout de contaminant, se fera au temps 0, après 3h, 6h, 12h, 24h, 48h, 72h, 96h, 120h, 168h et 216h;

4.4.3 Retirer les tubes de l'agitateur au temps t et les mettre dans la centrifugeuse;

4.4.4 Centrifuger à 12 000 g pendant 20 minutes (10 000 rpm, rotor JA-20);

4.4.5 Mesurer le redox et le pH de la solution, noter et refermer les bouteilles;

4.4.6 À l'aide d'une seringue munie d'un filtre ou d'une unité filtrante de 250 mL, retirer 30 mL du surnageant dans chaque tube et les déposer dans les bouteilles du laboratoire externe contenant du NaOH 1M pour assurer la conservation de l'échantillon;

N.B. Utiliser une seringue/unité filtrante différente pour chaque mélange eau-sol; Rincer à l'eau déionisée les seringues entre chaque échantillonnage; Changer le filtre des séringues à chaque échantillon (au moins).

4.4.7 Expédier immédiatement les échantillons au laboratoire pour fins d'analyse.

4.5 Analyses externes

4.5.1 Les analyses chimiques (cyanure total par colorimétrie) seront effectuées par un laboratoire externe;

4. RÉSULTATS

La représentation graphique de l'évolution de la concentration en cyanures totaux dans l'eau en fonction du temps permettra d'analyser le potentiel d'adsorption.

5. RÉFÉRENCE(S)

Ghosh, R.S., Dzombak, D.A., Luthy, R.G. and Smith, J.R. (1999b). "In Situ Treatment of Cyanide-Contaminated Groundwater by Iron Cyanide Precipitation." Water Environment Research 71(6): 1217-1228.

PE-55A, Essai de lixiviation du sol propre avec de l'eau contaminée aux cyanures, aluminium, fer et fluor en condition anaérobie.

PE-55B, Essai de lixiviation du sol contaminé aux cyanures, aluminium, fer et fluor avec de l'eau souterraine synthétique en condition anaérobie.

PE-61A, Préparation de 4 sols en vue de réaliser des essais d'adsorption : récupération des sols des tubages d'échantillonnages et lavage du sol

PE-61B, Préparation de trois eaux synthétiques pour des essais d'adsorption soit : eau déionisée, eau déionisée contaminée au NaCN et eau déionisée contaminée au $KFe(CN)_6^{-3}$.

6. NOTE(S)

ANNEXE VIII

Protocole E - *Dénombrement total de colonies bactériennes hétérotrophes et hétérotrophes résistantes au cyanure sous atmosphère d'azote en provenance d'échantillons d'eau et de sol provenant d'un site contaminé par la méthode du comptage sur pétris*

Chaire industrielle CRSNG en assainissement et gestion des sites	PROTOCOLE STANDARD D'OPÉRATION
Protocole # :P61-E	Nombres de pages : 8
Version :1	Date : 24-09-2004
Auteur(s): Ian Gagnon	
Approuvé par : Gérald Zagury Manon Leduc	Signatures : Date : ☐ ☐ ☐

Titre : Dénombrement total de colonies bactériennes hétérotrophes et hétérotrophes résistantes au cyanure sous atmosphère d'azote en provenance d'échantillons d'eau et de sol provenant d'un site contaminé par la méthode du comptage sur pétris.
Mots clés : Cyanure, eau souterraine, sol, dénombrement bactérien, pétris, étalement.

1. OBJECTIF

L'objectif consiste à déterminer s'il existe dans les échantillons d'eau souterraine et les échantillons de sol provenant d'un site contaminé aux cyanures des micro-organismes hétérotrophes totaux se développant sous atmosphère d'azote et si, parmi ces micro-organismes, ceux qui sont en mesure de croître en présence de cyanure ajouté au milieu nutritif.

2. PRINCIPE DE LA MÉTHODE

Cette méthode consiste à déposer des aliquots de sol ou d'eau souterrain (plusieurs dilutions) sur des pétris contenant un milieu complet, constitué de nutriments et d'une source de carbone. Ces pétris sont conservés dans des conditions se rapprochant le plus possible des conditions réelles sur le terrain. Certains pétris contiendront en plus du milieu une certaine quantité de cyanure ajouté de sorte à être en mesure de prouver que les micro-organismes ont la capacité de croître en présence de cyanures.

Chaque colonie qui se développe est présumée être issue d'une unité viable, soit un seul organisme ou bien un groupe d'organisme. Les résultats sont exprimés en UFC/g de résidu sec (UFC : unités formant des colonies).

3. MATÉRIEL

- Sol : Pétris (168) pré-identifiés (21 pétris par échantillon, soit 7 dilutions en triplicatas);
- Sol : Bouteille à dilution de 150 mL avec bouchon en teflon (1 bouteilles par échantillon);
- Eau : Pétris (192) pré-identifiés (24 pétris par échantillon, soit 7 dilutions en triplicatas et la dilution 10^0);
- Tubes (60+) à dilution 15 mL pré-identifiés (6 ou 7 tubes par échantillon);
- Dispensette;
- Pipetman à embouts stériles (1000 µL et 200 µL);
- Pétri en verre avec couvercle contenant environ 30 mL d'éthanol 95%;
- Tige de verre recourbée en forme de bâton de hockey;
- Erlenmeyer;
- Bouchons en mousse et papier d'aluminium (pour l'autoclavage);
- Pipettes stériles de 10 mL;
- Poire à pipette;
- Billes en verre pour l'extraction;
- Spatules;
- Balance de 3,2 kg (±0,01g);
- Autoclave;
- Incubateur;

- Bain-marie;
- pH-mètre;
- Brûleur.

Réactifs
- Tryptic soy broth sans dextrose (27g);
- Acide nitrique 10% v/v;
- Agar purifié (135g);
- Eau purifiée;
- Eau stérilisée;
- Alcool denature (ethanol 85%);
- NaCl (17g);
- NaOH 10 N p/v;
- $K_4Fe(CN)_6$ (58,9mg).

10. MODE OPÉRATOIRE

Échantillon	SOL - Pétris sans CN ajouté	SOL - Pétris avec CN ajouté (5 mg/L CN^-)	EAU - Pétris sans CN ajouté	EAU - Pétris avec CN ajouté (5 mg/L CN^-)
MW12A	21	21	24	24
PN2A	21	21	24	24
PN3B	21	21	24	24
PZ3	21	21	24	24

4.1 Préparation des pétris

4.1.1 Dans un erlenmeyer de 2 litres, peser 4.5g de «tryptic soy broth» sans dextrose et 22.5g d'agar purifié, puis compléter avec 1450 mL d'eau purifiée (en tout, préparer 6 erlenmeyers contenant chacun 1,5 L;

4.1.2 Laisser agiter sur l'agitateur magnétique environ 5 minutes;

4.1.3 Fermer l'erlenmeyer à l'aide de bouchon de mousse et couvrir son col de papier d'aluminium, poser ensuite un papier autoclave dessus et mettre à autoclaver pendant 20 minutes à une température de 121 C;

4.1.4 Refroidir le milieu autoclavé à une température de versement d'environ 60 C et ensuite le mettre dans un bain marie afin de maintenir cette température;

4.1.5 Préparer une solution concentrée en $K_4Fe(CN)_6$ (250 mg CN^-/L). Peser 58,9 mg de $K_4Fe(CN)_6$ dans un ballon de 100 mL et jauger à l'eau déionisée. Transférer dans une bouteille de 250 mL.

4.1.6 Ajuster le pH du milieu :

- Calibrer le pH mètre à l'aide des 3 standards chauffés au bain-marie (60C);
- Nettoyer l'électrode à l'acide, puis rincer avec l'eau stérilisée par autoclave;
- Retirer l'erlenmeyer contenant le milieu du bain-marie et le mettre sur l'agitateur magnétique après avoir stérilisé le col à la flamme;
  - Ajouter 30 mL de la solution concentrée de $K_4Fe(CN)_6$ dans les 3 erlenmeyers contenant le milieu destiné à vérifier la présence de bactéries tolérantes aux cyanures;
  - Lire le pH du milieu et commencer à ajouter quelques gouttes de NaOH 10 N stérilisées par filtration (0,45 µm). Ajuster le pH du milieu à 9. Noter le pH final.

