
Étude DFT des mécanismes d'incompatibilités chimiques impliquant le nitrate d'ammonium

Stefania Cagnina*¹, Patricia Rotureau², Guillaume Fayet², and Carlo Adamo^{†3}

¹Institut de Recherche Chimie Paris CNRS Chimie Paris-Tech – Ecole Nationale Supérieure de Chimie de Paris, Institut National l'Environnement Industriel et des Risques – France

²Institut National de l'Environnement Industriel et des Risques – Institut National de l'Environnement Industriel et des Risques – France

³Institut de Recherche Chimie Paris CNRS Chimie Paris-Tech – Ecole Nationale Supérieure de Chimie de Paris – France

Résumé

La maîtrise du risque chimique dans l'environnement industriel nécessite une identification rapide et précise des problèmes d'incompatibilité pouvant exister lors du contact de deux substances chimiques. Cette identification s'effectue, jusqu'à présent, par des essais de DSC (Differential Scanning Calorimetry) et les résultats sont rassemblés dans les fiches de données de sécurité de chaque produit et dans des tables d'incompatibilité. Un grand nombre de tables d'incompatibilité existent dans la littérature mais les informations contenues sont limitées et ne permettent pas d'identifier et comprendre la relation cause-effet d'une incompatibilité entre deux substances. C'est pour cette raison que la prédiction a priori de la réactivité entre deux molécules par modélisation moléculaire devient un important outil complémentaire. Les travaux présentés portent sur la compréhension des mécanismes d'incompatibilités chimiques impliquant le nitrate d'ammonium à l'aide de la modélisation moléculaire. Une étude théorique approfondie, basée sur des calculs DFT (Théorie de la Fonctionnelle de la Densité) visant à identifier les chemins réactionnels, les produits formés ainsi que la chaleur dégagée par les réactions a été menée. Un benchmark préliminaire a été réalisé pour définir la méthode DFT (fonctionnelle d'échange et de corrélation/bases) la plus appropriée pour la description du système de réaction. Après avoir caractérisé le mécanisme radicalaire de décomposition du nitrate d'ammonium seul en phase gaz, la réactivité du mélange nitrate d'ammonium-dichloroisocyanurate de sodium (DCCNa), une voie explorée dans l'analyse de l'accident de l'usine AZF (Toulouse 2001) a été étudiée.

Mots-Clés: DFT, incompatibilité chimique, nitrate d'ammonium

*Intervenant

†Auteur correspondant: