

UNIVERSITÉ DU QUÉBEC À MONTRÉAL

ANALYSE NON CIBLÉE DES CONTAMINANTS D'INTÉRÊT ÉMERGENT DANS LES EAUX USÉES ET
L'EAU POTABLE PAR CHROMATOGRAPHIE LIQUIDE À HAUTE PERFORMANCE COUPLÉE À LA
SPECTROMÉTRIE DE MASSE EN TANDEM À HAUTE RÉOLUTION

MÉMOIRE

PRÉSENTÉ(E)

COMME EXIGENCE PARTIELLE

MAÎTRISE EN CHIMIE

PAR

RAZIKA CHIKHI

JANVIER 2026

UNIVERSITÉ DU QUÉBEC À MONTRÉAL
Service des bibliothèques

Avertissement

La diffusion de ce mémoire se fait dans le respect des droits de son auteur, qui a signé le formulaire *Autorisation de reproduire et de diffuser un travail de recherche de cycles supérieurs* (SDU-522 – Rév.12-2023). Cette autorisation stipule que «conformément à l'article 11 du Règlement no 8 des études de cycles supérieurs, [l'auteur] concède à l'Université du Québec à Montréal une licence non exclusive d'utilisation et de publication de la totalité ou d'une partie importante de [son] travail de recherche pour des fins pédagogiques et non commerciales. Plus précisément, [l'auteur] autorise l'Université du Québec à Montréal à reproduire, diffuser, prêter, distribuer ou vendre des copies de [son] travail de recherche à des fins non commerciales sur quelque support que ce soit, y compris l'Internet. Cette licence et cette autorisation n'entraînent pas une renonciation de [la] part [de l'auteur] à [ses] droits moraux ni à [ses] droits de propriété intellectuelle. Sauf entente contraire, [l'auteur] conserve la liberté de diffuser et de commercialiser ou non ce travail dont [il] possède un exemplaire.»

REMERCIEMENTS

Je tiens tout d’abord à remercier ma directrice de recherche, Professeur Lekha Sleno, pour m’avoir donné la chance d’intégrer son équipe et de mener ce projet au sein de son laboratoire. Je lui suis particulièrement reconnaissante pour sa patience, sa compréhension et sa bienveillance. Son expertise et ses remarques pertinentes ont grandement enrichi la qualité de ce mémoire.

Je tiens à exprimer mes sincères remerciements à l’ensemble des membres de l’équipe du laboratoire, en particulier Leanne Ohlund, Maggy Lépine et Oriana Zambito, pour leur aide précieuse, ainsi qu’une mention spéciale à Nathan Ghafari pour son soutien constant tout au long de mon parcours, et pour l’énergie positive et l’enthousiasme qu’il a su transmettre.

Je souhaite également exprimer ma profonde reconnaissance à toutes les personnes et partenaires ayant contribué à la collecte et à la mise à disposition des échantillons, dont l’implication a été essentielle à la réussite de cette étude. Je tiens également à remercier mes collègues au travail et mes ami(e)s pour leurs encouragements, leur soutien moral.

Enfin, je remercie chaleureusement ma famille pour son soutien inestimable tout au long de cette aventure. Je tiens à exprimer toute ma reconnaissance à mon mari, qui m’a accompagnée dans les hauts comme dans les bas, avec patience et encouragement. À mes enfants, je suis profondément reconnaissante pour leur capacité à s’adapter et leur compréhension face à mes absences et mes moments de fatigue. Je remercie également mes parents, pour leur soutien constant, leurs encouragements et leur confiance en moi.

Et j’adresse une pensée émue à mon frère Hillal disparu, dont le souvenir reste présent dans mon cœur.

TABLE DES MATIÈRES

REMERCIEMENTS	ii
LISTE DES FIGURES.....	v
LISTE DES TABLEAUX	ix
LISTE DES ABRÉVIATIONS, DES SIGLES ET DES ACRONYMES.....	x
LISTE DES SYMBOLES ET DES UNITÉS	xii
RÉSUMÉ	xiii
ABSTRACT	xiv
CHAPITRE 1 - Introduction.....	15
1.1 Contaminants d'intérêt émergent	16
1.2 Classification des contaminants d'intérêt émergent et leurs effets éco-toxicologiques	17
1.2.1 Les produits pharmaceutiques	18
1.2.2 Les produits de soins personnels.....	20
1.2.3 Les stéroïdes	20
1.2.4 Les drogues illicites et les stimulants.....	21
1.2.5 Les pesticides	21
1.2.6 Les plastifiants.....	22
1.2.7 Les retardateurs de flammes	23
1.2.8 Les métabolites et les produits de transformation	23
1.3 Sources et devenir des contaminants d'intérêt émergent	24
1.4 Traitement et élimination des contaminants d'intérêt émergent.....	26
1.4.1 Traitement des eaux municipales	26
1.4.2 Traitement de l'eau potable	27
1.5 Réglementation des contaminants d'intérêt émergent dans les eaux usées et l'eau potable	29
1.6 Analyse des contaminants d'intérêt émergent.....	30
1.6.1 Extraction en phase solide	31
1.6.2 Chromatographie liquide haute performance couplée à la spectrométrie de masse en tandem à haute résolution.	33
1.6.2.1 Chromatographie liquide haute performance.....	33
1.6.2.2 Spectrométrie de masse à haute résolution	36
1.6.2.2.1 Analyseur de masse quadripôle temps de vol (QqTOF)	37
1.6.2.2.2 Acquisition de données	39
1.7 Objectif de l'étude.....	40
CHAPITRE 2 MÉTHODOLOGIE.....	42

