



Université Claude Bernard



DIPLÔME NATIONAL DE DOCTORAT

(Arrêté du 25 mai 2016)

Date de la soutenance : **8 mars 2018**

Nom de famille et prénom de l'auteur : **ALLIOD Charlotte**

Titre de la thèse : « Conception et modélisation de nouvelles molécules hautement énergétiques en fonction des contraintes réglementaires et environnementales. »



Résumé

Depuis deux décennies, la recherche militaire se focalise sur l'amélioration des critères de performances des explosifs, tout en prenant en compte leurs impacts environnementaux et toxicologiques. Ces enjeux sont encadrés par une réglementation stricte : REACh (Registration, Evaluation, Authorization and Restriction of Chemicals) permettant d'assurer un haut niveau de protection sanitaire et environnementale.

De nos jours, développer des explosifs ou molécules hautement énergétiques (High Energy Materials (HEM)) ayant un effet réduit sur l'homme et l'environnement est un sujet de préoccupation majeur. Ainsi, en collaboration avec Airbus Safran Lauchers (ASL), un programme de recherche a été mis en place, afin d'obtenir des outils optimisés pour la prédiction de la toxicité des HEMs et concevoir de nouvelles molécules HEMS non toxiques et réglementaires.

Différentes méthodes *in silico* ont été utilisées dont des Relations Structure Activité Quantitatives (ou Quantitative Structure-Activity Relationship (QSAR)) et le Machine Learning.

La recherche de similarité structurale parmi les molécules est un outil novateur sur lequel nous avons basé nos prédictions *in silico*. Cette similarité est obtenue grâce à un algorithme intelligent développé au sein du Pôle Rhône Alpin de Bio-Informatique de Lyon et qui a donné lieu à un brevet. Cet algorithme nous permet d'obtenir des prédictions plus précises basées sur des données expérimentales issues de directives européennes.

Mots clefs: REACh, prédiction, HEMs, QSAR, Machine Learning, similarité, algorithme.