

# Stratégie pour la construction d'une base de données d'empreintes moléculaires organiques dissoutes par chromatographie liquide couplée à un spectromètre de masse haute résolution (LC-HRMS)

Soline Lèbre<sup>1</sup>, Matthieu Masson<sup>\*1</sup>, Sylvain Merel<sup>1</sup>, Amine Boukra<sup>1</sup>, Cécile Miège<sup>1</sup>

<sup>1</sup> UR RiverLy, INRAE - France

Les milieux aquatiques sont soumis à de nombreuses sources de pollution anthropique (eaux de ruissellement en zone rurale ou urbaine, rejets industriels, rejets de station de traitement d'eaux usées, déversoirs d'orage...) dont chacune contient de la matière organique dissoute (MOD) spécifique. L'analyse de la MOD peut donc renseigner sur l'origine d'une pollution dans un milieu aquatique.

L'analyse non ciblée par chromatographie liquide couplée à la spectrométrie de masse haute résolution (LC-HRMS) permet d'acquérir une vision approfondie de la composition moléculaire organique d'un échantillon (i.e. des milliers de molécules caractérisées par leur masse, temps de rétention et abondance) qui peut être interprétée comme une empreinte chimique. L'étude de ces empreintes nécessite la construction d'une base de données à partir d'échantillons reflétant des sources diverses et leur variation temporelle. La comparaison des données issues de séries analytiques différentes est impossible à cause des dérives instrumentales et de l'absence de contrôle qualité adéquat, i.e. un étalon stable contenant les milliers de signaux m/z représentatifs des échantillons. Notre objectif est de développer un "workflow" incluant une stratégie d'assurance qualité pour permettre l'étude comparée de différentes sources de MOD, issues de différentes séries d'analyses par LC-HRMS.

Outre la stratégie de tri et de correction des données par des algorithmes mathématiques, nous présentons ici les résultats d'un test sur la pertinence d'un contrôle qualité (CQ) fabriqué à partir d'extractions liquides de la MOD issue de sols, en faisant varier le type de sol et d'extraction (solvant aqueux, temps de contact sol/eau ; la fraction sol/eau). Une fois l'extraction optimale sélectionnée à l'aide d'un plan d'expériences carré gréco-latin, celle-ci a été répétée 10 fois pour comparer la variabilité de la composition du CQ avec celles d'échantillons d'eaux de rivières.

**Mots-Clés** : Matière organique dissoute, empreintes chimique, spectrométrie de masse haute résolution, contrôle qualité, base de données HRMS.