2.1 Matériels et méthode	42
2.1.1 Produits chimiques	42
2.1.2 Prélèvement des échantillons.....	42
2.1.3 Préparation des échantillons	44
2.1.4 Analyse UHPLC-HRMS/MS	45
2.1.5 Traitement de données.....	46
CHAPITRE 3 RÉSULTATS DES ANALYSES NON CIBLÉES D'ÉCHANTILLONS D'EAUX USÉES.....	48
3.1 Comparaison d'extraction de contaminants à l'aide de cartouches d'extraction différentes	49
3.2 Complémentarité des méthodes analytiques.....	51
3.3 Identification des contaminants détectés.....	53
3.3.1 Les produits pharmaceutiques et leurs métabolites	55
3.3.2 Les stéroïdes et leurs métabolites	62
3.3.3 Les produits naturels et leurs métabolites	65
3.3.4 Les produits synthétiques et leurs métabolites.....	67
3.4 Identification non ciblée de la cocaïne	73
3.5 Impact des méthodes analytiques sur la détection des contaminants émergents	74
3.5.1 Impact du choix de cartouche d'extraction	74
3.5.2 Impact du mode d'ionisation	75
3.5.3 L'impact de la phase mobile	79
3.6 Variation temporelle des contaminants émergents	80
3.7 Impact des traitements physico-chimiques sur le profil de contamination des eaux usées	84
CHAPITRE 4 L'ANALYSE PAR LC-HRMS/MS NON-CIBLÉE D'ÉCHANTILLONS D'EAU POTABLE	86
4.1 Complémentarité des méthodes	86
4.2 Identification des contaminants détectés.....	87
4.3 Études des variations de détections selon les usines et le mois de collecte	91
4.4 Atrazine et ses métabolites.....	92
4.5 Les chloroacétanilides	97
4.6 Les antioxydants industriels	100
4.7 Contaminants détectés avant et après traitement.....	101
4.8 Contaminants non détectés (ou diminués) après le traitement d'eau potable	105
CONCLUSION	108
ANNEXE A – DONNÉES SUPPLÉMENTAIRES DES EAUX USÉES POUR LA COMPARAISON DES MÉTHODES DE PRÉPARATION PAR SPE	111
ANNEXE B – DONNÉES SUPPLÉMENTAIRES DES EAUX POTABLES	138
RÉFÉRENCES	158

LISTE DES FIGURES

Figure 1.1 Schéma du cycle de l'eau et les sources de contamination	25
Figure 1.2 Principales étapes de traitement des eaux usées municipale	27
Figure 1.3 Étapes principales du traitement de l'eau potable des six usines	29
Figure 1.4 Étapes d'extraction en phase solide.....	32
Figure 1.5 Phases stationnaires des cartouches d'extraction testées pour la préparation des eaux usées	33
Figure 1.6 Schéma général d'un système de chromatographie liquide à haute performance	35
Figure 1.7 Représentation de la phase stationnaire de la colonne analytique Biphenyl type Core-Shell utilisé pour ce projet de recherche	36
Figure 1.8 Schéma général d'un spectromètre de masse	37
Figure 1.9 Schéma de l'analyseur de masse quadripôle temps de vol (QqTOF)	39
Figure 1.10 Aperçu de l'acquisition indépendante des données (DIA)).....	40
Figure 2.1 La carte de la grande région métropolitaine de Montréal inspirée de (MELCCFP, 2025a).....	43
Figure 2.2 Gradient d'élution utilisé pour la séparation chromatographique des échantillons d'eaux extraits par SPE. La composition de la phase mobile organique (acétonitrile, avec ou sans acide formique 0.1%)	46
Figure 2.3 Les logiciels et étapes utilisées lors du traitement de données.....	47
Figure 3.1 Cartes thermiques pour illustrer les abondances relatives des composés détectés durant la période de mai à juillet 2022 (listés en annexe 1) dans les eaux usées selon le type de cartouche SPE utilisé et méthodes analytiques. Ces cartes thermiques ont été produites à l'aide du logiciel MetaboAnalyst 6.0	50
Figure 3.2 Diagramme de Venn illustrant le nombre de composés détectés dans les échantillons eaux usées à l'aide d'extraction sur phase solide avec des cartouches C18 et X-AW	51
Figure 3.3 Diagrammes de Venn illustrant le nombre de composés identifiés à partir de leurs spectres MS/MS à haute résolution, en utilisant trois méthodes d'acquisition différentes et deux préparations d'échantillons par SPE	52
Figure 3.4 Distribution des catégories des composés détectés selon les conditions d'extraction et d'analyse	54
Figure 3.5 Voies de transformation (métabolisme) de la carbamazépine	61

