



OFFRE De STAGE

Master 2 en Ecotoxicologie, Toxicologie ou Chimie Environnementale

L'Institut national de recherche pour l'agriculture, l'alimentation et l'environnement (INRAE) est un établissement public de recherche rassemblant une communauté de travail de 12 000 personnes, avec plus de 200 unités de recherche et 42 unités expérimentales implantées dans toute la France. INRAE se positionne parmi les tous premiers leaders mondiaux en sciences agricoles et alimentaires, en sciences du végétal et de l'animal. Ses recherches visent à construire des solutions pour des agricultures multi-performantes, une alimentation de qualité et une gestion durable des ressources et des écosystèmes.

VOTRE MISSION ET VOS ACTIVITÉS

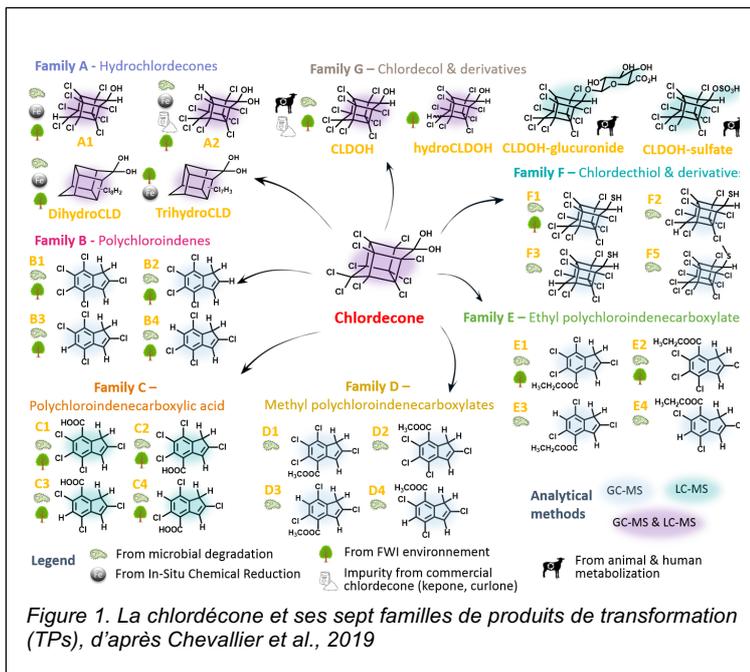
- Vous serez accueilli(e) au **centre INRAE de Versailles-Saclay** dans l'**UMR ECOSYS** Ecologie Fonctionnelle et Ecotoxicologie des Agroécosystèmes, INRAE-AgroParisTech-Université Paris-Saclay (Palaiseau)
<https://ecosys.versailles-saclay.hub.inrae.fr/recherche/equipes-scientifiques/sol-tox>
- **Sujet : Approche *in silico* basée sur l'outil TyPol pour catégoriser les produits de transformation de la chlordécone selon leur devenir et impact environnemental**
- **Contexte et objectifs :**

La chlordécone est une molécule appartenant à la famille chimique des organochlorés cycliques, dont certains servirent pendant des décennies comme insecticides, qui sont pour leur grande majorité bannis aujourd'hui en tant que Polluants Organiques Persistants dans le cadre de la Convention de Stockholm (2023). La chlordécone a été utilisée aux Antilles pour lutter contre la larve du charançon du bananier sur plusieurs milliers d'hectares pendant les années 1980 et est à l'origine d'une crise environnementale et sanitaire. En lien avec la grande stabilité chimique de la molécule, les premières prédictions, élaborées à partir d'un modèle ne prenant en compte que l'entraînement de la chlordécone par les eaux de pluie vers les nappes phréatiques, indiquaient des durées de contamination des sols allant de plusieurs décennies à plusieurs siècles selon les types de sols (Cabidoche et al., 2009). En revanche, des travaux récents montrent que la chlordécone, en conditions de laboratoire, peut être transformée en d'autres composés chimiques que l'on nomme « produits de transformation », répartis en sept familles (Figure 1) (Chevallier et al., 2019 ; Della-Negra et al., 2020 ; Hellal et al., 2021 ; Martin et al., 2023). Ces produits de transformation sont encore mal connus, que ce soit au niveau des transferts dans les aliments et l'environnement, ou au niveau de leurs effets sur la santé. Les études menées sur certains représentants de la famille des hydrochlordécones (composé ayant conservé la structure chimique de la chlordécone mais ayant perdu 1 à 7 atomes de chlore, Dolfig et al., 2012) montrent que, pour les organismes cibles testés, leur toxicité n'est pas supérieure à celle de la chlordécone. Le projet ANR CHLOR2NOU (Chlordecone and its transformation products : new tools and new knowledge - 2024-2027) vise à développer des nouveaux outils pour le suivi des produits de transformation et acquérir de nouvelles connaissances sur leur devenir et impact environnemental ainsi que sur les risques associés.

