COLLOQUE SCIENTIFIQUE Chlordécone COMPRENDRE & AGIR
23 · 24 · 25 Juin 2026
MARTINIQUE

Approche *in silico* basée sur l'outil TyPol pour catégoriser les produits de transformation de la chlordécone selon leur devenir et leur impact environnemental

Gaëlle Nzussing[1], Laure Mamy[1], Fabienne Bessac[2], Sophie Hoyau[3], Eric Latrille[4], Dominique Patureau[4], Virginie Rossard[4], Pierre-Loïc Saaidi[5], Rémi Servien[4], Pierre Benoit[1]

[1]Université Paris-Saclay, INRAE, AgroParisTech, UMR ECOSYS, 91120 Palaiseau, France
[2]Université de Toulouse, EIPurpan, 31076 Toulouse, France
[3]Université de Toulouse, CNRS, UMR LCPQ, 31062 Toulouse, France
[4]Université de Montpellier, INRAE, UR LBE, 11100 Narbonne, France
[5]Génomique Métabolique, Genoscope, Institut François Jacob, CEA, CNRS, Univ Evry, Université Paris-Saclay, Evry, France



STRATÉGIE CHLORDÉCONE

Contexte

La chlordécone (CLD)

Caractéristiques et devenir environnemental
Polluant Organique Persistant (POP)[1][2][3]
Persistance extrême dans les sols tropicaux[1][4][5]
Contamination durable des eaux et des écosystèmes[6][7][8]

Dynamique de transfert et impacts sur la biodiversité
Bioaccumulation et bioamplification[7][9]
Perturbateur endocrinien (contexte faune)[10][11]
Transfert sols → rivières → milieu marin[4][12]

Risques sanitaires
Retards de développement chez l'enfant[13]
Augmentation du risque de cancer de la prostate[14]

Dégradation/Transformation

Formation de nombreux produits de transformation (PT)[8][15][16][17]
7 familles de PT identifiées (Figure 1)
Plus de 20 PT détectés dans les sols aux Antilles françaises
Certains présents à des niveaux comparables à la CLD

Manque de connaissances sur les PT[2][13][18]
Risques encore inconnus
Devenir environnemental mal identifié
Risque potentiel pour les populations (pollution secondaire)

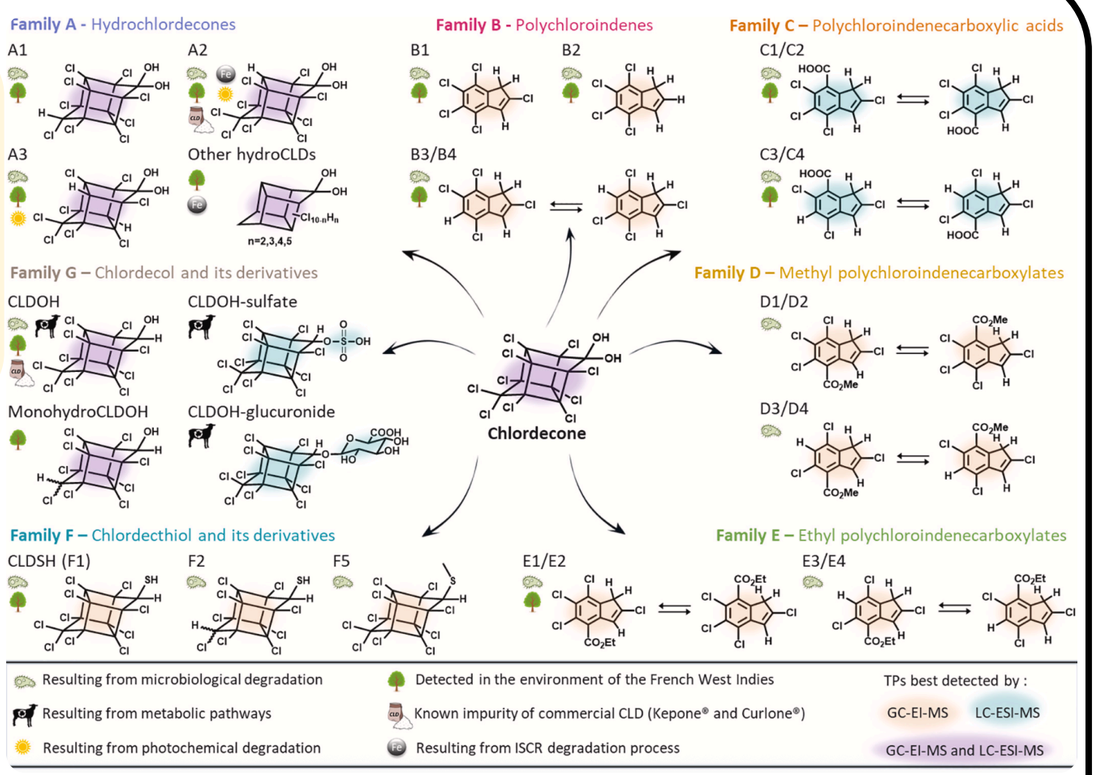


Figure 1: La chlordécone et ses sept familles de produits de transformation (PT)[15]