Figure 3.6 Chromatogramme représentative montrant les pics des stéroïdes non-conjugués identifiées dans les eaux usées identifiés par correspondance spectrales MS/MS, avec la méthode FA(+)	64
Figure 3.7 Chromatogramme représentative montrant les pics des stéroïdes conjugués identifiées dans les eaux usées extraits identifiés par correspondance spectrales MS/MS, avec la méthode AmAc(-)	64
Figure 3.8 Résultats obtenus pour l'identification putative de deux bisphénols, BPA et BPS dans les échantillons d'eaux usées. Les deux sont bien détectés avec la méthode AmAc (-) et les spectres MS/MS correspondent bien à ceux rapportés dans la littérature (Ousji <i>et al.</i> , 2020); (Ousji et Sleno, 2021)	71
Figure 3.9 La détection de la phenacétine avec la méthode FA (+) au temps de rétention 5.1 min. Cette figure montre son chromatogramme d'ions extraits de la molécule protonée à m/z 180.01, son spectre MS et la bonne correspondance entre le spectre MS/MS d'un échantillon représentatif, avec celle dans la base de données	72
Figure 3.10 Chromatogramme d'ions extraits et structures de la cocaïne et ses métabolites retrouvés dans les eaux usées, ainsi que le spectre MS/MS de la cocaïne en mode positive et ses voies de fragmentation	73
Figure 3.11 Stéroïdes non-conjugués extraits exclusivement avec la cartouche C18	74
Figure 3.12 Stéroïdes conjugués extraits exclusivement avec la cartouche X-AW	75
Figure 3.13 La venlafaxine est bien détectée en mode positif grâce à son amine tertiaire qui peut facilement être protonée. Cette figure montre son chromatogramme d'ions extraits de la molécule protonée à m/z 278.21, à un temps de rétention de 5.5 min. Le spectre MS/MS de nos données d'eaux usées correspond bien avec celui dans la base de données pour une bonne identification putative	77
Figure 3.14 La naproxène est bien détectée en mode négatif grâce à son groupement d'acide carboxylique qui peut facilement être déprotonée. Cette figure montre son chromatogramme d'ions extraits de la molécule protonée à m/z 229.05, à un temps de rétention de 4.7 min. Le spectre MS/MS de nos données d'eaux usées correspond bien avec celui dans la base de données pour une bonne identification putative.	78
Figure 3.15 Le valsartan est bien détectée à 9.5 min en mode positif et négatif grâce à son amine tertiaire qui peut facilement être protonée, et son groupement d'acide carboxylique pouvant être déprotonée. Les spectres MS/MS résultants des deux modes ont plusieurs fragments divers utiles à confirmer sa structure par correspondance spectrale.	79
Figure 3.16 Chromatogramme extrait de la molécule déprotonée de TBHQ+SO ₃ extrait par la cartouche X-AW comparant les deux phases mobiles utilisées en mode négatif	80
Figure 3.17 Profil temporel de l'oxybenzone et son métabolite déméthylé dans les eaux usées de la région métropolitaine de Montréal, détecté en mode positif avec la méthode d'extraction SPE C18	82
Figure 3.18 Profil temporel du DEET dans les affluents et effluents d'eaux usées de la région métropolitaine de Montréal	83

Figure 3.19 Analyse des composantes principales (PCA) des composés détectés par LC-HRMS/MS dans les eaux usées avant (affluent) et après traitement (effluent), selon la méthode de préparation des échantillons des eaux usées par extraction en phase solide.....	84
Figure 4.1 Répartition des contaminants selon trois méthodes analytiques	87
Figure 4.2 Carte thermique des contaminants détectés dans les eaux brutes et traitées de six usines de production d'eau potable, collecté mensuellement entre février et juin 2023, inclusivement. Les chiffres entre parenthèses correspondent aux contaminants dans le Tableau 4.1. Pour certains composés qui ont été détecté par plusieurs méthodes, cela est indiqué par I-III, où I correspond à la méthode FA (+), II à FA (-) et III à AmAc (-). Le générateur de cartes thermiques HG-CHM (MD Anderson Cancer Center) a été utilisé pour générer des représentations de cartes thermiques de ces données (Ryan <i>et al.</i> , 2019)	91
Figure 4.3 Distribution des aires pour l'atrazine (ATZ) et ses métabolites DE-ATZ, DI-ATZ, H-ATZ et ATR. La méthode analytique utilisée est FA (+).....	94
Figure 4.4 Chromatogramme représentatif de l'atrazine et ces métabolites dans l'eau potable brute (A) et traité (B) provenant de l'usine A en mars 2022 suivant l'analyse avec la méthode LC-HRMS/MS FA (+)	95
Figure 4.5 Spectres MS/MS de l'atrazine et ces quatre métabolites retrouvés dans les échantillons d'eau potable. Leur fragmentation confirme leurs structures différentes, avec la perte des groupement alkylé (éthyl et isopropyl) ainsi qu'une perte de la molécule HCl si le chlore est présent sur la molécule	96
Figure 4.6 Les structures chimiques de la métalochlore et ses métabolites (ESA et OA) (a) ainsi que la structure de l'acétochlore ESA (b), retrouvés dans les eaux potables	97
Figure 4.7 Distribution des aires de pics chromatographiques des ions extraits pour le métolachlore, ses deux métabolites et un métabolite de l'acétachlore. Les méthodes d'analyses sont indiquées après les noms de chaque composé (I: FA (+), II: FA (-), III: (AmAc (-)). Ces produits montrent une persistance même après le traitement de l'eau potable.....	99
Figure 4.8 Les trois produits d'oxydation (ou métabolites oxydés) du BHT détectés tous avec des niveaux sélectivement plus hauts dans les échantillons d'eau brute collectés en juin 2023 des six usines .	100
Figure 4.9 Structures de plusieurs médicaments qui persistent après le traitement d'eau potable et détectés dans la majorité des échantillons analysés	102
Figure 4.10 Distribution des aires de plusieurs médicaments ayant une tendance similaire dans les échantillons d'eau potable. Les méthodes d'analyses sont indiquées après les noms de chaque composé (I : FA(+), II: FA(-)).	103
Figure 4.11 Structures chimiques de certains médicaments (ou leur métabolite) qui diminue après le traitement d'eau potable	105
Figure 4.12 Distribution des aires de la lidocaine (LIDO), le venlafaxine (VEN) et son métabolite déméthylé O-desméthylvenlafaxine (ODV), et la fexofénadine (FEX), montrant une diminution de leur niveau	

dans les échantillons d’eau potable après le traitement des six usines, et ce pour tous les échantillons
 106

LISTE DES TABLEAUX

Tableau 2.1 Protocole de l'extraction en phase solide des échantillons d'eaux usée et de l'eau potable .	45
Tableau 2.2 Trois méthodes utilisant la colonne biphényl pour l'analyse des contaminants dans les échantillons d'eau.....	46
Tableau 3.1 Les médicaments (et leurs métabolites) détectés dans les échantillons d'eaux usées selon la méthode d'extraction et d'analyse.....	57
Tableau 3.2 Les Stéroïdes détectés dans les échantillons d'eaux usées selon la méthode d'extraction et d'analyse	63
Tableau 3.3 Les produits naturels (et leurs métabolites) détectés dans les échantillons d'eaux usées selon la méthode d'extraction et d'analyse	66
Tableau 3.4 Produits synthétiques (et leurs métabolites) détectés dans les échantillons d'eaux usées selon la méthode d'extraction et d'analyse	68
Tableau 3.5 Structures des contaminants plastifiants divers détectés dans les eaux usées	70
Tableau 4.1 Contaminants sélectionnés détectés par LC-HRMS/MS dans l'eau potable	89

