



La modélisation moléculaire pour réduire les coûts d'évaluation de la sécurité des produits et des procédés

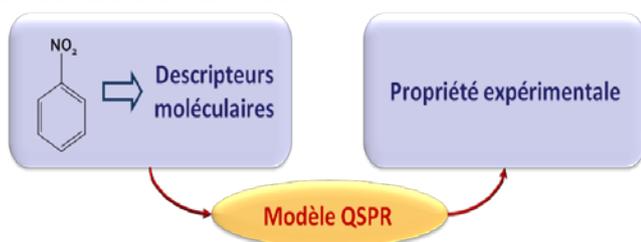
En complément des essais de caractérisation des dangers liés aux substances et aux réactions, l'INERIS propose des méthodes et modèles prédictifs au service de l'identification et la maîtrise des risques industriels. De telles méthodes permettent d'anticiper plus tôt dans le développement les écueils liés à la sécurité des produits et aux réactions chimiques ainsi que de réduire les volumes d'essais de caractérisation des substances.

Les industriels concernés sont : chimie, pétrochimie, matériaux énergétiques, pharmaceutique, cosmétique ; les produits et filières émergentes (nanomatériaux, électrolytes, liquides ioniques) et chimie verte.

Prédiction des propriétés physico-chimiques des substances

Ces modèles QSPR sont développés pour des **produits purs ou en mélange**, à partir de données expérimentales issues de la littérature, de l'industriel ou obtenues à l'INERIS.

Ils anticipent et complètent des essais de caractérisation lorsque ceux-ci présentent des difficultés particulières liées au coût de la substance, à sa stabilité (intermédiaire réactionnel par exemple), en amont de développements lorsque la substance n'a pas encore été synthétisée, ou dans une démarche de substitution.

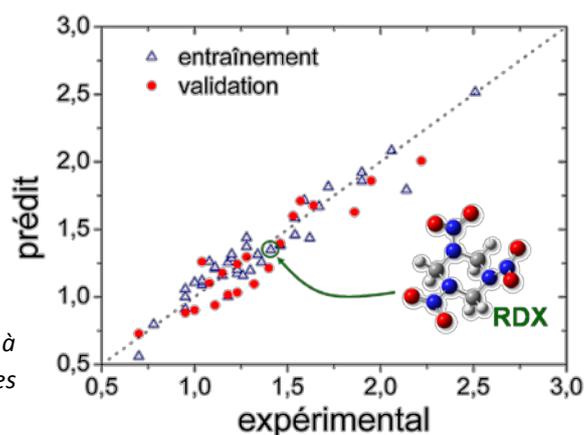


L'INERIS accompagne les industriels pour :

- **développer et évaluer** des bases de données en réalisant des essais et/ou en analysant la littérature,
- **calculer et développer des descripteurs moléculaires** issus de la chimie quantique pour établir des relations et aider à la compréhension des propriétés,
- **utiliser et évaluer** des modèles existants,
- **développer de nouveaux modèles QSPR**, validés selon les principes de l'OCDE pour un usage réglementaire (REACH, CLP, FDS) et/ou pour le criblage de molécules avant synthèse (R&D) en diminuant les coûts associés aux essais expérimentaux.

Concernant les propriétés dangereuses (stabilité thermique, explosivité, inflammabilité), l'INERIS a développé des modèles pour des systèmes complexes tels que les composés nitrés et les peroxydes organiques.

Prédictions obtenues à l'aide d'un modèle QSPR pour la sensibilité à l'impact des nitramines



Aide à la substitution de substances chimiques

Les procédés industriels utilisent des substances potentiellement dangereuses pour la santé ou pour la sécurité des installations.

Les industriels doivent rechercher des composés alternatifs présentant des propriétés fonctionnelles utiles aux applications industrielles mais ne présentant pas de danger pour l'homme ou l'environnement.

Sur la base de modèles prédictifs des propriétés des substances, l'INERIS aide les industriels pour :

- **sélectionner** des produits dans des nouveaux procédés ou en vue d'améliorer la sécurité d'un procédé existant,
- **substituer** des substances préoccupantes dans un cadre réglementaire,
- **proposer** de nouvelles molécules pour le développement de nouvelles substances.

Compréhension, modélisation des réactions chimiques dangereuses

Parmi les scénarios accidentels redoutés dans des installations industrielles, les réactions chimiques impliquant des substances instables ou des produits incompatibles sont souvent mises en cause.

En complément des méthodes de caractérisation expérimentale (méthodes de calorimétrie notamment), l'INERIS utilise des méthodes de chimie quantique (théorie de la fonctionnelle de la densité, DFT) pour caractériser les mécanismes chimiques de réactivité tels que des processus de vieillissement ou de décomposition explosive.

Ces méthodes permettent :

- d'**identifier** des chemins réactionnels : réactifs, intermédiaires de réaction et produits formés,
- de **caractériser** des énergies développées par les réactions mises en jeu (énergie de réaction et d'activation),
- d'**améliorer** la compréhension de mécanismes réactionnels complexes quand l'expérimentation est délicate voire impossible.

Exemples d'études

- étude théorique et expérimentale de la peroxydation des éthers : identification des produits formés, cinétique des réactions et effet des antioxydants
- étude théorique et expérimentale des incompatibilités chimiques : prédiction des incompatibilités chimiques et produits (dangereux) formés, chaleur dégagée
- décomposition de composés nitrés explosifs

