

## Substances chimiques : l'INERIS à l'initiative du 1<sup>er</sup> modèle prédictif d'explosibilité mis à disposition à des fins réglementaires

Paris, 29 janvier 2015 – L'INERIS a développé un modèle QSPR de prédiction d'une propriété explosive des composés nitrés, qui vient d'être implémenté dans la version 3 de la QSAR Tool Box de l'OCDE et de l'ECHA. Il s'agit du premier modèle prédictif des dangers physico-chimiques des substances qui est mis à disposition des autorités publiques et des industriels dans un logiciel. Au-delà de l'usage qui peut en être fait dans le cadre du règlement REACH, les modèles mathématiques de prédiction ont un rôle à jouer dans la conception de nouveaux produits dans une optique « safety by design ».

Le règlement REACH exige des industriels l'enregistrement des substances chimiques qu'ils commercialisent et l'évaluation des risques qu'elles peuvent présenter pour l'homme et l'environnement. Le règlement requiert d'évaluer les caractéristiques toxiques et écotoxiques de ces substances, mais de fournir également un grand nombre de données sur les propriétés physico-chimiques. Les dossiers d'enregistrement doivent renseigner 14 à 17 catégories en fonction de la quantité de substances produites ou importées, en particulier les propriétés dangereuses que sont l'explosibilité, l'inflammabilité et le pouvoir oxydant.

A cet effet, les méthodes prédictives de modélisation présentent l'avantage de faciliter les processus de caractérisation physico-chimique, notamment par des gains de temps et de coût. La « boîte à outils » (QSAR Tool Box) de l'OCDE et de l'ECHA ([www.qsar toolbox.org](http://www.qsar toolbox.org)), à laquelle est intégré le modèle de l'INERIS, est une application logicielle à usage des pouvoirs publics, de l'industrie chimique et d'autres parties prenantes. Elle met à disposition gratuitement des outils prédictifs jugés scientifiquement pertinents pour combler les lacunes en matière de données nécessaires pour évaluer les risques des produits chimiques.

### Un modèle de prédiction QSPR de la sensibilité à l'impact des nitroaliphatiques

Le modèle de l'INERIS intégré dans la QSAR Tool Box concerne la sensibilité à l'impact ( $h_{50\%}$ ), d'une famille de composés nitrés, les nitroaliphatiques. Cette propriété caractérise la tendance d'un matériau à engendrer une décomposition (potentiellement explosive) sous l'effet d'un impact ou d'un choc. Elle est utilisée pour la classification des substances dans le règlement CLP (Classification, Labelling, Packaging) et la réglementation TMD (Transport de Matières Dangereuses).

La méthode de modélisation QSPR (*Quantitative Structure-Property Relationship*) établit des relations mathématiques entre les caractéristiques de la structure d'une molécule et les propriétés observées de cette molécule. Le modèle de l'INERIS a été développé à partir d'une base de données de 50 composés et permet de prédire la valeur de leur sensibilité à l'impact par la seule connaissance de 3 descripteurs constitutionnels (nombre relatif d'atomes d'azote, nombre de liaisons simples, nombre de groupements NO<sub>2</sub>).

### Les modèles prédictifs : un outil pour la conception des nouvelles substances

Au-delà de l'aspect strictement réglementaire, les méthodes prédictives contribuent à l'identification précoce de dangers physico-chimiques et à une meilleure compréhension des réactions chimiques dangereuses (vieillessement et décomposition des substances, incompatibilité chimique).

De fait, ces méthodes ont un rôle à jouer dans le développement de nouveaux produits chimiques, en amont de l'étape expérimentale, dans le cadre d'approches R&D industrielles de type « safety by design ». Par ailleurs, les méthodes prédictives pourraient s'avérer fort utiles au service des logiques actuelles de substitution : substitution de substances dangereuses par d'autres qui le sont moins ; identification de produits moins nocifs pour de nouveaux procédés ou en vue d'améliorer la sécurité de procédés existants.

### Deux autres modèles prédictifs soumis à l'OCDE et l'ECHA

Dans une démarche d'acceptabilité réglementaire, deux autres modèles prédictifs vont être proposés à la QSAR Tool Box de l'OCDE et à la base de données du Joint Research Centre (JRC) de la Commission Européenne. Ces modèles QSPR portent sur la stabilité thermique des peroxydes organiques (chaleur et température de décomposition). Ils sont le fruit des travaux de l'INERIS, de Chimie Paris Tech et d'Arkema, partenaires aux côtés d'IFP Energies Nouvelles, du Laboratoire de Chimie-Physique de l'Université de Paris-Sud XI et de Materials Design, dans le cadre du projet ANR PREDIMOL, qui s'est achevé en 2014.

L'Institut National de l'Environnement Industriel et des Risques a pour mission de contribuer à la prévention des risques que les activités économiques font peser sur la santé, la sécurité des personnes et des biens, et sur l'environnement. Il mène des programmes de recherche visant à mieux comprendre les phénomènes susceptibles de conduire aux situations de risques ou d'atteintes à l'environnement et à la santé, et à développer sa capacité d'expertise en matière de prévention. Ses compétences scientifiques et techniques sont mises à la disposition des pouvoirs publics, des entreprises et des collectivités locales afin de les aider à prendre les décisions les plus appropriées à une amélioration de la sécurité environnementale. Créé en 1990, l'INERIS est un établissement public à caractère industriel et commercial, placé sous la tutelle du Ministère de l'Écologie, du Développement Durable et de l'Énergie. Il emploie 589 personnes, basées principalement à Verneuil-en-Halatte, dans l'Oise. Site Internet : [www.ineris.fr](http://www.ineris.fr)