LISTE DES ABRÉVIATIONS, DES SIGLES ET DES ACRONYMES

ACN	Acétonitrile
AmAc	Acétate d'ammonium
CE	Contaminants émergents
CECs	Contaminants of emerging concern
CID	Dissociation induite par collision (<i>collision induced dissociation</i>)
CIE	Contaminants d'intérêt émergent
DDA	Acquisition dépendante des données (<i>Data-Dependent Acquisition</i>)
DIA	Acquisition indépendante des données (<i>Data-Independent Acquisition</i>)
ESI	Ionisation par électrospray (électronébulisation)
FA	Acide formique
FWHM	Largeur à mi-hauteur (<i>Full Width at Half Maximum</i>)
GC	Chromatographie gazeuse
HPLC	Chromatographie liquide à haute performance
HRMS	Spectrométrie de masse à haute résolution (<i>High resolution mass spectrometry</i>)
LC	Chromatographie liquide
LC-HRMS/MS	Chromatographie liquide couplée à la spectrométrie de masse haute résolution en tandem
MDR	Micro-organismes multirésistants aux médicaments (<i>Multi-Drug Resistance</i>)
MeOH	Méthanol

MRP	Pouvoir de résolution de masse (<i>Mass Resolving Power</i>)
MS	Spectrométrie de masse
MS/MS	Spectrométrie de masse en tandem
NF	Nanofiltration
PPSPs	Produits pharmaceutiques et des produits de soins personnels
PPs	Produits pharmaceutiques
Q	Quadripôle
QqTOF	Quadripôle-temps de vol
RT (ou tr)	Temps de rétention (<i>Retention time</i>)
SPE	Extraction en phase solide (<i>Solid phase extraction</i>)
TOF	Temps de vol (<i>Time of flight</i>)
HPLC	Chromatographie à haute performance (<i>Hight-Performence Liquide Chromatography</i>)
HRMS/MS	Spectrométrie de Masse Haute Résolution en Tandem (<i>Ultra-High-Performance Liquid Chromatography coupled with High-Resolution Tandem Mass Spectrometry</i>)
UV	Ultra-violet

LISTE DES SYMBOLES ET DES UNITÉS

%	Pourcentage
°C	degré Celcius
μm	micromètre
μg/L	microgramme par litre
cps	Comptes par seconde (counts per second)
ng/L	nanogramme par litre
ppm	en parties par million
psi	livres par pouce carré (pounds per square inch)
m	masse
m/z	Rapport masse sur charge
ml/min	millilitres par minute
mg	milligramme
V	Volt

RÉSUMÉ

La surveillance de la qualité de l'eau est un enjeu majeur de santé publique et environnementale, notamment en raison de la présence de contaminants d'intérêt émergents (CIE) persistants. Cette étude vise à caractériser les CIE dans les eaux usées et l'eau potable de la grande région métropolitaine de Montréal à l'aide d'une approche analytique non ciblée par chromatographie liquide à haute performance couplée à la spectrométrie de masse en tandem à haute résolution (HPLC-HRMS/MS ou LC-HRMS/MS). Des échantillons ont été prélevés entre février 2022 et juin 2023, en amont et en aval du traitement d'une station d'épuration, ainsi que dans six usines de production d'eau potable. Une étude comparative de l'extraction en phase solide (SPE) a conduit à la sélection des cartouches C18 et X-AW pour les eaux usées, et de la cartouche C18 pour l'eau potable. L'approche non ciblée appliquée aux eaux usées a permis de reconstituer des voies métaboliques complètes. L'analyse des stéroïdes a conduit à l'identification de 12 stéroïdes non conjugués, dont 10 ont été extraits exclusivement à l'aide de la cartouche C18, ainsi que de 15 stéroïdes conjugués, parmi lesquels 10 ont été détectés uniquement avec la cartouche X-AW. Des contaminants synthétiques tels que le bisphénol A et le bisphénol S, ainsi que des substances inattendues comme la phénacétine et la cocaïne, accompagnées de leurs métabolites, ont également été mis en évidence. Une variabilité saisonnière a été observée pour certains CIE associés aux produits de soins personnels et aux répulsifs. L'efficacité du traitement des eaux usées a été évaluée à l'aide d'une analyse en composantes principales, permettant une discrimination nette entre les affluents et les effluents. Concernant l'eau potable, l'analyse par carte thermique a permis de mettre en évidence des tendances distinctes de distribution des CIE entre les six usines de production. Les herbicides, notamment l'atrazine et ses métabolites ainsi que le métolachlore et ses métabolites ont été détectés dans l'ensemble des usines. Des antioxydants industriels, incluant le BHT et ses produits d'oxydation ont également été observés. En outre, plusieurs produits pharmaceutiques et métabolites ont été identifiés, soulignant la persistance de certains CIE à travers les procédés de traitement de l'eau potable. Dans l'ensemble, cette recherche démontre la pertinence de l'analyse non ciblée par LC-HRMS/MS comme outil de surveillance environnementale des CIE et propose des pistes méthodologiques pour améliorer leur détection et leur caractérisation dans des matrices aquatiques complexes.

Mots clés : Contaminants d'intérêt émergents, analyse non ciblée, eaux usées, eau potable, extraction en phase solide (SPE), chromatographie liquide à haute performanc, spectrométrie de masse à haute résolution, variabilité temporelle.

