

Proposition de sujet de stage de Master 2 - 2026/2027

Titre du sujet :

Vers une meilleure caractérisation de la contamination chimique des écosystèmes aquatiques par des analyses non ciblées en spectrométrie de masse haute résolution

- **Mots-clés :** contaminants chimiques, produits de transformation, systèmes aquatiques, chromatographie en phase liquide - spectrométrie de masse haute résolution (HRMS), traitement de données
- **Laboratoires d'accueil et lieux de stage :**
Université de Bordeaux, UMR EPOC 5805 CNRS, équipe LPTC
- **Profil de formation initiale souhaitée pour le candidat :**
Chimie-physique, chimie analytique, chimie de l'environnement.

Responsables du stage :

* Nom, prénom : DEVIER Marie-Hélène et BUDZINSKI Hélène

Adresse : 351 cours de la Libération, bâtiment A12, 33 405 Talence Cedex

Tel : 05 40 00 69 98

Mail : et marie-helene.devier@u-bordeaux.fr et helene.budzinski@u-bordeaux.fr

- **Poursuite en thèse possible ?** OUI

Descriptif du sujet de stage :

Les activités humaines ont entraîné une contamination généralisée et complexe des milieux aquatiques par des milliers de molécules de synthèse, altérant ainsi leur qualité et leur fonctionnement. Face à cette pression toujours croissante, la restauration et/ou la préservation de la qualité de l'eau est un enjeu majeur pour l'environnement et pour la vie humaine. La caractérisation de ces contaminations complexes représente actuellement un défi majeur pour la recherche et la gestion environnementale ; il est donc nécessaire

d'améliorer cette caractérisation pour, à terme, réduire la pollution à la source et dans les milieux naturels.

L'approche chimique classique qui repose sur des analyses ciblées d'une liste limitée de contaminants n'est plus adaptée pour faire face à la contamination complexe de l'environnement, car elle ne renseigne que sur une infime partie des contaminants chimiques et n'intègre pas les effets de mélange. De plus, ces composés subissent de multiples transformations, que ce soit dans les stations de traitement des eaux usées ou dans l'environnement, qui sont peu connues. Une analyse la plus exhaustive possible des micropolluants organiques (MP), ainsi que de leurs produits de transformation (TP), présents dans les différents compartiments environnementaux est nécessaire pour évaluer avec confiance l'exposition et les risques. Le développement de la spectrométrie de masse haute résolution (HRMS) permet maintenant d'analyser de manière non-ciblée les échantillons, de détecter des substances jusque-là passées inaperçues et d'identifier des composés inconnus.

C'est dans ce contexte que s'inscrit le projet HOLI-AQUA (PEPR One Water), qui propose le développement de nouveaux outils, innovants et plus pertinents, de caractérisation de la qualité chimique des milieux aquatiques, associant approches chimique et biologique.

L'objectif de ces travaux de M2 est de progresser dans la caractérisation de l'exposome chimique en mettant en œuvre des analyses chimiques non ciblées d'échantillons environnementaux par HRMS. L'HRMS, combinant des mesures de masse précises par spectrométrie de masse en tandem (MS/MS) et une détection très sensible des fragments MS/MS associés, sera développée pour l'analyse des échantillons d'eau et de biote (gammare) du projet afin de caractériser de façon non ciblée (non-target screening, NTS) ou en mode suspect (suspect screening, SS) la contamination chimique de ceux-ci. Les analyses seront réalisées par chromatographie en phase liquide (LC) couplée à la spectrométrie de masse tandem quadrupôle/temps de vol (LC-QTOF) après les phases d'extraction et de reconcentration. Ces méthodologies de pointe sont relativement longues et complexes, procédant des empreintes moléculaires des échantillons (NTS) jusqu'à l'identification précise de composés inconnus, ce qui requiert de multiples étapes et des vérifications poussées. Le retraitement des données (logiciel constructeur ou outils en source libre, analyse statistique ou chimioinformatique) constituera donc une partie significative de la mission du stagiaire.

Références

- Hollender, J. et al. (2023) NORMAN guidance on suspect and non-target screening in environmental monitoring. Environmental Sciences Europe, 35, 75.
<http://doi.org/10.1186/s12302-023-00779-4>
- Schymanski, E. L. et al. (2015) Non-target screening with high-resolution mass spectrometry: critical review using a collaborative trial on water analysis. Analytical and Bioanalytical Chemistry, 407, 6237–6255.
<https://doi.org/10.1007/s00216-015-8681-7>
- Reverbel, S., Dévier, M.-H., Dupraz, V., Geneste, E., Budzinski, H. (2023) Assessment of the Presence of Transformation Products of Certain Pharmaceutical Products (Psychotropic Family) by Suspect and Non-Targeted HRMS Screening in Wastewater Treatment Plants. Toxics, 11(8), 713.
<https://doi.org/10.3390/toxics11080713>