

## Estimation par spectrométrie de masse haute résolution de la toxicité de micropolluants organiques et d'échantillons environnementaux

### Contexte scientifique du stage

De nombreux micropolluants émergents sont présents dans les eaux de surface soumises à des pressions anthropiques mais leur comportement et leurs transformations sont peu connus. L'analyse de micropolluants est généralement réalisée en ciblant les molécules spécifiques, mais le développement de la spectrométrie de masse haute résolution (HRMS) permet d'analyser de manière non-ciblée les échantillons et d'identifier des produits inconnus ou des produits de transformation de molécules connues. Néanmoins, l'identification de contaminants n'induit pas systématiquement une contamination de l'échantillon. En effet, il est nécessaire de réaliser des analyses écotoxicologiques afin de quantifier la toxicité d'un échantillon et les impacts de ses micropolluants sur l'environnement. Faire évoluer le suivi des masses d'eau par la mesure des effets (bioessais) est un objectif central du du réseau MeSeine. Depuis 2017, une action de recherche dédiée a été lancée afin de disposer d'un référentiel de bioessais adapté aux rivières soumises à forte pression anthropiques. Cependant, ces analyses sont chronophages et onéreuses. Le développement d'un modèle de prédiction de la contamination des eaux de surface croisant les données HRMS et d'écotoxicologie pourrait outrepasser ces inconvénients. De plus, le couplage des approches analytiques non-ciblées avec les approches d'écotoxicologie permet d'envisager l'identification des molécules responsables de types d'effets observés. Ce type d'analyses croisées requiert de manipuler des volumes de données importants et d'utiliser des méthodes statistiques avancées.

### Cadre et partenaires du projet

Le stage s'insère dans le cadre du projet de recherche MeSeine InnEAUvation financé par le Service Public de l'Assainissement Parisien (SIAAP) qui fournit un accès à des stations d'épuration majeures de l'agglomération parisienne. Dans ce cadre, une thèse est en cours, intitulée : Caractérisation de la contamination des eaux de surface par le couplage d'analyses non-ciblées en spectrométrie de masse avec des analyses d'écotoxicologie. Quatre volets d'expérimentations sont prévus pour cette thèse :

- 1) L'estimation d'une limite de détection de signaux d'eaux usées en HRMS. Cette expérimentation permettra de déterminer la capacité de la HRMS à détecter des signaux faibles de contamination par des micropolluants issus des rejets d'eaux usées.
- 2) L'évaluation de la capacité de la HRMS à estimer la toxicité de molécules dont la toxicité est connue. Cette expérimentation de laboratoire servira de preuve de concept en conditions contrôlées avant d'analyser des échantillons plus complexes.

- 3) Le développement d'un modèle de prédiction de la toxicité en conditions proches du réel et extrêmes en couplant les analyses écotoxicologiques et les données issues de la HRMS.
- 4) Le suivi des campagnes de mesure effectuées dans le cadre du réseau MeSeine.

### Objectifs du stage

Le stage s'insère principalement dans le volet 2 du projet et les aspects analytiques des autres volets. Les objectifs sont les suivants :

- Préparer des échantillons (filtration, extraction sur phase solide concentration, fractionnement) et les analyser
- Analyser et identifier des molécules toxiques par HRMS (analyse ciblée et non ciblée)
- Corréler le nombre de molécules (ou groupements chimiques) identifiées par HRMS avec leur toxicité théorique
- Rechercher des patterns spécifiques de groupements chimiques à l'origine de la toxicité
- Associer à l'aide de méthodes statistiques ces patterns dans des échantillons environnementaux avec la toxicité mesurée à partir de l'échantillon
- Manipuler et traiter de données : traitements statistiques, utilisation de logiciels de traitement de données (ex. R).

### Profil recherché

Formation de niveau M2 ou ingénieur en chimie analytique ou chimie de l'environnement :

- Compétences en chimie analytique (méthodes d'extraction, de fractionnement, de séparation et de détection)
- Chimie de l'environnement (polluants, qualité des eaux et notions de traitement des eaux et d'écotoxicologie)
- Connaissances en statistiques et analyse de données, aisance avec les logiciels informatiques et langages de programmation
- Aisance dans la rédaction de rapport et bon niveau d'anglais souhaitable

---

**Pilotes du projet :** Julien Le Roux et Régis Moilleron **stage rémunéré**

#### Contacts :

- Julien Le Roux - [julien.le-roux@u-pec.fr](mailto:julien.le-roux@u-pec.fr)
- Julien SADE - [julien.sade@u-pec.fr](mailto:julien.sade@u-pec.fr)

**Lieu du stage :** LEESU, Université Paris-Est Créteil

**Laboratoire eau, environnement, et systèmes urbains (LEESU)**

61 avenue du Général de Gaulle

94010 CRETEIL Cédex