ABSTRACT

Water quality monitoring is a major public health and environmental issue, particularly due to the presence of persistent contaminants of emerging concern (CECs). This study aims to characterize CECs in wastewater and drinking water from the Greater Montreal Metropolitan Area using a non-targeted analytical approach based on high-performance liquid chromatography coupled with high-resolution tandem mass spectrometry (HPLC-HRMS/MS or LC-HRMS/MS). Samples were collected between February 2022 and June 2023, upstream and downstream of treatment at a wastewater treatment plant, as well as from six drinking water production plants. A comparative solid-phase extraction (SPE) study led to the selection of C18 and X-AW cartridges for wastewater analysis and the C18 cartridge for drinking water analysis. The non-targeted approach applied to wastewater enabled the reconstruction of complete metabolic pathways. Steroid analysis resulted in the identification of 12 unconjugated steroids, 10 of which were extracted exclusively using the C18 cartridge, as well as 15 conjugated steroids, among which 10 were detected only with the X-AW cartridge. Synthetic contaminants such as bisphenol A and bisphenol S, as well as unexpected substances including phenacetin and cocaine and their metabolites, were also identified. Seasonal variability was observed for certain CECs associated with personal care products and repellents. The efficiency of wastewater treatment was evaluated using principal component analysis, allowing clear discrimination between influent and effluent samples. For drinking water, heat map analysis revealed distinct distribution trends of CECs among the six production plants. Herbicides, notably atrazine and its metabolites as well as metolachlor and its metabolites, were detected at all plants. Industrial antioxidants, including butylated hydroxytoluene (BHT) and its oxidation products, were also observed. In addition, several pharmaceuticals and their metabolites were identified, highlighting the persistence of certain CECs through drinking water treatment processes. Overall, this research demonstrates the relevance of non-targeted LC-HRMS/MS analysis as a powerful tool for environmental monitoring of contaminants of emerging concern and proposes methodological strategies to improve their detection and characterization in complex aquatic matrices.

Keywords: contaminants of emerging concern , non-targeted analysis, wastewater, drinking water, solid-phase extraction (SPE), high-performance liquid chromatography, high-resolution mass spectrometry, temporal variability.

CHAPITRE 1 - Introduction

Les contaminants d'intérêt émergent (CIE) constituent aujourd'hui un enjeu environnemental et sanitaire majeur. Il s'agit principalement de composés organiques non réglementés, issus de l'activité anthropique moderne, tels que les produits pharmaceutiques, les drogues illicites, les produits de soins personnels, les additifs industriels, les pesticides ou encore certains métabolites de transformation. Leur présence croissante dans les eaux de surface, les eaux souterraines et même l'eau potable soulève d'importantes préoccupations, tant pour les écosystèmes aquatiques que pour la santé humaine (Stefanakis et Becker, 2016). Le rejet constant de ces substances, via les eaux usées municipales, hospitalières, industrielles ou agricoles, ainsi que la faible efficacité des traitements conventionnels pour les éliminer, entraînent leur accumulation dans l'environnement aquatique (Pal *et al.*, 2014); (Mohapatra et Kirpalani, 2019).

Ces contaminants, auparavant indétectables, ne sont mis en évidence que grâce aux avancées récentes en chimie analytique, notamment via la spectrométrie de masse à haute résolution (HRMS). Cette technologie, couplée à la chromatographie liquide haute performance (LC), permet d'analyser des composés à l'état de trace, souvent à des concentrations inférieures au nanogramme par litre (ng/L), tout en offrant une puissance de discrimination suffisante pour différencier des substances de masses proches (Madikizela *et al.*, 2020).

Traditionnellement, la surveillance de la qualité des eaux s'est appuyée sur des méthodes ciblées, c'est-à-dire des approches analytiques focalisées sur une liste prédéfinie de composés pour lesquels des standards analytiques sont disponibles. Bien que robustes, ces méthodes sont intrinsèquement limitées puisqu'elles ne permettent pas de détecter des substances inconnues, des produits de transformation ou des polluants émergents non anticipés (Krauss *et al.*, 2010).

Face à cette limitation, l'analyse non ciblée (*Non-Target Screening, NTS*) s'impose comme une approche innovante et performante. Cette stratégie repose sur la détection de tous les signaux présents dans un échantillon, indépendamment de toute hypothèse préalable sur la nature des composés. Elle s'appuie sur la combinaison de la chromatographie liquide (LC) avec la spectrométrie de masse à haute résolution en tandem (HRMS/MS), permettant de générer des données de masse précises, des temps de rétention reproductibles, et des spectres de fragmentation interprétables. Des outils informatiques de traitement

avancé, tels que l'extraction de caractéristiques, la recherche dans des bases de données et l'interprétation automatique de spectres MS/MS, sont ensuite mobilisés pour annoter les composés détectés (Schymanski *et al.*, 2015).

C'est dans ce cadre que s'inscrit le présent mémoire, qui vise à explorer le potentiel de l'analyse non ciblée par LC-HRMS/MS pour la détection et la caractérisation des contaminants d'intérêt émergents dans les eaux usées et l'eau potable. L'objectif principal est d'illustrer la diversité des composés présents, en mettant en évidence des substances parfois inattendues ou oubliées, à travers d'une stratégie analytique multicritère basée sur des extractions SPE, des variations de conditions chromatographiques, et une annotation fondée sur des bibliothèques spectrales. Cette démarche permet également d'évaluer la robustesse des approches non ciblées pour des applications de surveillance environnementale à long terme.

Dans ce chapitre, nous aborderons la notion de contaminants d'intérêt émergent (CIE), en précisant leur définition, leur classification, ainsi que leurs effets potentiels sur la santé humaine et les écosystèmes. Nous explorerons également les principales sources de ces polluants dans les milieux aquatiques, ainsi que les limites des procédés conventionnels de traitement des eaux usées et des eaux douces face à ces substances. Les enjeux associés à leur surveillance environnementale seront également discutés. Enfin, une attention particulière sera accordée aux méthodes analytiques modernes, notamment à l'apport de la spectrométrie de masse, pour la détection, l'identification et la quantification de ces composés à l'état de traces.