4.1.7 Remettre le bouchon de mousse de l'erlenmeyer et agiter pendant 10 minutes sur l'agitateur magnétique;

4.2 <u>Distribution sur pétris</u>
*Travailler près de la flamme

4.2.1 Distribuer environ 20 mL du milieu dans une boîte de pétri en essayant de ne pas l'ouvrir au complet. Refermer la boîte et la garder sur le comptoir stérilisé. Procéder ainsi pour les pétris suivants. Empiler jusqu'à 5 pétris;

4.2.2 Laisser l'agar se solidifier à température de la pièce pendant 1 heure;

4.2.3 Placer les pétris en position inversée 24 à 48h (toujours sous la hotte) afin d'éviter que les gouttes résultant de la condensation de l'eau ne retombent à la surface de la gélose;

4.2.4 Empiler les pétris selon identification et les remettre dans leurs sacs originaux. Identifier les sacs et les garder au réfrigérateur (4 C) pendant au moins 24h avant leur utilisation.

4.3 Préparation de la solution saline

4.3.1 Préparer 2L d'une solution de NaCl 0,85% p/v (17g NaCl);

4.3.2 Verser un volume de 95 mL dans les bouteilles de dilution qui serviront à l'extraction (6 bouteilles) à l'aide d'une dispensette de 100 mL. Ajouter 30 billes de verre dans chaque bouteille;

4.3.3 Prendre maintenant les tubes de dilution (minimum 60 tubes) et verser 9 mL de la solution de NaCl dans chacune;

4.3.4 Autoclaver tous les tubes à 121 C pendant 20 minutes, puis laisser refroidir jusqu'à température ambiante (pour accélérer le refroidissement on peut placer les bouteilles dans la chambre froide à 4 C pendant environ 3h)

4.4 Préparation des dilutions en série
*Travailler près de la flamme

Pour les échantillons d'eau, passer directement à l'étape 4.4.4

4.4.1 Peser environ 10,00g (noter) de sol à l'aide d'une cuillère stérilisée (trempée dans l'éthanol et ensuite brûlée à la flamme) dans la bouteille à dilution 95 mL contenant les billes de verre;

4.4.2 Effectuer un poids sec pour chaque sol (en parallèle);

4.4.2 Boucher la bouteille et agiter au «wrist action» pendant 30 minutes. Cette bouteille représente la dilution 10^{-1} (sol);

4.4.3 Brasser encore manuellement la bouteille avant de prélever les aliquots;

4.4.4 Prendre une série de 6 tubes de dilution autoclavés contenants la solution saline et les identifier de 10^{-2} à 10^{-7} (pour chaque échantillon de sol) et une série de 7 tubes de dilution autoclavés contenants la solution saline et les identifier de 10^{-1} à 10^{-7} (pour chaque échantillon d'eau souterraine);

4.4.5 Réaliser les dilutions jusqu'à 10^{-7} en transférant 1 mL à chaque fois dans un tube contenant 9 mL de solution saline. Effectuer le transfert à l'aide de la pipette stérile jetable (1mL). Brasser les bouteilles énergiquement avant chaque prélèvement afin de bien homogénéiser la suspension. Jeter la pipette après chaque utilisation;

4.5 Étalement sur pétris

4.5.1 À l'aide du pipetman, transférer 100 µL de chaque dilution sur les boîtes de pétri préparées. Jeter l'embout après chaque utilisation;

4.5.2 Par un mouvement rotatif en utilisant le tourne disque, étaler la dilution sur le milieu gélifié à l'aide d'une tige de verre recourbée stérilisée (trempée dans l'éthanol puis passée à la flamme et refroidi à l'air libre 1 minute). L'étalement s'effectue toujours de la plus haute dilution (10^{-7}) à la plus petite (10^{-1});

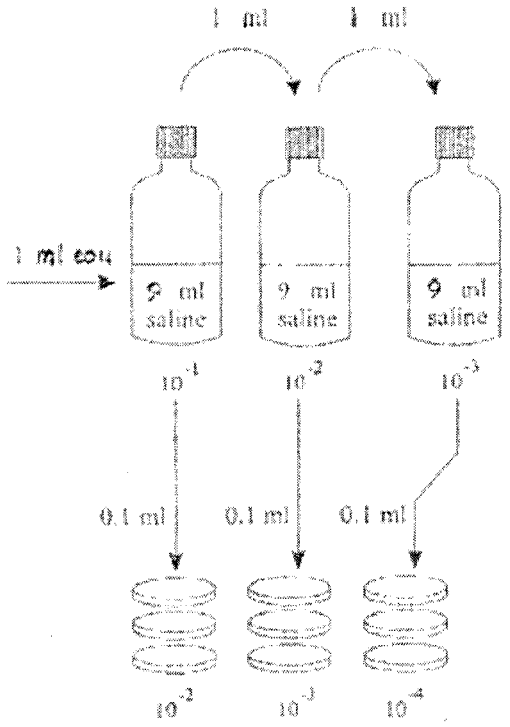
4.5.3 Après l'étalement, inverser les pétris et les empiler;

4.5.4 Incuber les pétris dans un sac anaérobie rempli d'azote, dans le frigidaire à 10 C, dans le noir.

4.6 Procédure pour le comptage des colonies

Les pétris sont retirés aux 7 jours de l'incubation. Seulement ceux contenant 30 à 300 colonies sont considérés. Le comptage se fait manuellement à l'aide du compteur Québec. Les pétris contenant de la contamination sont exclus du compte final, les colonies étendues aussi.

SCHÉMA OPÉRATIONNEL



N.B. Pour les échantillons de sol, la première dilution se fait avec 10 g dans 95 mL (voir section 4.4)

4. CALCULS

Effectuer une moyenne du nombre de colonies par pétri pour une dilution donnant entre 30 et 300 colonies. La détermination du nombre de UFC par gramme (unités formatrices de colonies par gramme) se calcule ainsi pour un échantillon de sol :

$$\text{UFC/g} = \frac{(\text{compte moyen de la dilution})(\text{facteur de dilution})(\text{FC})}{\text{Poids sec du sol}}$$

où poids sec = (poids sol humide*(1 - % humidité)) / 100

FC = Facteur de correction pour l'étalement. Ce facteur est égal à 10 car lors de l'étalement on ne prélève que 0,1 mL.

N.B. Pour un échantillon d'eau, le UFC est calculé de la même façon sauf qu'il n'est pas divisé par un poids sec.

5. RÉFÉRENCE(S)

PSO-A4, Dénombrement total de colonies bactériennes hétérotrophes par la méthode du comptage sur pétris ou méthode des comptes viables. Sandra Estrela (1996)

P33-C, Dénombrement de microflores tolérantes aux cyanures et dénombrement sélectif par la méthode du comptage direct sur pétris ou méthode des comptes viables. Kahina Oudjehani (1999)

6. NOTE(S)

Toutes les manipulations entraînant une possible exposition au liquide/gaz contenant du cyanure doit se faire sous la hotte.

ANNEXE IX

Protocole D - *Essais de biodégradation en macrocosme du cyanure contenu dans l'eau souterraine d'un site contaminé*



PROTOCOLE STANDARD
D'OPÉRATION

Protocole # :P61-D	Nombres de pages : 6
Version :7	Date : 29-11-2004
Auteur(s): Ian Gagnon	
Approuvé par :	Signatures : Date :
Gérald Zagury	☐
Manon Leduc	☐
	☐

Titre : Essais de biodégradation en macrocosme du cyanure contenu dans l'eau souterraine d'un site contaminé.
Mots clés : Cyanure, eau souterraine, biodégradation, macrocosmes, ammoniac, nitrate.

1. OBJECTIF

Déterminer si la microflore indigène présente dans l'eau souterraine ainsi que dans le sol provenant d'un site contaminé aux cyanures a la capacité de dégrader les cyanures à l'aide d'essais de biodégradation. De là, déterminer si le site en question a un potentiel d'atténuation naturelle par voie de biodégradation.