L'outil TyPol (Typology of Pollutants) a été développé dans l'objectif de classer les contaminants organiques en reliant leurs propriétés moléculaires à leur comportement dans l'environnement et à leurs effets écotoxicologiques (Servien et al., 2014). L'originalité de TyPol, au regard d'autres outils de prédiction de type QSAR, réside dans l'établissement de classes, construites *via* une analyse statistique des propriétés déduites de la prise en compte des descripteurs moléculaires et des paramètres comportementaux (Mamy et al., 2021). Chaque classe regroupe par conséquent des composés ayant une relation « proche » entre paramètres et descripteurs. Il est alors possible d'extrapoler des connaissances au sein d'une classe de composés à partir des résultats déjà obtenus sur quelques composés connus faisant partie de cette classe, comme cela a été fait pour évaluer les risques liés à des produits de transformation (Storck et al., 2016, Benoit et al., 2017).

Dans le cadre du stage, TyPol sera appliqué au cas des produits de transformation de la chlordécone étudiés dans le projet ANR CHLOR2NOU. L'objectif est de classer les produits de transformation de la chlordécone en

fonction de leur comportement environnemental et de leurs effets écotoxicologiques. Pour ce faire, il est prévu d'implémenter la base de données de TyPol avec les descripteurs moléculaires calculés pour les produits de transformation des différentes familles (de A à F) à partir de la connaissance de leurs structures chimiques (Figure 1) (Chevallier et al., 2019). S'ajouteront à cela des valeurs de paramètres décrivant leur devenir dans le sol et leurs effets écotoxicologiques, grâce aux données acquises dans les autres tâches du projet CHLOR2NOU pour les produits de transformation étudiés expérimentalement. Des outils prédictifs de type QSAR seront utilisés de manière complémentaire afin d'obtenir des paramètres (devenir ou effet) pour les produits de transformation non étudiés expérimentalement. Au sein de la famille des cyclodiènes et d'autres composés



organochlorés de structure plus éloignée, différents composés seront également sélectionnés ainsi que leurs principaux produits de dégradation connus et référencés. Un des résultats attendus est une classification des différents produits de transformation potentiels de la chlordécone selon leur mobilité potentielle, leur persistance dans les sols et leurs effets écotoxicologiques.

■ Vous serez plus particulièrement en charge de :

1. **Réaliser une analyse bibliographique approfondie** sur les voies de transformation de la chlordécone afin de mettre à jour la liste des molécules et leurs structures chimiques qui seront considérées dans la classification et d'identifier les liens entre réactions impliquées et structures des molécules filles. En parallèle, les valeurs de paramètres environnementaux et écotoxicologiques seront recherchées dans la littérature et en mobilisant des outils QSAR disponibles ;
2. **Ajouter à la base de données de TyPol** les nouveaux produits de transformation identifiés et les variables associées. Cette étape nécessitera notamment de calculer les descripteurs moléculaires des produits de transformation à l'aide de différents outils adaptés aux différents types de descripteurs (géométriques, topologiques, quantiques) et de rassembler les variables liées aux paramètres environnementaux et écotoxicologiques ;
3. **Classer les produits de transformation** selon leur devenir et leurs effets écotoxicologiques avec TyPol et comparer les résultats obtenus aux données pouvant exister sur quelques composés.