1.1 Contaminants d'intérêt émergent

Les contaminants d'intérêt émergents (CIE) sont des substances chimiques ou des micro-organismes, qu'ils soient d'origine synthétique ou naturelle qui ne sont pas couramment surveillés dans l'environnement, ces contaminants ont le potentiel de pénétrer dans l'environnement et de causer des effets écologiques ou des risques pour la santé humaine connus ou suspectés (Rosenfeld et Feng, 2011). Le terme contaminant d'intérêt émergent peut être utilisé pour désigner au moins trois catégories de composés qui suscitent actuellement l'inquiétude des toxicologues et des chimistes de l'environnement, la première catégorie regroupe les contaminants récemment introduits dans l'environnement, ces contaminants peuvent résulter de nouvelles technologies, de produits chimiques industriels nouvellement développés. La deuxième catégorie concerne les contaminants récemment détectés, ces substances étaient présentes

dans l'environnement depuis un certain temps, mais qui n'ont été détectées depuis peu de temps en raison d'amélioration et de développement des techniques de surveillance et d'analyse, cette catégorie peut inclure les produits pharmaceutiques, les produits de soin personnel, les hormones. La dernière catégorie est les contaminants reconnus récemment pour leurs effets potentiels sur la santé humaine et sur les écosystèmes, cela peut inclure des pesticides, des produits chimiques industriels et des produits pharmaceutiques dont les effets à faibles concentrations n'étaient pas auparavant connus. (Houtman, 2010).

Les CIE sont détectés dans l'ensemble des écosystèmes du monde entier incluant les zones isolées et vierges et aussi dans les eaux potables (Benotti et Brownawell, 2009). La présence des contaminants émergents dans l'écosystème aquatique présente une préoccupation majeure à cause des lacunes concernant le risque qui pourraient provoquer à la santé humaine et à la faune (Morin-Crini *et al.*, 2022) (Morin-Crini *et al.*, 2022). L'évaluation de ces risques reste particulièrement difficile dans les divers écosystèmes que ce soient les lacs, l'eau de surface, l'eau marine. Ces écosystèmes sont fragiles et sont affectés par les perturbations anthropiques (industrialisation, pollution) ce qui rend le suivi et la détection des CIE plus difficile (Morin-Crini *et al.*, 2022).

1.2 Classification des contaminants d'intérêt émergent et leurs effets éco-toxicologiques

À ce jour, il n'existe pas de classification universellement reconnue pour les contaminants d'intérêt émergent (CIE), en raison de leur grande hétérogénéité chimique, physique et biologique, ainsi que de l'apparition régulière de nouvelles substances dont les risques toxicologiques et écotoxicologiques restent mal connus (Morin-Crini *et al.*, 2022). Cette diversité complique leur définition et engendre une certaine confusion quant à leur catégorisation (Daughton, Christian G., 2005).

Au fil du temps, plusieurs regroupements ont été proposés selon des critères comme la persistance environnementale, les effets toxiques ou le degré de connaissance réglementaire. Parmi les classifications courantes figurent les perturbateurs endocriniens, les contaminants persistants, bioaccumulables et toxiques, les très persistants et très bioaccumulables, les polluants organiques persistants, les contaminants prioritaires, les xénobiotiques, les produits chimiques à haut volume de production, ainsi que les substances cancérigènes, mutagènes et toxiques pour la reproduction (Stefanakis et Becker, 2016).

D'autres auteurs privilégient une approche par type d'usage. (Harish et Jegatheesan, 2025) distinguent les produits pharmaceutiques, les produits de soins personnels, les pesticides et d'autres sources, tandis que (Pereira et al., 2015) incluent également les plastifiants, retardateurs de flamme, tensioactifs et nanomatériaux.

Au-delà des classifications, l'évaluation des CIE doit intégrer leurs effets écotoxicologiques sur les organismes et les écosystèmes. L'écotoxicologie, selon (Boudou, 1989), examine les impacts des contaminants en tenant compte de leur bioaccumulation, du transfert trophique et des effets biologiques (létaux ou sublétaux) à différentes échelles biologiques. La bioaccumulation se produit via l'exposition à l'environnement (eau, sédiments) et à la nourriture (Arnot et Gobas, 2006).

Un paramètre clé dans l'étude de la bioaccumulation est le coefficient de partage octanol/eau (K_{ow}), qui permet d'estimer la propension d'un contaminant organique à s'accumuler dans les tissus lipidiques des organismes aquatiques. Le K_{ow} est ainsi largement utilisé pour prédire le comportement environnemental des substances hydrophobes (Fisk *et al.*, 1999).

Les sous-sections suivantes abordent quelques-uns des principaux groupes de contaminants d'intérêt émergent.

1.2.1 Les produits pharmaceutiques

Les produits pharmaceutiques (PPs) constituent une catégorie majeure de contaminants organiques émergents, fréquemment détectés à l'état de traces dans les ressources hydriques mondiales. Leur émergence en tant que polluants environnementaux est attribuée à l'utilisation croissante de ces substances tant en médecine humaine qu'en médecine vétérinaire et dans des domaines variés tels que la nutrition, le diagnostic, la thérapeutique et la prévention des maladies (Mahmood *et al.*, 2022). Au cours des dernières décennies, la consommation soutenue de médicaments, combinée aux progrès technologiques permettant la détection de composés à des concentrations ultra-faibles a conduit à l'identification de nombreux principes actifs pharmaceutiques, d'origine humaine et vétérinaire, dans divers compartiments environnementaux, notamment les rivières, les lacs, les eaux souterraines et les effluents des stations de traitement des eaux usées (Lei *et al.*, 2015). En raison de leurs propriétés physico-chimiques spécifiques et de leur stabilité biologique (Vasilachi *et al.*, 2021) (Vasilachi et al., 2021), de nombreux produits pharmaceutiques sont peu ou pas dégradés lors des traitements conventionnels des

