

Sujet de thèse (2018-2021)

Caractérisation des contaminants organiques dans les eaux urbaines par spectrométrie de masse haute résolution

Contexte scientifique

De nombreux micropolluants émergents sont présents dans les eaux urbaines mais leur comportement et leurs transformations dans les stations de traitement des eaux usées et dans l'environnement sont peu connus. L'analyse de micropolluants organiques 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. Les méthodes actuelles pour l'analyse non-ciblée des micropolluants organiques en HRMS (de l'extraction au traitement de données) sont longues et complexes, l'identification précise de molécules inconnues requérant de multiples étapes et des vérifications poussées. Des approches statistiques et plus exhaustives peuvent être développées pour caractériser et suivre les micropolluants organiques de manière globale dans les eaux urbaines.

Cadre et partenaires du projet

La thèse s'insère dans le cadre du projet de recherche WaterOmicr financé par l'Agence Nationale de la Recherche (2017-2021). Ce projet s'intitule « Traquer les micropolluants organiques dans les eaux urbaines par spectrométrie de masse haute résolution : approches omiques, empreintes et indices » et comporte 3 tâches de recherche : 1) développement analytique de protocoles d'extraction (SPE, fractionnement) et d'analyse (séparation HILIC ou en phase inverse et détection par UPLC-IMS-QTOF) ; 2) développement de méthodes de traitement de données et d'indices pour la caractérisation des micropolluants dans les procédés d'oxydation des eaux usées ; 3) application des méthodes développées aux eaux urbaines (performance du traitement des micropolluants organiques dans les eaux usées, qualité des eaux de surface impactées par les micropolluants, caractérisation des différentes eaux urbaines, i.e., eaux de ruissellement, eaux usées et eaux de surface).

Le projet s'appuiera sur les instruments analytiques de la plateforme d'analyse Prammics, en particulier sur les instruments de chromatographie en phase liquide (Waters Vion – UPLC-IMS-QTOF et Shimadzu HPLC Fraction collector). L'UPLC-IMS-QTOF est un instrument de HRMS équipé d'une séparation par mobilité ionique (IMS) permettant de séparer des composés habituellement co-élus (ex. isomères) et d'augmenter ainsi la résolution de l'instrument.

Le projet WaterOmicr est une collaboration avec le Syndicat Interdépartemental pour l'Assainissement de l'Agglomération Parisienne (SIAAP) qui fournira un accès à des stations d'épuration majeures de l'agglomération parisienne et participera au prélèvement d'échantillons. Des déplacements seront à

prévoir, en particulier sur le site de la station de Seine Centre à Colombes. Une collaboration sera également développée pour effectuer des analyses de toxicité avec des partenaires de l'Université d'Illinois at Urbana Champaign (USA).

Objectifs

Les objectifs de la thèse sont les suivants :

- Développer des protocoles d'extraction (fractionnement) et d'analyse des micropolluants organiques dans les eaux urbaines (en particulier eaux usées, matrices complexes) par UPLC-IMS-QTOF.
- Développer des méthodes de traitement de données adaptées à l'IMS-QTOF, et des indices permettant de caractériser les échantillons d'eaux urbaines sans identification de la structure des micropolluants.
- Appliquer ces méthodes et des méthodes statistiques plus classiques à différentes eaux urbaines et différents contextes (traitements par oxydation des eaux usées, eaux de ruissellement, eaux de surface...).
- Caractériser les eaux urbaines par des analyses chimiques et des analyses de toxicité en parallèle.

La thèse comprendra plusieurs volets nécessitant des compétences diverses :

- Campagnes de prélèvements d'échantillons (eaux usées, eaux naturelles...)
- Préparation (extraction, concentration, fractionnement) et analyses d'échantillons (chromatographie liquide et spectrométrie de masse)
- Manipulation et traitement de données : traitements statistiques, tests et utilisation de différents 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)
- connaissances en statistiques, aisance avec les logiciels informatiques et notions de programmation souhaitées
- Aisance dans la rédaction de rapport et bon niveau d'anglais souhaitable

Pilotes du projet : Julien Le Roux et Régis Moilleron

Contact : Julien Le Roux - julien.le-roux@u-pec.fr – 01 45 17 13 29

Lieu : LEESU, Université Paris-Est Créteil

Laboratoire eau, environnement, et systèmes urbains (LEESU)

61 avenue du Général de Gaulle
94010 CRETEIL Cédex