

Maîtrise des risques chimiques dans l'environnement industriel :

Les travaux de recherche encadrés par l'INERIS une nouvelle fois récompensés par l'EFCE

La thèse de Stefania Cagnina, visant à démontrer l'intérêt de la modélisation moléculaire dans la compréhension des incompatibilités chimiques, remporte le prix de la sécurité des procédés de la Fédération européenne du génie chimique (EFCE)

Freiburg, le 7 juin 2016 : A l'occasion du [Congrès International Loss Prevention Symposium](#) qui se tient à Freiburg depuis le 5 juin, l'[EFCE](#) récompense les travaux de Stefania Cagnina pour sa thèse encadrée par l'équipe de Patricia Rotureau et Guillaume Fayet de la direction des risques accidentels de l'[INERIS](#). Ses travaux, dirigés par le Professeur Carlo Adamo du CNRS Chimie Paris-Tech, apportent une réelle avancée dans le domaine du risque et de la sécurité industrielle. Ils améliorent, grâce à la modélisation moléculaire, la compréhension des phénomènes d'incompatibilités entre substances chimiques, sources d'accidents majeurs. Ce prix de la sécurité européenne des procédés avait déjà été décerné en 2013 à une doctorante dont [les travaux de thèse](#) étaient co-encadrés à l'Institut national de l'environnement industriel et des risques (INERIS).

La compréhension des processus d'incompatibilité : une nécessité dans l'évaluation et la maîtrise des risques chimiques dans l'environnement industriel

La maîtrise du risque chimique dans l'environnement industriel nécessite une identification rapide et précise des incompatibilités pouvant exister lors du mélange de substances chimiques. Cette identification s'effectue, jusqu'à présent, par des essais de DSC (*Differential Scanning Calorimetry*) en laboratoire et les résultats sont collectés, par exemple, dans les FDS (Fiches de Données de Sécurité) de chaque produit et dans de nombreuses tables d'incompatibilité existant dans la littérature. Cependant, les informations fournies sont limitées et ne permettent pas d'identifier et de comprendre la relation cause-effet de l'incompatibilité entre deux substances concernées, ni le mécanisme chimique par lequel cette incompatibilité se produit. Dans ce contexte, les travaux de Stefania Cagnina apportent une réelle avancée dans le domaine de la gestion du risque chimique et de la sécurité industrielle. Ils démontrent que la modélisation moléculaire, de manière complémentaire à l'approche expérimentale, permet de comprendre ou de prédire les chemins réactionnels et les produits potentiellement dangereux qui se forment lorsque des substances chimiques sont en contact.

Une thèse pionnière dans l'étude fine des incompatibilités chimiques du nitrate d'ammonium par modélisation moléculaire

La thèse de Stefania Cagnina, soutenue en octobre 2014, porte sur « [la compréhension des incompatibilités chimiques du nitrate d'ammonium par modélisation moléculaire](#) ». Elle vise à comprendre à l'échelle moléculaire quelques mécanismes d'incompatibilité mettant en jeu le nitrate d'ammonium en utilisant les outils de chimie quantique, notamment la Théorie de la Fonctionnelle de la Densité (DFT). Fréquemment utilisé dans l'industrie et connu pour sa longue liste d'incompatibilités, le nitrate d'ammonium est impliqué dans de nombreux accidents majeurs. Son procédé de décomposition et ses phénomènes d'incompatibilités chimiques n'ont pas encore été complètement élucidés et seules quelques hypothèses ont jusqu'alors été avancées pour expliquer ces mécanismes réactionnels. L'étude théorique de la réactivité du mélange nitrate d'ammonium-dichloroisocyanurate de sodium (DCCNa), incompatibilité suspectée dans l'accident de l'usine AZF à Toulouse en 2001, a permis, grâce à la modélisation moléculaire, de caractériser un nouveau chemin réactionnel. La réaction directe entre le nitrate d'ammonium et le DCCNa, en présence d'une molécule d'eau, a en effet pu être démontrée. Ces résultats de modélisation ont ensuite été confirmés par des essais de calorimétrie en collaboration avec le CERL ([Canadian Explosives Research Laboratory](#)).

Lancement de nouveaux travaux pour le développement d'outils opérationnels de prédiction

Les résultats de ces travaux ouvrent de nouvelles perspectives dans le domaine de la gestion du risque et de la sécurité industrielle. Aussi, afin d'améliorer la compréhension et la prédiction d'autres incompatibilités chimiques, l'étude des mécanismes des réactions entre le nitrate d'ammonium et d'autres contaminants fera l'objet d'une seconde thèse dans les prochains mois. En collaboration avec l'INERIS et Chimie Paris-Tech, ces travaux viseront à développer des outils opérationnels de prédiction des incompatibilités chimiques entre substances, en prenant en compte la dimension thermodynamique et cinétique des phénomènes.

Cette nouvelle initiative s'inscrit dans la lignée des travaux novateurs de l'INERIS qui, dès 2007, s'est intéressé à la modélisation moléculaire appliquée à l'identification et la maîtrise des risques accidentels. L'institut propose ainsi aux industriels des services pour les accompagner dans la [sécurité des produits et des procédés](#) : prédiction de propriétés physico-chimiques via des modèles QSPR (*quantitative structure-property relationship*), substitution des substances chimiques, compréhension et modélisation des réactions chimiques dangereuses.

Les travaux de Stefania Cagnina (2011-2014) ont fait l'objet de 4 articles dans des revues à comité de lecture international, notamment dans l'I&EC – Industrial & Engineering Chemistry Research (*S.Cagnina et al. - [Ind. Eng. Chem. Res.](#) - 2014, 53 (36), 13920*)

Pour accéder à la thèse de Stefania Cagnina :

<https://tel.archives-ouvertes.fr/tel-01149100/document>

Pour accéder aux offres de thèse de l'INERIS :

<http://www.ineris.fr/emplois/emploi-theses.php>

L'INERIS – Institut national de l'environnement industriel et des risques

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'Environnement, de l'Énergie et de la Mer. Il emploie près de 600 personnes, basées principalement à Verneuil-en-Halatte, dans l'Oise. Les travaux de recherche et d'expertise de l'INERIS s'exercent dans les domaines des risques accidentels, chroniques et du sol et du sous-sol.

Site Internet : www.ineris.fr

Contact presse :

INERIS – Séverine Vaselli – 03 44 55 63 01 – severine.vaselli@ineris.fr