eaux usées. Ils sont ainsi rejetés dans les milieux aquatiques sous forme inchangée, sous forme de métabolites ou de produits de transformation (Benotti et Brownawell, 2009). Cette contamination des ressources en eau constitue un enjeu critique pour la qualité de l'eau destinée à la consommation humaine (Stefanakis et Becker, 2016). En raison de leur apparition relativement récente en tant que contaminants environnementaux, les connaissances actuelles sur les effets létaux et sublétaux des produits pharmaceutiques qu'ils soient considérés individuellement ou en mélange restent limitées, tant sur les organismes cibles que sur les écosystèmes aquatiques (Srain *et al.*, 2021). La persistance environnementale des anti-inflammatoires non stéroïdiens (AINS) tels que l'ibuprofène, le diclofénac, et l'acide acétylsalicylique, ainsi que les analgésiques comme l'acétaminophène varie selon leurs propriétés physico-chimiques, leur capacité à se dégrader biologiquement, et leur affinité pour les sédiments (Heberer, 2002). L'exposition chronique à ces composés, même à faibles concentrations, soulève des préoccupations éco-toxicologiques importantes. Des études ont démontré des effets toxiques sublétaux chez différentes espèces aquatiques, tels que des perturbations endocriniennes, des altérations du comportement ainsi que des effets sur la reproduction, le développement, le stress oxydatif et la biochimie hépatique (Ebele *et al.*, 2017); (Fabbri et Franzellitti, 2016). Les psychotropes tels que les antidépresseurs, anxiolytiques, neuroleptiques et stimulants du système nerveux central sont spécifiquement conçues pour exercer des effets biologiques à très faibles concentrations sur le système nerveux humain, ce qui implique qu'elles peuvent également présenter une activité significative chez les organismes aquatiques, même à des niveaux de l'ordre du nanogramme à quelques microgrammes par litre (ng/L- µg/L). Plusieurs études ont mis en évidence leur capacité à induire des modifications comportementales, des troubles de la reproduction, ainsi que des perturbations du système neuroendocrinien chez divers organismes aquatiques, notamment les poissons, les invertébrés et les algues (Fabbri et Franzellitti, 2016). La persistance des produits pharmaceutiques et des produits de soins personnels (PPSPs) dans les milieux aquatiques et les sols représente une menace environnementale majeure, notamment en favorisant l'émergence de micro-organismes multirésistants (MDR), de bactéries résistantes aux antibiotiques (ARB) et de gènes de résistance aux antibiotiques (ARGs). La multirésistance (MDR) se définit comme la capacité acquise par des souches microbiennes à résister à plusieurs antibiotiques, alors qu'elles y étaient auparavant sensibles ainsi divers agents pathogènes ont développé une résistance à plusieurs classes d'antibiotiques (Chaturvedi *et al.*, 2021). Les antibiotiques ont été reportés d'avoir modifié la structure de la communauté microbienne des sols, inhiber la croissance des algues bleu-vert et les plantes aquatiques ainsi que des effets biochimiques sur les poissons exposés (Singh *et al.*, 2021).

1.2.2 Les produits de soins personnels

Les produits de soins personnels constituent l'un des groupes les plus étendus de contaminants émergents présents dans l'environnement (Boxall *et al.*, 2012). Bien qu'ils soient couramment employés pour améliorer le confort et l'hygiène au quotidien, leur présence dans les milieux aquatiques qu'il s'agisse des organismes vivants, des sédiments ou des eaux de surface et souterraines soulève des préoccupations croissantes en raison de leurs effets écotoxicologiques potentiels (Osuoha *et al.*, 2023). Les écrans solaires ou filtres ultraviolets (filtre-UV) sont principalement utilisés dans une grande variété de produits de soins personnels, tels que les rouges à lèvres, parfums, laques capillaires, teintures pour cheveux, hydratants, produits de soin de la peau, shampoings et cosmétiques (Lei *et al.*, 2015). Les écrans solaires sont largement utilisés pour protéger la peau contre les effets nocifs des rayonnements ultraviolets (UV), le vieillissement cutané prématuré et la survenue de cancers de la peau. Les formulations de filtres UV se divisent en deux grandes catégories : les filtres organiques de nature chimique et les filtres inorganiques à base minérale, les filtres-UV organiques incluent 4-méthylbenzylidene camphor (4-MBC), benzophenone-3 (BP-3), 2-ethylhexyl 4-methoxycinnamate (OMC), 2-ethylhexyl 4-diméthylaminobenzoate (OD-PABA), 3-benzylidene camphor (3BC), homosalate (HMS), and 4-aminobenzoic acid (PABA) (Lei *et al.*, 2015). Les filtres-UV peuvent pénétrer dans les milieux aquatiques de manière directe, notamment lors d'activités de loisirs telles que la baignade ou la natation, ou de manière indirecte, par le biais du lavage corporel, du rinçage des produits cosmétiques ou du lavage des vêtements. Certaines préoccupations environnementales majeures concernent le potentiel des filtres-UV à perturber le système endocrinien des organismes vivants. En effet, ces composés en raison de leur lipophilie élevée peuvent s'accumuler dans les tissus biologiques (bioaccumulation) ainsi que leurs métabolites et exercer une activité similaire à celle des œstrogènes naturels, agissant ainsi comme de véritables œstrogènes écologiques (Ghosh *et al.*, 2024). Les autres risques potentiellement associés à la présence des filtres-UV dans l'environnement demeurent encore largement méconnus et insuffisamment documentés dans la littérature scientifique (Vasilachi *et al.*, 2021).

