DIPLÔME NATIONAL DE DOCTORAT

(Arrêté du 25 mai 2016)

Date de la soutenance : **24 juin 2022**

Nom de famille et prénom de l'auteur : **Monsieur TERRASSE Julien**

Titre de la thèse : *« Identification, modélisation et contrôle des mécanismes à l'origine de la formation des composés néoformés des vernis alimentaires, migrants potentiels dans les aliments au contact »*

Résumé

Au cours des dernières années, les emballages alimentaires ont été de plus en plus médiatisés, initialement à la suite de crises sanitaires (BADGE en fin des années 1990) puis lors de la suspension en France de l'utilisation du Bisphénol A pour la fabrication de contenants alimentaires en 2015. Les vernis alimentaires appliqués dans les boîtes de conserve (utilisant historiquement des résines de type époxy à base de ces substances) se sont ainsi retrouvés impactés et de nouvelles générations de vernis ont été développées et commercialisées. Cependant, il n'existe pas aujourd'hui de réglementation européenne harmonisée aux vernis ; ainsi c'est à l'opérateur de prouver que ses produits respectent le règlement cadre (EC) 1935/2004, et en particulier son Article 3. Le matériau doit être fabriqué selon des bonnes pratiques de fabrication, de manière à ne pas céder à l'aliment de substances en quantités susceptibles de présenter un danger pour la santé humaine, de modifier la nature de l'aliment ou de modifier ses caractéristiques organoleptiques. Il est donc nécessaire de vérifier que les interactions du vernis avec le milieu alimentaire, au cours du processus de conditionnement ou de la conservation, n'entraînent pas la formation et la migration de composés néoformés (désignés par le terme NIAS pour « Non-Intentionnaly Added Substances ») en quantités qui pourraient être possiblement nocives.

Les travaux de thèse ont ainsi pour but d'identifier les mécanismes à l'origine de la formation de ces composés dans des vernis à base polyester-phénolique. Les analyses d'extraits, aussi bien en GC que LC, couplées à la spectrométrie de masse à haute résolution (HRMS), ont permis d'identifier plusieurs familles de NIAS dans des formules types. La quantité de ces NIAS a par la suite été étudiée en fonction de la formulation des vernis afin d'identifier leurs mécanismes de formation et les possibles interactions entre composants. L'amélioration de ces connaissances, associée à l'étude de l'influence des conditions de cuisson, permettra à terme d'identifier, voire de contrôler, les mécanismes de formation des NIAS, afin de développer de nouveaux vernis caractérisés par une migration minimalisée.

En plus de l'aspect mécanistique, les travaux sur les « NIAS » posent le problème de la quantification des espèces détectées. Par définition les NIAS sont des composés initialement inconnus. Si le problème d'identification est aujourd'hui facilité par le traitement des données HRMS, la quantification reste difficile en l'absence de standards analytiques. Une méthodologie de quantification a donc été développée pour prédire le facteur de réponse en GC-MS et GC-HRMS d'une substance identifiée, via une modélisation reposant sur les relations quantitatives structure-propriétés (QSPR). Cette approche permettrait ainsi d'approcher la semi-quantification en s'affranchissant de la fabrication de standards individuels pour chaque substance de structure identifiée.