2. PRINCIPE DE LA MÉTHODE

La biodégradation des complexes ferrocyanures peut être étudiée à l'aide de macrocosmes. Or, comme les conditions de terrain de nos échantillons correspondent à des conditions réduites, la formation de CO_2 est inhibée par l'absence d'oxygène. Dans ce cas, il est suggéré (Meehan et al., 1999) de suivre les composés contenant de l'azote (NH_3, NO_3) pour permettre de conclure que la diminution en CN total provient bel et bien de la biodégradation.

Les dénombrements bactériens effectués au préalable font état de la présence de 10^3 à 10^5 UFC/ml dans l'eau et de 10^4 à 10^6 UFC/g dans le sol, et ce, en présence et en absence de cyanure dans le milieu de culture.

Les essais se feront en phase boueuse puisqu'une structure solide est nécessaire pour aider les bactéries à se fixer et dégrader les cyanures. Les macrocosmes seront conservés dans le noir, à 10 C (température de l'eau souterraine) et légèrement agités. Les témoins abiotiques seront amendés de formaldéhyde (Tuominen, L et al. (1994), Von Roge, H et al. (1998)) à une concentration de 0,11%p/p. À cette concentration, l'activité microbienne est inhibée de façon efficace et l'influence du formaldéhyde sur le pH est minimisé.

3. MATÉRIEL

- 16 bouteilles autoclavables de 2 L en pyrex, réutilisables avec bouchons oranges munis d'un bouchon bleu en caoutchouc pour l'échantillonnage;
- Azote (cylindre, Air Liquide, pureté Alpha 1);
- Balance 16 kg;
- Échantillons de sol et d'eau souterraine (PN3B, PN2A, MW12A, PZ3);
- Bouteilles (vials à scintillation) de 20 mL avec bouchons;
- Cellules pour le spectrophotomètre (10 ml et 25 ml);
- Eau déionisée;
- Filtres 0,45 um (Durapore Millex, d=25mm, SLHV025NB) ou unités filtrantes 250 mL;
- Formaldéhyde (Sigma F-8775, solution 36,5-38%);
- Gants de latex;
- Gants de nitrile;

- Gants isolants;
- pH mètre;
- Plaque giratoire (New Brunswick);
- Réactifs pour la spectrophotométrie : cyanurate (26531-99), salicytate (26532-99) et NitraVer 5 (14034-99);
- Seringues en plastique BD (5 mL et 60 ml) et aiguilles en acier inoxydable de 6 et 12 pouces;
- Solution concentrée de $K_4Fe(CN)_6$ à 250 mg CN/L (voir P61A);
- Spatules;
- Spectrophotomètre Hach 2020;
- Tubes d'échantillonage (50 mL, jetables, stériles) avec bouchons.

4. MODE OPÉRATOIRE

4.1 Vision globale (pour chaque puits étudié (4)) :

- 3 réacteurs (triplicatas) + 2 réacteurs abiotiques (20 réacteurs au total)
- Ratio eau :sol de 10 :1
- 12 échantillonnages par réacteur sur une période de 56 jours (240 échantillon au total)
- Analyse sur place pour : pH, redox, NH_3, NO_3 (voir protocoles en annexe)

Analyse externe pour : CN total (25 mL, NaOH 1M (1mL))

Tableau 1 : Identification des réacteurs et masses introduites

Série	Puits	#	Sol (g)	Eau (g)	$K_4Fe(CN)_6$ (g)	CH_2O (g)
A	**PN2A**	**1**				
		2				
		3				
		4				
B	**MW12A**	**1**				
		2				
		3				
		4				
C	**PN3B**	**1**				
		2				
		3				
		4				
D	**PZ3**	**1**				
		2				
		3				
		4				

4.2 Autoclaver les bouteilles autoclavables de 2 L pendant 25 min (t = 121°C 200 kPa);

4.3 Identifier les 20 réacteurs (bouteilles de 2 L) selon le puits et le numéro du réacteur (voir tableau 1);

*Travailler sous la hotte

4.4 Peser précisément (± 0,1g), dans chaque bouteille, environ 180 g de sol du puits correspondant (noter, voir tableau 1);

4.5 Ajouter, dans les bouteilles (réacteurs) reliées aux puits PN2A et MW12A, environ 1,8 kg (noter précisément à ± 0,1g) de l'eau souterraine correspondante et dans les bouteilles (réacteurs) reliées au puits PN3B et PZ3, environ 1,760 kg (noter précisément à ± 0,1g) d'eau souterraine correspondante et 36 mL d'une solution concentrée (250 ppm) de $K_4Fe(CN)_6$ à l'aide d'une seringue de 60 mL (correspond à une concentration de 5 mg CN/L) (noter, voir tableau 1);

4.6 Ajouter, à l'aide d'une seringue de 10 mL, dans les réacteurs abiotiques, environ 5,5 mL de formaldéhyde (0,11%p/p*2 kg = 2,2 g Formaldéhyde (5,5 mL d'une solution 37% ayant une masse volumique de 1,09 g/mL)). *Isoler les réacteurs abiotiques des autres réacteurs.

4.7 Buller les bouteilles (réacteurs) à l'aide d'azote afin de créer des conditions réductrices (POR d'au plus 0 mV pour les puits PN3B, PZ3 et MW12A et d'au plus -200 mV dans le puits PN2A – mesurer à l'aide d'une sonde à POR à l'intérieur des bouteilles) dans les réacteurs;

4.8 Fermer hermétiquement les bouteilles (réacteurs);

4.9 Placer les bouteilles (réacteurs) sur une plaque giratoire (125 rpm), dans la chambre froide à 10 C, en prenant soin de les recouvrir pour les protéger de la lumière (envelopper de papier d'aluminium);

Échantillonnage

4.10 Retirer les bouteilles (réacteurs) de la plaque et, à l'aide d'une seringue de 60 mL préalablement remplie d'azote, prélever au moins 60 mL de liquide de chaque bouteille pour les tests du CN total (25 mL), les tests du NO_3 (25 mL) et les tests du NH_3 (10 mL) en insérant l'aiguille dans le bouchon;

4.11 Filtrer les échantillons à l'aide de filtres 0,45 um (ou d'une unité filtrante) au bout de la seringue;

4.12 Mettre précisément 25 mL dans un tube d'analyse du laboratoire contenant du NaOH (1M, 1mL), 25 mL dans un tube et 10 mL dans des bouteilles de 20 mL;

4.13 Mesurer le pH, le potentiel redox et la température (PSO A3);

4.14 Replacer les bouteilles (réacteurs) sur la plaque (voir 4.9);

4.15 Envoyer les échantillons pour le CN total au laboratoire d'analyse;

4.16 Analyser les échantillons pour le NH_3 et le NO_3 à l'aide du spectrophotomètre («Method 8155» - Ammoniac - 0 à 0,50 mg $N–NH_3$/L (Hach, p.831-836) et «Cadmium Reduction Method» - Nitrate – 0 à 4,5 mg $N–NO_3^-$/L (Hach, p.785-791)).

Horaire d'échantillonnage (numéro du jour) : 0, 7, 14, 21, 28, 35, 38, 42, 45, 49, 52, 56.

RÉSULTATS

Des graphiques montrant l'évolution de la concentration en CN_{tot} de pair avec celle du NH_3 et du NO_3 permettra de faire un bilan sur l'azote et de déterminer si une éventuelle baisse du CN (tot) est due à des phénomènes biologiques ou abiotiques.

RÉFÉRENCE(S)

Hach, Water Analysis Handbook 2nd Edition, 1992

Meehan et al. (1999), The Biodegradation of Cyanide in Groundwater at Gasworks Sites, Australia : Implication for Site Management.

Tuominen, L., Kairesalo, T., et Hartikainen, H. (1994), Comparison of Methods for Inhibiting Bacterial Activity in Sediment, Enzyme and Microbial Technology, 24, p.255-262.

Von Rege, H. et Sand, W. (1998), Evaluation of Biocide Efficacy by Microcalimetric Determination of Microbial Activity in Biofilms, Journal of Microbiology Methods, 33, p.227-235.

