



**HAL**  
open science

## Screening environnemental par couplage POCIS - spectrométrie de masse haute résolution : application aux eaux souterraines

Coralie Soulier, Charlotte Coureau, Catherine Berho, Anne Togola

### ► To cite this version:

Coralie Soulier, Charlotte Coureau, Catherine Berho, Anne Togola. Screening environnemental par couplage POCIS - spectrométrie de masse haute résolution : application aux eaux souterraines. Les polluants émergents : De nouveaux défis pour la gestion des eaux souterraines, May 2016, Orléans, France. hal-01307375

**HAL Id: hal-01307375**

**<https://brgm.hal.science/hal-01307375>**

Submitted on 26 Apr 2016

**HAL** is a multi-disciplinary open access archive for the deposit and dissemination of scientific research documents, whether they are published or not. The documents may come from teaching and research institutions in France or abroad, or from public or private research centers.

L'archive ouverte pluridisciplinaire **HAL**, est destinée au dépôt et à la diffusion de documents scientifiques de niveau recherche, publiés ou non, émanant des établissements d'enseignement et de recherche français ou étrangers, des laboratoires publics ou privés.

## **SCREENING ENVIRONNEMENTAL PAR COUPLAGE POCIS - SPECTROMETRIE DE MASSE HAUTE RESOLUTION : APPLICATION AUX EAUX SOUTERRAINES**

Soulier Coralie, Coureau Charlotte, Catherine Berho & Togola Anne

BRGM, Direction des Laboratoires, 3 avenue C. Guillemin, BP 36009 - 45060 Orleans Cedex 2, France

**Choix du thème:** Surveillance et analyse des polluants émergents dans les eaux souterraines (détection, monitoring, traçage...)

**Mots clefs:** screening ciblé, screening suspect, screening non-ciblé, Spectrométrie de Masse Haute Résolution, POCIS, Temps de vol

**Orateur:** (Soulier Coralie/ c.soulier@brgm.fr)

La surveillance des milieux aquatiques est principalement basée sur le suivi de contaminants réglementés. Pourtant les approches (éco)-toxicologiques montrent l'intérêt de suivre d'autres composés tels que les polluants émergents et les produits de transformation (de molécules réglementées ou non). Les instruments analytiques classiquement utilisés pour cette surveillance permettent uniquement la recherche de molécules définies au préalable. La spectrométrie de masse haute résolution (SMHR) permet quant à elle le screening exhaustif d'un échantillon. En effet, grâce au développement d'une méthodologie analytique, la totalité de l'information présente dans un échantillon est enregistrée. D'autre part, un des verrous analytiques à lever est l'abaissement des limites de détection des techniques analytiques puisque les micropolluants sont présents à des niveaux de concentrations relativement faibles dans les matrices environnementales (de l'ordre du dixième de ng/L). Grâce à la pré-concentration in situ et à sa capacité intégrative au cours du temps, l'échantillonnage passif permet d'abaisser les limites de détection conventionnelles et d'améliorer la représentativité d'un échantillon.

Le couplage de l'échantillonnage passif (POCIS : Polar Organic Chemical Integrative Sampler) et la spectrométrie de masse haute résolution (QTof) a été testé sur des eaux souterraines impactées par des sources de pollution agricole et / ou urbaines, sur deux sites d'études. Un échantillonnage classique (prélèvement ponctuel) et passif (POCIS) des eaux souterraines ont été réalisés sur plusieurs mois. Les échantillons ont été traités par une approche semi-quantitative et quantitative pour les composés phytosanitaires et pharmaceutiques ciblés ainsi que par une approche qualitative dans le but de détecter voire d'identifier des composés émergents. Le traitement des données par SMHR a été fait selon trois démarches : le screening ciblé par l'utilisation d'une base de données « maison » contenant plus de 500 composés ; le screening suspect qui repose sur des données issues de la littérature ; et le screening non-ciblé effectué à l'aide d'outils statistiques permettant de concentrer les efforts d'identification sur des molécules pertinentes.

L'avantage des POCIS pour du screening environnemental a été mis en évidence ; des composés non détectés par l'approche classique l'ont été par l'échantillonnage passif. 25 nouveaux composés ont été détectés et identifiés en partie dans les POCIS, il s'agit principalement de composés pharmaceutiques, de pesticides, de produits de soin corporels et de produits de transformations.