

Développement de modèles QSPR pour la quantification sans standard par GC-EI-MS : application aux NIAS retrouvées dans les matériaux alimentaires.

Accueil : Institut des Sciences Analytiques Equipe CTIA

Responsable : Pr Christophe MORELL

Co-Encadrants : Dr. Guillaume Hoffmann, Dr. Christelle Bonnefoy

Contact : christelle.bonnefoy@isa-lyon.fr



Contexte : Les "substances non-intentionnellement ajoutées" (NIAS) regroupent entre autres les produits de réactions secondaires, oligomères et intermédiaires de réaction, produits de décomposition et les différentes impuretés et contaminants amenés au cours du processus de fabrication de l'emballage [1]. S'il est possible de remonter à la structure de ces molécules grâce à l'information structurale obtenue par spectrométrie de masse, leur quantification nécessaire à l'évaluation des risques toxicologiques, reste problématique. D'une part, les teneurs recherchées sont faibles et d'autre part, l'analyste ne dispose généralement pas des standards correspondants.

Objectifs : L'objectif des travaux sera de construire et valider un modèle permettant à partir de la structure 3D d'un NIAS de calculer son facteur de réponse en GC-EI-MS ce qui permettra à terme de le quantifier dans le matériau d'emballage voire dans l'aliment au contact.

Méthodologie : Pour une sélection de molécules dont le standard analytique est disponible, la DFT conceptuelle permettra, entre autres, le calcul de descripteurs de réactivité chimique [2]. En parallèle, chaque molécule sera analysée expérimentalement par GC-EI-MS pour la mesure du facteur de réponse [3]. Enfin, un modèle de type relation structure/activité sera établi entre les descripteurs calculés et les valeurs expérimentales de sensibilité.

Mots-clés : NIAS / QSPR / DFT conceptuelle / Descripteurs chimiques / Quantification / GC-EI-MS / Facteur de réponse / Matériau d'emballage alimentaire

Références :

[1] B. Geueke, J. Muncke, *Substances of Very High Concern in Food Contact Materials: Migration and Regulatory Background, Packaging Safety & Compliance, Packag. Technol. Sci.*, **2017**, 31, 757–769

[2] G. Fayet, L. Joubert, P. Rotureau, C. Adamo, *On the use of descriptors arising from the conceptual density functional theory for the prediction of chemicals explosibility*, *Chem. Phys. Lett.*, **2009**, 467, 407-411

[3] J.-Y. de Saint Laumer, E. Cicchetti, P. Merle, J. Egger, A. Chaintreau, *Quantification in Gas Chromatography: Prediction of Flame Ionization Detector Response Factors from Combustion Enthalpies and Molecular Structures*, *Anal. Chem.*, **2010**, 82, 6457-6462