P33-D, Tests de biodégradation en microcosmes des cyanures contenus dans un résidu minier. Kahina Oudjehani (2000)

NOTE(S)

Toutes les manipulations entraînant une possible exposition au liquide/gaz doit se faire sous la hotte.

Tableau 2 : Masses introduites dans les réacteurs

Série	Puits	#	Sol (g)	Eau (g)	$K_4Fe(CN)_6$ (g)	CH_2O (g)
A	**PN2A**	**1**	180,6	1800,5	-	-
		2	179,8	1801,3	-	-
		3	180,3	1801,3	-	-
		4	179,9	1800,8	-	5,5
		5	180,2	1802,6	-	5,5
B	**MW12A**	**1**	180,2	1802,6	-	-
		2	180,0	1799,8	-	-
		3	180,4	1800,1	-	-
		4	180,0	1800,4	-	5,5
		5	180,3	1802,8	-	5,5
C	**PN3B**	**1**	179,9	1766,3	36,0	-
		2	180,0	1767,1	36,0	-
		3	180,3	1763,6	36,0	-
		4	180,4	1765,2	36,0	5,5
		5	180,6	1764,8	36,0	5,5
D	**PZ3**	**1**	179,5	1765,2	36,0	-
		2	181,0	1765,2	36,0	-
		3	179,9	1767,0	36,0	-
		4	180,6	1767,1	36,0	5,5
		5	180,4	1764,1	36,0	5,5

ANNEXE X

Résultats – Macrocosmes

		Jour											
PN2A - Biotique	A1	1	8	15	22	29	36	39	43	46	50	57	65
	cn tot (mg/L)	4,8	6	5,5	4,9	5,6	5,7	5,7	5,6	5,5	5	5,5	5,4
	nh3 (mg/L)	88	108	196	260,13	266,8	233,45	260	370	400	420	160	420
	no3 (mg/L)	60	50	60	42,5	47,5	47,5	47,5	47,5	45	45	45	42,5
	redox	-27,3	50,4	-39,3	-70,6	-51,1	76	38,8	27,1	22,4	15,5	122	-10,6
	ph	9,63	9,56	9,58	9,58	9,5	9,53	9,39	9,45	9,47	9,45	8,75	8,85
	A2	1	8	15	22	29	36	39	43	46	50	57	65
	cn tot (mg/L)	4,4	4,7	4,8	4,7	5,3	5,3	4,9	4,8	4,65	4,7	4,6	4,7
	nh3 (mg/L)	74	98	200	286,81	286,81	320,16	360	380	450	430	240	400
	no3 (mg/L)	50	50	60	35	35	45	37,5	37,5	30	32,5	32,5	32,5
	redox	-44,2	-314,1	-147,6	-226,2	-103,7	26,7	-146,8	-190,8	-266,7	-219,8	-231,3	-342,7
	ph	9,75	9,65	9,69	9,69	9,62	9,63	9,54	9,61	9,62	9,57	8,89	8,97
	A3	1	8	15	22	29	36	39	43	46	50	57	65
	cn tot (mg/L)	4,1	4,4	5,5	4,9	3,1	3,1	4,9	4,8	4,5	4,7	4,6	4,6
	nh3 (mg/L)	96	94	200	326,83	273,47	333,5	350	420	450	540	260	500
	no3 (mg/L)	50	50	50	37,5	37,5	32,5	32,5	47,5	35	32,5	37,5	35
	redox	-50,3	-92,8	-226,4	-338,5	-209,2	1,4	-272,4	-244,6	-227,4	-69,2	-277,5	-332,3
	ph	9,81	9,72	9,76	9,74	9,7	9,71	9,69	9,69	9,7	9,69	9	9,03
		Jour											
PN2A - Abiotique	A4	1	8	15	22	29	36	39	43	46	50	57	65
	cn tot (mg/L)	4,1	4,4	4,6	4,6	4,9	4,8	4,9	4,7	4,5	4,9	4,6	4,7
	nh3 (mg/L)	0	0	0	0,3	0,2	0,2	0,2	0,2	0,1	0,1	0	0,2
	no3 (mg/L)	40	60	50	32,5	30	30	32,5	35	32,5	27,5	32,5	35
	redox	-109,2	-77,6	-49,1	-102,7	-59	-68	-75,9	-67	-49,4	-47,3	-75,3	-95,1
	ph	9,78	9,67	9,73	9,66	9,65	9,62	9,61	9,6	9,61	9,58	8,98	9,05
	A5	1	8	15	22	29	36	39	43	46	50	57	65
	cn tot (mg/L)	4,2	4,6	5,4	5,4	5,5	5,8	5,9	5,4	5,3	5,4	5,3	6,1

PN2A - Abiotique	nh3 (mg/L)	0	0	0	0,2	0,1	0,1	0	0,1	0	0,1	0	0
	no3 (mg/L)	40	40	50	30	40	35	42,5	42,5	42,5	35	37,5	37,5
	redox	-101,7	-67,7	-39,1	-85,9	-47,9	-42,7	-38,9	-25,9	-29,4	-20,4	-15,4	-37
	ph	9,74	9,61	9,71	9,58	9,61	9,59	9,57	9,56	9,56	9,54	9,02	9,06
		Jour											
MW12A - Biotique	B1	1	8	15	22	29	36	39	43	46	50	57	65
	cn tot (mg/L)	2,7	2,7	2,3	2,6	2,8	2,8	2,8	2,7	2,7	2,7	2,7	2,9
	nh3 (mg/L)	1,8	1,8	6,4	6	6,8	6,2	6	6,6	5,8	6	6	6
	no3 (mg/L)	7,5	7,5	7,5	6,75	7	7	7	6,75	7	7	7,25	7,25
	redox	-44,6	96,4	-21,7	-3,8	-6,5	116,3	74,5	66,6	55,7	51,7	51,8	58,2
	ph	9,74	9,58	9,58	9,51	9,18	9,45	9,33	9,33	9,34	9,4	8,73	8,7
	B2	1	8	15	22	29	36	39	43	46	50	57	65
	cn tot (mg/L)	2,7	2,6	2,1	2,6	2,4	2,7	2,9	2,6	2,6	2,8	2,5	2,8
	nh3 (mg/L)	5,8	4	6	6,4	6,4	5,8	5,8	5,8	5,8	6,2	6	6,2
	no3 (mg/L)	7,5	7,5	7,5	6,75	6,75	6,5	6,5	6,5	6,75	6,5	7	7
	redox	-48,6	91,4	-19,7	-4	-7,7	115,6	73	62,6	54	49,4	50,6	49,3
	ph	9,74	9,54	9,54	9,51	9,34	9,43	9,41	9,38	9,41	9,39	8,81	8,85
	B3	1	8	15	22	29	36	39	43	46	50	57	65
	cn tot (mg/L)	2,3	2,5	2,2	2,5	2,5	2,7	2,8	2,6	2,5	2,8	2,6	2,8
	nh3 (mg/L)	6,8	4,8	6	6	5,6	5,8	5,6	4,8	5,4	6,2	5,6	5,4
	no3 (mg/L)	7,5	5	7,5	6,25	6	5,75	5,75	6	6	6	6,25	6,25
	redox	-53,5	92,4	-17,5	-4,7	-9,8	95,5	69,6	53,3	53,8	49,6	50,9	48
	ph	9,63	9,46	9,53	9,36	9,26	9,27	9,28	9,24	9,25	9,26	8,68	8,75
		Jour											
MW12A - Abiotique	B4	1	8	15	22	29	36	39	43	46	50	57	65
	cn tot (mg/L)	2,1	2,3	2,5	2,5	2,5	2,5	2,6	2,4	2,3	2,6	2,3	2,5
	nh3 (mg/L)	0	0	0,02	0,02	0,02	0	0,01	0,01	0,01	0	0	0
	no3 (mg/L)	5	5	5	5,5	5,25	5	5	5	5	5	5	4,75