■ Conditions particulières d'activité : Des séjours courts chez d'autres partenaires du projet pourront être organisés pour des réunions de projets et des échanges notamment afin de discuter des choix des données à insérer pour les valeurs de paramètres environnementaux et écotoxicologiques.

LE PROFIL QUE NOUS RECHERCHONS

- Formation recommandée : Master/diplôme d'ingénieur en toxicologie, écotoxicologie ou chimie environnementale avec des bases en traitement statistique de données.
 - Compétences recherchées : **Chimie de l'environnement, toxicologie et écotoxicologie** (Connaissances sur les contaminants organiques : structure moléculaire, propriétés et comportement dans l'environnement), Concepts de bases en analyse statistique de données (R, Statistica, Excel stat...).
- Autres** : Autonomie et esprit d'initiative ; Qualités d'organisation et d'intégration dans un collectif ; Bon niveau d'anglais (indispensable) et capacités rédactionnelles

↳ Modalités d'accueil

- **INRAE** - UMR ECOSYS, 22 place de l'Agronomie, 91120 Palaiseau
- Type de stage : Master 2
- Durée du stage : 6 mois
- Date de démarrage : à partir de Février 2025
- Rémunération : gratification mensuelle environ 650 euros/mois

↳ Modalités pour postuler

Transmettre une lettre de motivation et un CV à :
Pierre Benoit / Laure Mamy / Rémi Servien

- Par e-mail : pierre.benoit@inrae.fr / laure.mamy@inrae.fr / remi.servien@inrae.fr

✘ Date limite pour postuler : **31/10/25**

Références

- Benoit P., Mamy L., Servien R., Li Z., Latrille E., Rossard V., Bessac F., Patureau D., Martin-Laurent F. 2017. *STOTEN*, 574, 781-795.
- Chevallier, M. L., Della-Negra, O., Chaussonnerie, S., Barbance, A., Muselet, D., Lagarde, F., ... & Saaidi, P. L. (2019). *Environmental science & technology*, 53(11), 6133-6143.
- Della-Negra, O., Chaussonnerie, S., Fonknechten, N., Barbance, A., Muselet, D., Martin, D. E., ... & Le Paslier, D. (2020). *Scientific Reports*, 10(1), 13545.
- Dolfing, J., Novak, I., Archelas, A., & Macarie, H. (2012). *Environmental science & technology*, 46(15), 8131-8139.
- Hellal, J., Saaidi, P. L., Bristeau, S., Crampon, M., Muselet, D., Della-Negra, O., Mauffret, A., Mouvet, C. & Joulain, C. (2021). *Frontiers in microbiology*, 12, 742039.
- Mamy L., Bonnot K., Benoit P., Bockstaller C., Latrille E., Rossard V., Servien R., Patureau D., Prevost L., Pierlot F., Bedos C. 2021 *Journal of Hazardous Materials*, 415, 125613
- Martin, D. E., Alnajjar, P., Muselet, D., Soligot-Hognon, C., Kanso, H., Pacaud, S., ... & Feidt, C. (2023). Efficient biodegradation of the recalcitrant organochlorine pesticide chlordecone under methanogenic conditions. *Science of The Total Environment*, 903, 166345.
- Servien R., Mamy L., Li Z., Rossard V., Latrille E., Bessac F., Patureau D., Benoit P. 2014. *Chemosphere*, 111, 613-622.
- Storck V., Lucini L., Mamy L., Ferrari F., Papadopoulou E.S., Nikolaki S., Karas P.A., Servien R., Karpouzias D.G., Trevisan M., Benoit P., Martin-Laurent F., 2016. *Environmental Pollution*, 208, 537-545.