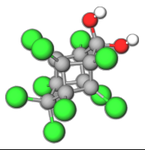
Objectif

→ **Classer et catégoriser les PT** de la chlordécone en fonction de leur comportement environnemental et de leurs effets écotoxicologiques
→ **Mettre à jour l'outil TyPol** avec les nouvelles connaissances acquises sur les PT de la chlordécone[2][22]
→ **Identifier les PT les plus à risque**

Matériels et méthodes

54 PT
recensés dans la littérature

Structure 3D



Dragon[19], Molovol[20], SCC-DFTB[21]

Littérature + Méthode QSAR
(EPISuite)

Descripteurs moléculaires :
- topologiques (indices de connectivité)
- constitutionnels (nombre d'atomes, masse molaire…)
- géométrique (surface)
- quantiques (moment dipolaire, énergies des orbitales…)

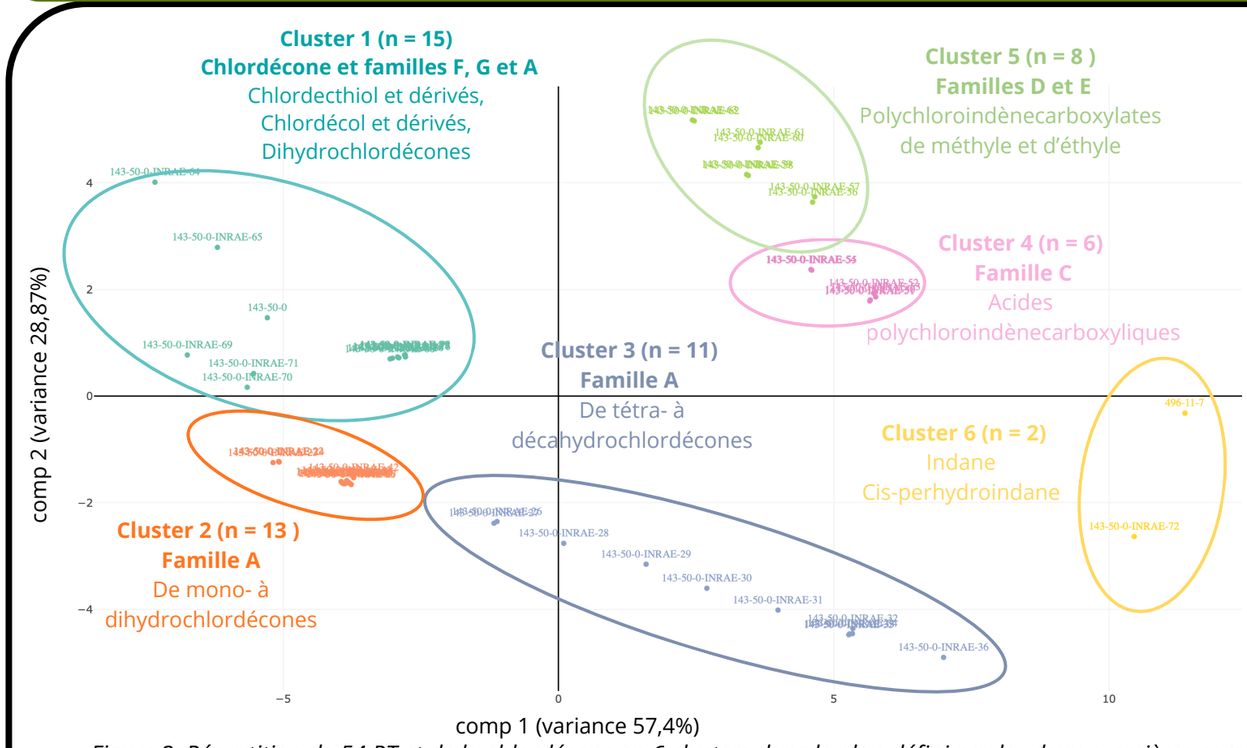
Paramètres environnementaux :
- solubilité dans l'eau (Sw) (mg/L)
- coefficient de partage octanol/eau (Kow)
- pression de vapeur (Pvap) (mPa)
- constante de Henry (K_H)
- coefficient d'adsorption rapporté à la teneur en carbone organique du sol (Koc) (L/kg)
- durée de demi-vie de dégradation (DT50) (jours)
- facteur de bioconcentration (BCF)

TyPol
Typology of Pollutants[22]