	redox	-64,8	-30	-39,8	-17,1	-26,7	-14,3	-3,6	12	22,6	25,3	35,9	41
	ph	9,63	9,36	9,34	9,09	9,1	8,98	9,03	8,91	8,89	8,85	8,22	8,24
	B5	1	8	15	22	29	36	39	43	46	50	57	65
MW12A	cn tot (mg/L)	2	2,3	2,5	2,4	2,5	2,5	2,6	2,4	2,4	2,7	2,4	2,5
-	nh3 (mg/L)	0	0	0,04	0,02	0,02	0,01	0	0	0	0	0	0
	no3 (mg/L)	5	5	7,5	5,25	5	4,75	4,75	4,75	4,75	4,5	4,75	4,25
Abiotiqu	redox	-64,8	-41,4	-36	-16,4	-20,2	-2,3	7,4	27,3	26	35,1	53,4	55,5
e	ph	9,7	9,31	9,34	8,78	8,97	8,69	8,81	8,73	8,71	8,63	8,03	7,99
		Jour											
	C1	1	8	15	22	29	36	39	43	46	50	57	65
	cn tot (mg/L)	3,6	2,4	2,2	0,63	0,14	0,07	0,08	0,06	0,07	0,06	0,05	0,04
	nh3 (mg/L)	10	14	17,2	17	19,5	21	19,5	20	21,5	16	19,5	18
	no3 (mg/L)	2,5	2,5	3,5	1,9	1,9	1,9	2,3	2,2	2,4	2,5	2,8	2,7
	redox	3,7	160,3	13,8	46,6	39,2	231	101,8	55,2	55,4	49,9	43	48,5
	ph	8,94	7,07	7,1	6,76	7,13	6,85	6,67	6,76	6,64	6,74	6,7	6,76
	C2	1	8	15	22	29	36	39	43	46	50	57	65
	cn tot (mg/L)	3,7	2,2	1,8	0,54	0,21	0,1	0,11	0,06	0,1	0,1	0,1	0,07
	nh3 (mg/L)	6,4	15,2	14	12,5	17,5	19,5	18	18,5	18	14	18,5	16
	no3 (mg/L)	1,5	2	3	2,2	2,1	2,1	2,1	2,2	2,3	2,2	2,7	3,4
	redox	4,2	172,6	78,5	57,6	45,6	242,6	106,3	59,8	57,3	50,7	42,2	52,3
	ph	9,05	6,96	6,87	6,61	6,92	6,77	6,67	6,72	6,66	6,74	6,38	6,57
	C3	1	8	15	22	29	36	39	43	46	50	57	65
	cn tot (mg/L)	3,4	0,61	0,23	0,14	0,15	0,06	0,09	0,04	0,05	0,05	0,05	0,05
	nh3 (mg/L)	13,2	16	14,4	6	15	18,5	17	16,5	17,5	14,5	18,5	16,5
	no3 (mg/L)	1	1,5	1	0,7	0,7	0,9	1,6	0,9	0,9	1,5	3,1	3,8
	redox	44,2	191,5	84,3	75,5	60,8	275,5	116	98,6	104,2	98,1	75,6	69,3
	ph	7,77	6,58	6,23	6,17	6,31	6,31	6,37	6,27	6,24	6,27	5,98	6,11

PZ3 - Biotique

		Jour											
PZ3 - Abiotique	C4	1	8	15	22	29	36	39	43	46	50	57	65
	cn tot (mg/L)	3,1	0,23	0,09	0,05	0,04	0,01	0	0	0	0	0	0
	nh3 (mg/L)	0	2,8	0	0	0,06	0,18	0,14	0,08	0,06	0,14	0,1	0,06
	no3 (mg/L)	1	1	1	1,1	1,1	1,2	1,1	1,3	1,5	1,8	2,5	2,2
	redox	30,3	195,6	66	54,9	52,1	112,3	129,9	135,9	156	157,5	151,4	172,6
	ph	7,57	6,42	6,29	6,08	6,2	6,18	6,23	6,14	6,08	6,1	5,74	5,77
PZ3 - Abiotique	C5	1	8	15	22	29	36	39	43	46	50	57	65
	cn tot (mg/L)	3,1	0,26	0,11	0,07	0,05	0,02	0,04	0,04	0,04	0	0,03	0
	nh3 (mg/L)	0	2,8	0	0,46	0,08	0,2	0,1	0,12	0,26	0,08	0,06	0,08
	no3 (mg/L)	0,5	1	1	1,1	1	1	0,9	0,8	1	1,1	1,2	1
	redox	25,5	78,1	61,2	55,2	48,8	110,3	122,9	130,1	149,9	145,1	143,2	172,8
	ph	7,72	6,46	6,37	6,12	6,29	6,49	6,18	6,18	6,21	6,19	5,73	5,76
		Jour											
PN3B - Biotique	D1	1	8	15	22	29	36	39	43	46	50	57	65
	cn tot (mg/L)	3,6	3,6	3,5	3,4	3	3,8	4,2	3,6	3,6	4,1	3,9	3,9
	nh3 (mg/L)	0,03	0,25	0,21	0,2	0,19	0,11	0,14	0,17	0,15	0,18	0,17	0,12
	no3 (mg/L)	1,2	1,4	1,3	1,4	1,5	1,4	1,2	1,2	1,1	1	1,2	1,1
	redox	-37,8	-19,1	-36,7	-37,4	-31,1	153,2	110,9	103,5	99,9	92,1	86,9	87,5
	ph	9,46	9,16	9,39	9,33	9,15	9,22	8,88	9	8,92	8,96	8,89	8,73
	D2	1	8	15	22	29	36	39	43	46	50	57	65
	cn tot (mg/L)	3,8	3,7	3,2	3,9	3,3	4	4,3	3,8	3,8	4,3	4,1	4,1
	nh3 (mg/L)	0	0,22	0,14	0,12	0,14	0,08	0,11	0,14	0,14	0,16	0,06	0,12
	no3 (mg/L)	1,1	1,4	1,4	1,4	1,4	1,4	1,3	1,3	1,1	1,1	1,2	1,2
	redox	-40,6	-24,1	-35,9	-41,5	-34,2	161,6	96,8	91,9	80,4	76,6	71,8	70,7
	ph	9,49	9,28	9,47	9,41	9,23	9,25	9,17	9,23	9,2	9,16	9,07	9,02
	D3	1	8	15	22	29	36	39	43	46	50	57	65

	cn tot (mg/L)	3,5	3,4	3,8	3,3	3,3	3,8	4	3,7	3,6	4,1	3,8	3,8
	nh3 (mg/L)	0	0,24	0,17	0,12	0,11	0,1	0,11	0,16	0,14	0,14	0,07	0,12
	no3 (mg/L)	1,1	1,4	1,3	1,4	1,4	1,3	1,2	1,3	1,1	1,1	1,2	1,2
	redox	-45,7	-24	-35,4	-37,5	-38,6	138,4	63,6	61,4	62,4	62,9	60,3	54,9
	ph	9,5	9,31	9,5	9,41	9,27	9,27	9,21	9,26	9,23	9,21	9,11	9,06
		Jour											
PN3B - Abiotique	D4	1	8	15	22	29	36	39	43	46	50	57	65
	cn tot (mg/L)	3,4	3,5	3,5	3,5	3,9	3,7	3,8	3,6	3,4	3,9	3,6	3,7
	nh3 (mg/L)	0	0,01	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
	no3 (mg/L)	0,8	1,1	1	1	1	1	1	1,1	1	1	1,1	1,1
	redox	-54,6	-37,4	-42,3	-51,3	-47,5	-34,8	-10,3	-4,5	0,5	-0,9	-1,3	0,5
	ph	9,49	9,32	9,44	9,38	9,26	9,2	9,23	9,23	9,22	9,19	9,08	9,02
		Jour											
PN3B - Abiotique	D5	1	8	15	22	29	36	39	43	46	50	57	65
	cn tot (mg/L)	3,6	3,6	3,7	3,7	0,2	3,9	4,3	3,7	3,5	4,2	3,9	3,4
	nh3 (mg/L)	0	0,01	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
	no3 (mg/L)	0,9	1,1	1	1,1	1,1	1,1	1,1	1,1	1,1	1,1	1,2	1,2
	redox	-48,8	-31,9	-47,6	-54,3	-44,8	-32,5	-13,5	-5,9	8,3	3,4	6,7	7,3
	ph	9,46	9,32	9,41	9,37	9,26	9,13	9,23	9,23	9,22	9,19	9,06	9,02

