

DIPLÔME NATIONAL DE DOCTORAT

(Arrêté du 25 mai 2016)

Date de la soutenance : **17 avril 2025**

Nom de famille et prénom de l'auteur. e : **Monsieur Tom DUCROCQ**

Titre de la thèse : Exploration des micropolluants organiques dans les sédiments du Rhône par analyse non-ciblée

Résumé



De nombreuses molécules organiques sont synthétisées industriellement pour répondre à des usages et besoins humains sanitaires, alimentaires, de confort, etc. Ces molécules atteignent les milieux aquatiques via nos rejets d'eaux usées domestiques et industrielles ou par le ruissellement des eaux sur des sols soumis à diverses activités anthropiques en zones urbaines et rurales. Elles peuvent ensuite réagir entre elles, se dégrader et former des produits de transformation. Ces micropolluants peuvent être bioaccumulés dans la chaîne trophique, avec une toxicité potentielle et imprédictible. Selon un équilibre chimique entre phases dissoute et particulaire, en fonction de leur propriétés physico-chimiques, ils sont partiellement transférés dans les matières en suspension ou sédimentées. Et ils peuvent être remobilisés dans la phase dissoute lors d'épisodes de crues ou des chasses de barrages. Leur présence dans l'environnement a mené au dépassement de la 5ème limite planétaire et serait l'un des principaux facteurs responsables du déclin de la biodiversité. Les micropolluants historiques, comme les polychlorobiphényles, les pesticides organochlorés ou encore les hydrocarbures aromatiques polycycliques, pour la plupart interdits et inscrits dans la convention de Stockholm, sont analysés dans les sédiments classiquement par spectrométrie de masse couplée à la chromatographie en phase gazeuse (GC-MS). Les micropolluants d'intérêt émergent, comme les molécules pharmaceutiques, cosmétiques, pesticides, plastifiants et perfluorés sont souvent analysés par spectrométrie de masse couplée à la chromatographie en phase liquide (LC-MS). Ces méthodes d'analyses ciblées nécessitent d'avoir les étalons analytiques pour identifier et quantifier précisément chaque micropolluant sélectionné a priori, ce qui restreint le nombre de molécules étudiées par méthode. Grâce à l'essor de la spectrométrie de masse à haute résolution (HRMS), de nouvelles stratégies d'analyses moléculaires dites suspectées et non ciblées permettent d'identifier un plus grand nombre de molécules sans a priori avec différents niveaux d'information et de confiance. L'objectif de cette thèse est d'explorer un panel large de micropolluants organiques émergents dans les sédiments du Rhône par analyse suspectée et non ciblée. Le défi réside dans le traitement informatique et statistique de la grande quantité de données générées par LC-HRMS et dans la nature complexe de la matrice sédimentaire. Une étude bibliographique a fait la synthèse de

163 articles pour dresser l'état des connaissances sur la diversité des micropolluants organiques déjà identifiés dans des sédiments de lacs et de rivières à travers le monde, ainsi que sur les stratégies pour les analyser. Un développement analytique a ensuite été mené, en particulier sur l'extraction sédimentaire par solvant pour une analyse non ciblée par LC-HRMS ; et sur le traitement des données générées. Plusieurs logiciels en libre accès ont été combinés pour i) identifier/nommer des molécules grâce à la détection de leurs fragments, ii) mettre en évidence des molécules caractérisées par des groupements chlorés ou perfluorés grâce à la lecture de leur profil isotopique, iii) obtenir une vue de la composition moléculaire globale de l'échantillon grâce à la détection de l'ensemble des composés caractérisés par leur masse sur charge et leur temps de rétention. Ces méthodes ont ensuite été appliquées à des sédiments échantillonnés en amont et aval de Lyon, dans la Saône et le Rhône, entre septembre 2021 et Aout 2022, dans le cadre de l'observatoire des sédiments du Rhône (OSR). Les analyses suspectées et non ciblées ont permis de mettre en évidence la présence de pharmaceutiques, cosmétiques, hormones, pesticides, additifs de plastique et de pneu, perfluorés, retardateurs de flammes, composés industriels ainsi que des molécules naturelles; et d'étudier les tendances spatio-temporelles de cette contamination autour de la métropole lyonnaise.

Mots-clés : Matières en suspension, Spectrométrie de masse à haute résolution, Analyse non-ciblée, contaminants d'intérêt émergent, Analyse suspectée, Chromatographie