

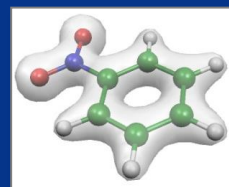


# Utilisation de la modélisation moléculaire comme outil d'aide à l'évaluation des dangers physico-chimiques des substances dans le cadre du risque industriel

Soutenance en vue de l'obtention de l'Habilitation à Diriger des Recherches  
par Patricia ROTUREAU, le 6 octobre 2016 à 14H  
Amphithéâtre Friedel, Chimie ParisTech  
11 rue Pierre et Marie Curie, Paris 5

## Résumé des travaux :

En complément des essais de caractérisation des dangers liés aux substances, produits et procédés rencontrés dans l'industrie, mes travaux de recherche consistent à utiliser/développer des méthodes de chimie quantique pour la prédiction de type QSPR (Quantitative Structure - Property Relationships) des propriétés physico-chimiques dangereuses (explosibilité, inflammabilité) des substances et l'étude des réactions chimiques au service de l'identification et de la maîtrise des risques industriels. En particulier, la Théorie de la Fonctionnelle de la Densité (DFT) est utilisée pour caractériser la réactivité des substances mais aussi clarifier les mécanismes réactionnels mis en jeu dans des processus de décomposition explosive, de vieillissement et d'incompatibilité chimique entre substances. Cette recherche appliquée a pour but d'améliorer la sécurité des produits et des procédés et répondre *in fine* aux besoins opérationnels des pouvoirs publics et des industriels.



## Devant le jury composé de :

**M. Philippe Carbonnière**, Maître de Conférences HDR, Université de Pau et des Pays de l'Adour, France

**M. Thierry Meyer**, Professeur, Ecole Polytechnique Fédérale de Lausanne, Suisse

**M. Alexandre Varnek**, Professeur, Université de Strasbourg, France

**M. Carlo Adamo**, Professeur, Chimie ParisTech, France

**M. Esmail Alikhani**, Professeur, Université Pierre et Marie Curie, France

**M. Henry Chermette**, Professeur, Université de Lyon, France

**M. Laurent Perrin**, Professeur, Ecole Nationale Supérieure de Chimie de Nancy, France

**M. Pierre Toulhoat**, Professeur, BRGM, France