ANNEXE XI

Résultats – Adsorption

	PN2A					PN3B					MW12A					PZ3			
	pH	pH Moy.	redox (mV)	redox Moy.		pH	pH Moy.	redox (mV)	redox Moy.		pH	pH Moy.	redox (mV)	redox Moy.		pH	pH Moy.	redox (mV)	redox Moy.
2101A	6,24	6,6	61,6	52,6	4101A	4,6	4,605	134,6	153,65	3101A	6,27	7,375	165,5	155,75	1101A	4,26	4,065	201,9	213,8
2101B	6,96		43,6		4101B	4,61		172,7		3101B	8,48		146		1101B	3,87		225,7	
2102A	7,25	7,47	51,9	49,45	4102A	4,68	4,685	187,5	195,45	3102A	6,28	6,48	104,1	103,2	1102A	8,33	8,71	38,9	30,9
2102B	7,69		47		4102B	4,69		203,4		3102B	6,68		102,3		1102B	9,09		22,9	
2103A	5,84	6,66	48,5	38,45	4103A	4,67	4,7	201,4	195,1	3103A	5,7	6,375	92,6	93,1	1103A	7,06	6,935	67,6	93,8
2103B	7,48		28,4		4103B	4,73		188,8		3103B	7,05		93,6		1103B	6,81		120	
2104A	8,12	8,09	80,5	83,4	4104A	4,7	4,75	191,6	191,95	3104A	5,8	5,99	94	95	1104A	7,21	7,13	104,3	117,85
2104B	8,06		86,3		4104B	4,8		192,3		3104B	6,18		96		1104B	7,05		131,4	
2105A	6,25	7,08	-168,4	-169,65	4105A	4,73	4,775	167,5	169,35	3105A	6,36	6,7	15,3	12,55	1105A	7,05	6,95	103,9	103,45
2105B	7,91		-170,9		4105B	4,82		171,2		3105B	7,04		9,8		1105B	6,85		103	
2106A	8,05	7,975	-135,9	-142	4106A	4,61	4,72	160,9	163,5	3106A	6,22	6,22	62,8	62,8	1106A	7,13	7,1	60,3	65,1
2106B	7,9		-148,1		4106B	4,83		166,1		3106B	6,22		62,8		1106B	7,07		69,9	
2107A	6,3	6,955	-53,3	-99,3	4107A	4,67	4,725	161,7	164,4	3107A	5,79	6,195	44,6	41,9	1107A	7,29	7,175	27,5	29,05
2107B	7,61		-145,3		4107B	4,78		167,1		3107B	6,6		39,2		1107B	7,06		30,6	
2108A	8,1	7,99	-118,8	-125,1	4108A	4,84	4,84	203,3	200,75	3108A	6,11	6,28	41,5	64,3	1108A	7,17	7,125	33,6	34,5
2108B	7,88		-131,4		4108B	4,84		198,2		3108B	6,45		87,1		1108B	7,08		35,4	
2109A	8,08	8,115	-119,2	-126,7	4109A	4,97	4,96	171,7	185,1	3109A	6,14	6,39	63,1	58,35	1109A	7,3	7,18	34	34,95
2109B	8,15		-134,2		4109B	4,95		198,5		3109B	6,64		53,6		1109B	7,06		35,9	
2110A	8,08	8,1	-104,6	-111,05	4110A	4,63	4,725	205,7	206,85	3110A	5,97	6,195	48,6	48	1110A	4,93	5,57	48,6	40,45
2110B	8,12		-117,5		4110B	4,82		208		3110B	6,42		47,4		1110B	6,21		32,3	
2111A	8,05	8,03	-83,3	-94,4	4111A	4,93	4,99	184,5	185,55	3111A	6,88	7,025	98	85,05	1111A	7,62	7,54	-72,9	-78,1
2111B	8,01		-105,5		4111B	5,05		186,6		3111B	7,17		72,1		1111B	7,46		-83,3	
2112A	7,7	7,7	-100,2	-100,2	4112A	5,32	5,265	185,4	187,65	3112A	6,4	6,845	81,7	82,9	1112A	7,29	7,215	-146,1	-132
2112B	7,7		-100,2		4112B	5,21		189,9		3112B	7,29		84,1		1112B	7,14		-117,9	
2201A	7,48	7,695	23,4	20,8	4201A	4,65	4,665	181,2	184,4	3201A	7,66	7,9	126,8	131,3	1201A	6,07	6,22	141,3	133,35

2201B	7,91		18,2		4201B	4,68		187,6		3201B	8,14		135,8		1201B	6,37		125,4	
2202A	7,97	7,99	15,3	16,55	4202A	4,74	4,75	194,7	200,9	3202A	6,89	6,96	102,1	102,7	1202A	8,85	8,545	24,7	31,6
2202B	8,01		17,8		4202B	4,76		207,1		3202B	7,03		103,3		1202B	8,24		38,5	
2203A	7,83	7,94	-1,2	-3,45	4203A	4,78	4,82	180,1	175,85	3203A	7,24	7,28	94,5	91,6	1203A	6,66	6,48	124,4	129,25
2203B	8,05		-5,7		4203B	4,86		171,6		3203B	7,32		88,7		1203B	6,3		134,1	
2204A	8,16	8,16	83,5	82,25	4204A	4,82	4,835	195,4	196,6	3204A	6,34	6,42	68,3	86,3	1204A	7	7,025	123,9	123,9
2204B	8,16		81		4204B	4,85		197,8		3204B	6,5		104,3		1204B	7,05		123,9	
2205A	7,87	7,9	-19,7	2,15	4205A	4,83	4,85	203,8	200,9	3205A	7,4	7,43	106	102,65	1205A	7,31	7,295	148,4	150,85
2205B	7,93		24		4205B	4,87		198		3205B	7,46		99,3		1205B	7,28		153,3	
2206A	6,85	6,055	-28	-31,05	4206A	4,84	4,84	181,9	188,8	3206A	7,72	7,82	95,7	92,7	1206A	6,85	6,825	147,2	147,85
2206B	5,26		-34,1		4206B	4,84		195,7		3206B	7,92		89,7		1206B	6,8		148,5	
2207A	7,67	7,72	45,9	43,1	4207A	4,79	4,82	186,2	192,3	3207A	6,87	6,935	88,5	92,5	1207A	6,82	6,785	149,1	139
2207B	7,77		40,3		4207B	4,85		198,4		3207B	7		96,5		1207B	6,75		128,9	
2208A	7,88	7,8	66,9	55,9	4208A	4,84	4,84	195,5	205	3208A	6,47	6,55	64,4	68,4	1208A	6,87	6,85	142,6	136,65
2208B	7,72		44,9		4208B	4,84		214,5		3208B	6,63		72,4		1208B	6,83		130,7	
2209A	8,01	8,005	63,8	67,1	4209A	4,89	4,86	204,8	207,05	3209A	6,59	6,7	113,2	109,45	1209A	6,93	6,89	98,2	114,85
2209B	8		70,4		4209B	4,83		209,3		3209B	6,81		105,7		1209B	6,85		131,5	
2210A	7,82	7,785	103,6	110,15	4210A	4,78	4,765	207,3	202,65	3210A	6,45	6,495	99,2	100	1210A	6,26	6,295	70,9	80,3
2210B	7,75		116,7		4210B	4,75		198		3210B	6,54		100,8		1210B	6,33		89,7	
2211A	7,79	7,78	88,9	105,7	4211A	5,26	5,26	148,5	150,65	3211A	6,56	6,68	120,1	123,1	1211A	7,19	7,185	61,4	64,5
2211B	7,77		122,5		4211B	5,26		152,8		3211B	6,8		126,1		1211B	7,18		67,6	
2212A	8,02	7,87	98,5	121,85	4212A	5,26	5,23	162,6	165,9	3212A	7,37	7,395	141,6	168,65	1212A	7,42	7,515	82,3	99,4
2212B	7,72		145,2		4212B	5,2		169,2		3212B	7,42		195,7		1212B	7,61		116,5	
2301A	9,83	9,835	-163,5	-154,6	4301A	8,66	8,765	118,7	118,1	3301A	9,76	9,79	80,1	77,35	1301A	9,5	9,51	26,3	23,3
2301B	9,84		-145,7		4301B	8,87		117,5		3301B	9,82		74,6		1301B	9,52		20,3	
2302A	9,78	9,78	-84,3	-84	4302A	7,97	7,845	145,9	132,85	3302A	9,59	9,65	-78,4	-51,35	1302A	9,45	9,485	14,1	12,5
2302B	9,78		-83,7		4302B	7,72		119,8		3302B	9,71		-24,3		1302B	9,52		10,9	
2303A	9,72	9,73	-90,2	-91,8	4303A	7,33	7,365	136	135,6	3303A	9,47	9,515	-28,8	-30,1	1303A	9,44	9,51	36,3	32,3