Analyse Partial Least Squares (PLS)
→ recherche des **liens** entre des **caractéristiques intrinsèques des molécules et le comportement environnemental**

Classification Ascendante Hiérarchique (CAH)
→ **regroupement** des molécules les plus proches dans **des "clusters"**

Résultats et discussion



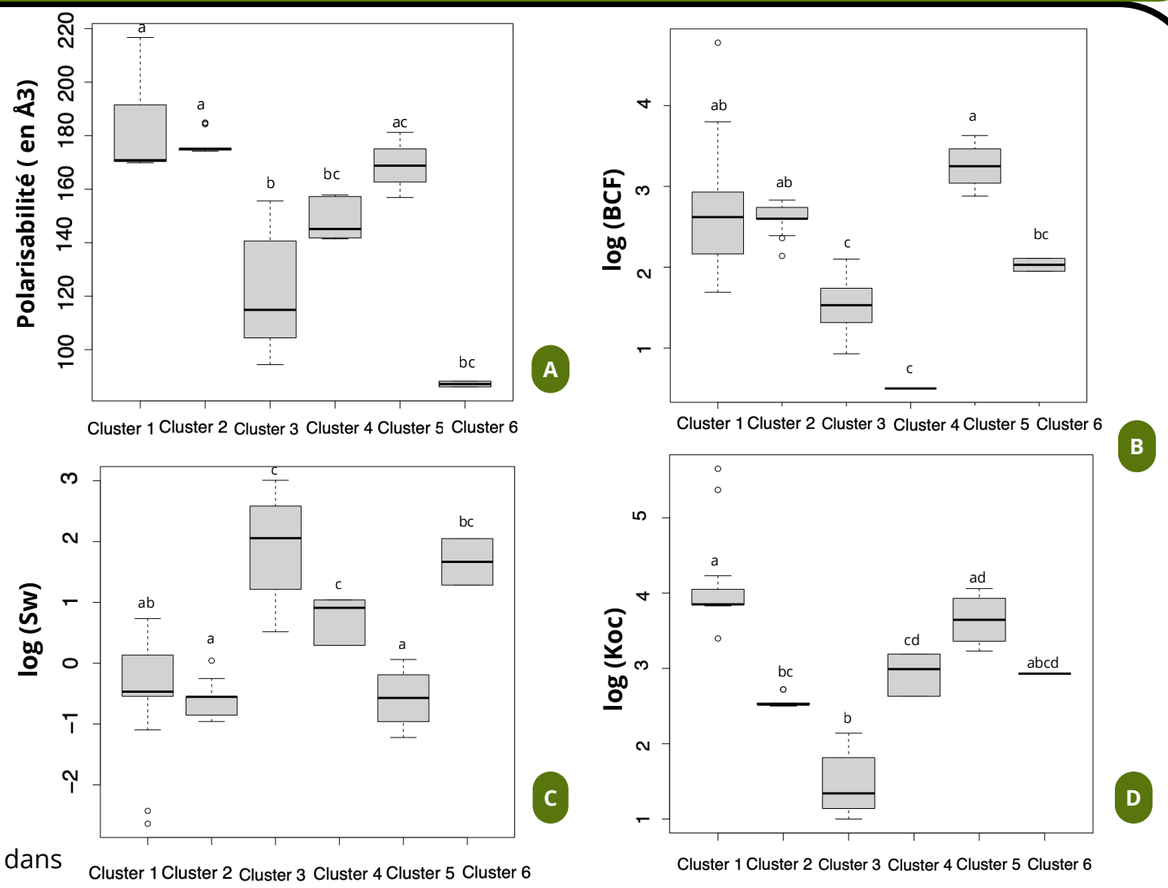


Figure 3: Répartition de 54 PT et de la chlordécone en 6 clusters dans le plan défini par les deux premières composantes principales de l'analyse PLS

Clusters 1, 5 → hydrophobes, forte rétention, faible mobilité et un potentiel de bioaccumulation élevé
Cluster 4 et 2 → profils intermédiaires, moins hydrophobes et présentant un potentiel de transfert dans l'environnement élevé
Clusters 3 → composés plus polaires, mobiles et avec un plus faible potentiel de bioaccumulation
Cluster 6 → profils intermédiaires, composés potentiellement mobiles

Figure 4: Boxplots des valeurs de polarisabilité (A), de BCF (B), de Sw (C) et de Koc (D), avec test de Kruskal-Wallis ($p < 0,05$) suivi d'un post hoc de Dunn

À suivre…

Conclusion & Perspectives

TyPol → classification des molécules et mise en évidence de profils distincts des PT
Perspective → extension de l'analyse à d'autres composés organochlorés

Sources :

Remerciements :

Ce travail a été réalisé grâce au soutien financier de
Merci à Yoce Aprianto (INRAE - EcoSys) pour sa contribution et son soutien