2303B	9,74		-93,4		4303B	7,4		135,2		3303B	9,56		-31,4		1303B	9,58		28,3	
2304A	9,77	9,78	-92,6	-92,95	4304A	7,24	7,175	149,2	143,8	3304A	9,6	9,61	70,2	68,55	1304A	9,42	9,48	48,5	47,5
2304B	9,79		-93,3		4304B	7,11		138,4		3304B	9,62		66,9		1304B	9,54		46,5	
2305A	9,78	9,795	-90,6	-95,8	4305A	7,29	7,22	91,3	83,5	3305A	9,53	9,57	78,7	72,4	1305A	9,22	9,4	-1,8	-0,9
2305B	9,81		-101		4305B	7,15		75,7		3305B	9,61		66,1		1305B	9,58		0	
2306A	9,8	9,8	-52,5	-52,45	4306A	7,27	6,995	100,5	100,5	3306A	9,53	9,545	82,1	78,8	1306A	9,55	9,55	1,3	0,9
2306B	9,8		-52,4		4306B	6,72		100,5		3306B	9,56		75,5		1306B	9,55		0,5	
2307A	9,77	9,765	-91,2	-93,9	4307A	7,34	7,29	115,3	114,3	3307A	9,38	9,45	79,6	77,75	1307A	9,55	9,58	-4,3	-11,95
2307B	9,76		-96,6		4307B	7,24		113,3		3307B	9,52		75,9		1307B	9,61		-19,6	
2308A	9,75	9,745	-60,5	-60,9	4308A	7,23	7,24	100,1	110,45	3308A	9,25	9,35	79,2	76,35	1308A	9,5	9,53	-40,7	-41,6
2308B	9,74		-61,3		4308B	7,25		120,8		3308B	9,45		73,5		1308B	9,56		-42,5	
2309A	9,76	9,755	-105,3	-101,65	4309A	7,28	7,295	132,6	130,65	3309A	9,36	9,415	83,4	81,1	1309A	9,4	9,455	-47,1	-49,95
2309B	9,75		-98		4309B	7,31		128,7		3309B	9,47		78,8		1309B	9,51		-52,8	
2310A	9,74	9,735	-62,9	-67,55	4310A	7,22	7,365	162,1	159,15	3310A	9,26	9,335	76,1	74,3	1310A	9,41	9,42	-25,2	-24,35
2310B	9,73		-72,2		4310B	7,51		156,2		3310B	9,41		72,5		1310B	9,43		-23,5	
2311A	9,7	9,685	-110,2	-109,05	4311A	7,47	7,475	148,4	147,2	3311A	9,58	9,62	47,6	46,3	1311A	9,47	9,445	-234,1	-229,15
2311B	9,67		-107,9		4311B	7,48		146		3311B	9,66		45		1311B	9,42		-224,2	
					4312A	7,33	7,345	107,5	96,95						1312A	9,41	9,365	-235,2	-235,65
					4312B	7,36		86,4							1312B	9,32		-236,1	
2401A	9,79	9,79	-128,1	-124,75	4401A	9,78	9,465	81,6	80,75	3401A	9,62	9,65	73,8	72,35	1401A	9,33	9,305	20,9	20,5
2401B	9,79		-121,4		4401B	9,15		79,9		3401B	9,68		70,9		1401B	9,28		20,1	
2402A	9,73	9,69	-90,2	-90,35	4402A	8,61	8,505	120,7	117,35	3402A	9,61	9,62	-76,1	-76,35	1402A	9,18	9,115	19,1	19,05
2402B	9,65		-90,5		4402B	8,4		114		3402B	9,63		-76,6		1402B	9,05		19	
2403A	9,75	9,75	-99,5	-100,3	4403A	7,96	7,94	122,3	122,75	3403A	9,61	9,605	-27,8	-27,7	1403A	9,27	9,195	28,9	30,4
2403B	9,75		-101,1		4403B	7,92		123,2		3403B	9,6		-27,6		1403B	9,12		31,9	
2404A	9,73	9,73	-106,9	-103,55	4404A	7,82	7,9	134,8	133,65	3404A	9,56	9,545	66,4	65,45	1404A	8,88	8,67	52,7	56,25
2404B	9,73		-100,2		4404B	7,98		132,5		3404B	9,53		64,5		1404B	8,46		59,8	

2405A	9,74	9,73	-102,4	-100,55	4405A	7,55	7,69	104,3	97,25	3405A	9,55	9,57	64,7	63,1	1405A	9,3	9,13	-22,7	-17,9
2405B	9,72		-98,7		4405B	7,83		90,2		3405B	9,59		61,5		1405B	8,96		-13,1	
2406A	9,71	9,675	-58,6	-65,25	4406A	7,21	7,25	61	76,3	3406A	9,51	9,405	69,9	72,15	1406A	9,4	9,095	0	5,35
2406B	9,64		-71,9		4406B	7,29		91,6		3406B	9,3		74,4		1406B	8,79		10,7	
2407A	9,73	9,71	-88,8	-87,4	4407A	7,34	7,405	105,7	104,55	3407A	9,53	9,54	73	71,85	1407A	9,26	9,18	-19	-16,15
2407B	9,69		-86		4407B	7,47		103,4		3407B	9,55		70,7		1407B	9,1		-13,3	
2408A	9,62	9,6	-92,4	-89,55	4408A	7,69	7,48	104,3	107,4	3408A	9,41	9,39	72,8	72,25	1408A	9,28	9,065	-30,9	-30,15
2408B	9,58		-86,7		4408B	7,27		110,5		3408B	9,37		71,7		1408B	8,85		-29,4	
2409A	9,72	9,68	-95	-93,35	4409A	7,16	7,175	124,8	119,7	3409A	9,43	9,435	72,2	73,35	1409A	9,05	9,03	-45,3	-43,2
2409B	9,64		-91,7		4409B	7,19		114,6		3409B	9,44		74,5		1409B	9,01		-41,1	
2410A	9,65	9,6	-262,2	-270,85	4410A	7,38	7,325	150,6	147,4	3410A	9,32	9,315	71,9	70,6	1410A	9,08	9,03	-19,8	-11,55
2410B	9,55		-279,5		4410B	7,27		144,2		3410B	9,31		69,3		1410B	8,98		-3,3	
2411A	9,5	9,535	-383,6	-385,1	4411A	7,78	7,77	126,6	105,95	3411A	9,65	9,625	45,4	46,35	1411A	9,2	8,89	-187,7	-171,5
2411B	9,57		-386,6		4411B	7,76		85,3		3411B	9,6		47,3		1411B	8,58		-155,3	
					4412A	7,56	7,66	104,8	98,55						1412A	8,67	8,695	-199,1	-202,25
					4412B	7,76		92,3							1412B	8,72		-205,4	

ANNEXE XII

Méthodologie – Analyse détaillée

METHODOLOGY

Outlines of the methodologies utilized for the analysis of the samples submitted are as follows

Miscellaneous Parameters and Matrices
The sample(s) submitted, or the parameters requested were identified as non-routine.

pH in Water
This analysis is carried out using procedures adapted from APHA Method 4500-H "pH Value". The pH is determined in the laboratory using a pH electrode.

Recommended Holding Time:
Sample: 2 hours
Reference: APHA

For more detail see ALS Environmental "Collection & Sampling Guide"

Alkalinity in Water by Titration
This analysis is carried out using procedures adapted from APHA Method 2320 "Alkalinity".

Total alkalinity is determined by potentiometric titration to a pH 4.5 endpoint. Bicarbonate, carbonate and hydroxide alkalinity are calculated from phenolphthalein alkalinity and total alkalinity values.

Recommended Holding Time:
Sample: 14 days
Reference: APHA

For more detail see ALS Environmental "Collection & Sampling Guide"

Dissolved Anions in Water by Ion Chromatography
This analysis is carried out using procedures adapted from APHA Method 4110 "Determination of Anions by Ion Chromatography" and EPA Method 300.0 "Determination of Inorganic Anions by Ion Chromatography". Anions are determined by filtering the sample through a 0.45 micron membrane filter and injecting the filtrate onto a Dionex IonPac AG17 anion exchange column with a hydroxide eluent stream. Anions routinely determined by this method include: bromide, chloride, fluoride, nitrate, nitrite and sulphate.

Recommended Holding Time:
Sample: 28 days (bromide, chloride, fluoride, sulphate)
Sample: 2 days (nitrate, nitrite)

Reference: APHA and EPA

For more detail see ALS Environmental "Collection & Sampling Guide"

Chloride in Water
This analysis is carried out using procedures adapted from APHA Method 4500 "Chloride".
Chloride is determined using the ferricyanide colourimetric method.

Recommended Holding Time:
Sample: 28 days
Reference: APHA

For more detail see ALS Environmental "Collection & Sampling Guide"

Fluoride in Water
This analysis is carried out using procedures adapted from APHA Method 4500-F "Fluoride".
Fluoride is determined using a selective ion electrode.

Recommended Holding Time:
Sample: 28 days
Reference: APHA

For more detail see ALS Environmental "Collection & Sampling Guide"

Sulphate in Water
This analysis is carried out using procedures adapted from APHA Method 4500-SO4 "Sulphate". Sulphate is determined using the turbidimetric method.

Recommended Holding Time:
Sample: 28 days
Reference: APHA

For more detail see ALS Environmental "Collection & Sampling Guide"

Ammonia in Water by Selective Ion Electrode
This analysis is carried out, on sulphuric acid preserved samples, using procedures adapted from APHA Method 4500-NH3 "Nitrogen (Ammonia)". Ammonia is determined using an ammonia selective electrode.

Recommended Holding Time:
Sample: 28 days
Reference: APHA

For more detail see ALS Environmental "Collection & Sampling Guide"

Phosphate in Water
This analysis is carried out using procedures adapted from APHA Method 4500-P "Phosphorus". All forms of phosphate are determined by the ascorbic acid colourimetric method. Dissolved ortho-phosphate (dissolved reactive phosphorous) is determined by direct measurement. Total phosphate (total phosphorous) is determined after persulphate digestion of a sample. Total dissolved phosphate (total dissolved phosphorous) is determined by filtering a sample through a 0.45 micron membrane filter followed by persulfate digestion of the filtrate.

Recommended Holding Time:
Sample: 2 days
Reference: EPA

For more detail see ALS Environmental "Collection & Sampling Guide"

Cyanide in Water by Membrane Diffusion
This analysis is carried out using procedures adapted from ASTM Method D4282 "Standard Test Method for the Determination of Free Cyanide in Water and Wastewater by Microdiffusion". Total cyanide is determined at pH 2 by UV digestion and amperometric detection. Cobalt and gold cyanide complexes are not detected by this procedure. Free cyanide is determined at pH 6 by amperometric detection.

Recommended Holding Time:
Sample: 14 days
Reference: APHA

For more detail see ALS Environmental "Collection & Sampling Guide"

Cyanide Species in Water
This analysis is carried out using procedures adapted from APHA Method 4500-CN "Cyanide". Total or strong acid dissociable (SAD) cyanide and weak acid dissociable (WAD) cyanide are determined by sample distillation and analysis using the chloramine-T colourimetric method. Cyanate is determined by the cyanate hydrolysis method using an ammonia selective electrode. Thiocyanate is determined by the ferric nitrate colourimetric method.

Recommended Holding Time:
Sample: 14 days
Reference: APHA

For more detail see ALS Environmental "Collection & Sampling Guide"

Metals in Water
This analysis is carried out using procedures adapted from "Standard Methods for the Examination of Water and Wastewater" 20th Edition 1998 published by the American Public Health Association, and with procedures adapted from "Test Methods for Evaluating Solid Waste" SW-846 published by the United States Environmental Protection Agency (EPA). The procedures may involve preliminary sample treatment by acid digestion, using either hotplate or microwave oven, or filtration (EPA Method 3005A). Instrumental analysis is by atomic absorption/emission spectrophotometry (EPA Method 7000 series), inductively coupled plasma - optical emission spectrophotometry (EPA Method 6010B), and/or inductively coupled plasma - mass spectrometry (EPA Method 6020).

Recommended Holding Time:
Sample: 6 months
Reference: EPA

For more detail see: ALS "Collection & Sampling Guide"

Sulphur in Water
This analysis is carried out using procedures adapted from "Standard Methods for the Examination of Water and Wastewater" 20th Edition 1998 published by the American Public Health Association, and with procedures adapted from "Test Methods for Evaluating Solid Waste" SW-846 published by the United States Environmental Protection Agency (EPA). The procedure involves analysis of the acidified sample by inductively coupled plasma - optical emission spectrophotometry (EPA Method 6010B) or inductively coupled plasma - mass spectrometry (EPA Method 6020).

Method Limitation: This method will not give total sulphur results for all samples. Sulphide or other volatile forms of sulphur that may be present in submitted samples, is often lost during the sampling, preservation and analysis process. The data reported as total and/or dissolved sulphur represents all non-volatile forms of sulphur present in a particular sample.

Recommended Holding Time:
Sample: 6 months
Reference: EPA

For more detail see ALS Environmental "Collection & Sampling Guide"

Light Gases in Water
This analysis is carried out using procedures adapted from "Test Methods for Evaluating Solid Waste" SW-846, Method 3810, published by the United States Environmental Protection Agency (EPA). The procedure involves taking a 5 mL subsample of the submitted water sample and transferring it to a 20 mL glass vial.

An aliquot of the gas from the vial is then injected onto a gas chromatograph with a thermal conductivity detector (TCD) and a flame ionization detector (FID).

Recommended Holding Time:
Sample: 14 days
Reference: EPA

For more detail see ALS Environmental "Collection & Sampling Guide"

Carbon in Water
This analysis is carried out using procedures adapted from APHA Method 5310 "Total Organic Carbon (TOC)". All fractions of carbon are determined by the combustion-infrared method. Total carbon includes organic carbon (covalently bonded in organic molecules) and inorganic carbon (carbonate, bicarbonate and dissolved carbon dioxide). Total organic carbon is the calculated difference between the total carbon and the inorganic carbon determination. Dissolved carbon fractions are determined by filtering the sample through a 0.45 micron membrane filter prior to analysis.

Recommended Holding Time:
Sample: 28 days
Reference: APHA

For more detail see ALS Environmental "Collection & Sampling Guide"

Nitrate and Nitrite in Water by Colourimetry
This analysis is carried out using procedures adapted from APHA Method 4500-NO2 "Nitrogen (Nitrite)" and Method 4500-NO3 "Nitrogen (Nitrate)". Nitrite is determined using the azo dye colourimetric method. Nitrate is determined using the cadmium reduction colourimetric method. Nitrate/nitrite is the sum of the concentrations of nitrate and nitrite present in the sample.

Recommended Holding Time:
Sample: 2 days
Reference: APHA and EPA

For more detail see ALS Environmental "Collection & Sampling Guide"

Alkalinity in Water by Colourimetry
This analysis is carried out using procedures adapted from EPA Method 310.2 "Alkalinity". Total Alkalinity is determined using the methyl orange colourimetric method.

Recommended Holding Time:
Sample: 14 days

Reference: APHA

For more detail see ALS Environmental "Collection & Sampling Guide"