1.2.3 Les stéroïdes

Les hormones naturelles et synthétiques ne sont souvent que partiellement dégradées lors des traitements classiques, ce qui conduit à leur rejet dans les effluents traités et à leur dispersion dans l'environnement (Vilela *et al.*, 2018). Cette catégorie de contaminants émergents (CE) inclut des stéroïdes endogènes naturels, tels que les hormones sexuelles androgènes comme l'androstènedione et la testostérone, les hormones sexuelles œstrogènes comme l'œstrone, l'œstriol et la progestérone, les

phytoœstrogènes, les indicateurs fécaux et les stérols végétaux, qui sont excrétés par le corps humain. Les androgènes synthétiques comprennent l'oxandrolone, la nandrolone, ainsi que les œstrogènes synthétiques (xénoœstrogènes) tels que le diéthylstilbestrol qui sont utilisés comme contraceptifs. Les stéroïdes et hormones naturels et synthétiques se retrouvent dans les affluents et les effluents des eaux usées sous forme de stéroïdes libres actifs, du fait de leur structure chimique et de leur activité hormonale, la majorité de ces composés sont reconnus comme perturbateurs endocriniens capables d'altérer le système hormonal des organismes aquatiques même à faibles concentrations (Stefanakis et Becker, 2016).

1.2.4 Les drogues illicites et les stimulants

Les drogues illicites et les stimulants détectés dans les eaux usées et l'eau potable, proviennent principalement de l'excrétion humaine après consommation. Après avoir été métabolisées dans l'organisme, des substances telles que la cocaïne, la méthamphétamine, la 3,4-méthylènedioxy-N-méthylamphétamine MDMA, la caféine ou la nicotine sont éliminées par l'urine ou les selles, puis acheminées vers les stations d'épuration via les réseaux d'assainissement. Or, certains de ces composés ou leurs métabolites présentent une résistance partielle aux traitements classiques des eaux usées, ce qui leur permet de persister dans les effluents traités. Ils peuvent ainsi se retrouver dans les milieux aquatiques récepteurs (rivières, lacs) et, dans certains cas, contaminer les ressources en eau potable (Falfushynska *et al.*, 2024). Les drogues illicites et leurs métabolites peuvent s'accumuler dans les tissus des poissons, même à de faibles concentrations dans les milieux aquatique ou les sédiments. Des études portés sur des mammifères et des sujets humains ont démontré que les drogues illicites provoquent des d'effets néfastes, notamment des troubles musculosquelettiques et neurologiques, ainsi que des perturbations immunitaires et endocriniennes, contribuant ainsi de manière substantielle à la diminution de la biodiversité (Falfushynska *et al.*, 2024).

1.2.5 Les pesticides

Les pesticides sont des composés chimiques utilisés pour éliminer les nuisibles notamment les insectes, les rongeurs, les champignons et les mauvaises herbes. Plus de 1000 pesticides différents sont utilisés dans le monde, les pesticides sont utilisés en santé publique pour tuer les vecteurs de maladies, tels que les moustiques et en agriculture pour tuer les parasites qui endommagent les cultures (World Health Organization, 2020).

L'usage des pesticides pour lutter contre les insectes et les ravageurs dans les zones agricoles constitue une pratique courante à l'échelle mondiale, bien qu'elle soit associée à des risques sanitaires importants pour l'être humain. Ces substances sont parfois appliquées directement sur les ressources en eau telles que les lacs, rivières, canaux, stations de traitement d'eau, cours d'eau ou petits réservoirs afin de contrôler la prolifération des moustiques, des micro-organismes nuisibles ou des plantes aquatiques envahissantes. Cependant, cette utilisation peut entraîner la contamination des sources d'eau potable, exposant ainsi les populations humaines et animales à des risques toxiques significatifs (Thacharodi *et al.*, 2023).

1.2.6 Les plastifiants

Les plastifiants sont des additifs chimiques principalement utilisés pour conférer souplesse, flexibilité et durabilité aux polymères, parmi les plastifiants les plus sollicités, les phtalates. Les phtalates sont des composés chimiques utilisés depuis plus de 80 ans, principalement dans l'industrie des plastiques. Bien que leur présence dans l'environnement soit largement documentée, ils n'étaient initialement pas considérés comme dangereux pour la santé humaine, en raison de données toxicologiques jugées peu préoccupantes. Cependant, certaines études ont révélé leur activité perturbatrice endocrinienne, leur impact sur le développement des organismes vivants ainsi que leur potentiel tératogène, tant chez l'humain que chez l'animal (Barcelo, 2012). Ces données ont conduit à leur reclassification en tant que contaminants émergents. Actuellement, plus de 3 millions de tonnes de phtalates sont produites chaque année à l'échelle mondiale (Vasilachi *et al.*, 2021).

Certaines études épidémiologiques ont mis en évidence des associations entre les monoesters de phtalates et divers paramètres spermatiques (tels que la morphologie, la concentration, la motilité ou l'intégrité de l'ADN des spermatozoïdes), ainsi qu'avec des perturbations hormonales. En particulier, des niveaux urinaires élevés de monométhyl phtalate (MMP), monobenzyle phtalate (MBzP), mono-n-butyle phtalate (MBP), mono(2-éthylhexyle) phtalate (MEHP) et mono-éthyle phtalate (MEP) ont été corrélés à une altération de la morphologie et de la vigueur des spermatozoïdes, ainsi qu'à une diminution de leur concentration, mobilité et linéarité. Cependant, malgré ces observations, aucune de ces associations n'a atteint un seuil de signification statistique suffisant, ce qui rend encore prématurée toute conclusion définitive quant à la toxicité des phtalates sur la reproduction humaine (Barcelo, 2012).

1.2.7 Les retardateurs de flammes

Les retardateurs de flamme constituent un groupe majeur de contaminants organiques émergents largement utilisés dans les environnements urbains. Ils sont présents dans divers produits, tels que thermostats, textiles, thermoplastiques, meubles et appareils électroniques, afin de réduire le risque d'incendie (Pal *et al.*, 2014). Ces derniers étant plus susceptibles de se libérer dans l'air, l'eau et les aliments, et de s'accumuler dans les organismes. Parmi eux, plus de 175 substances sont utilisées, dont les retardateurs bromés (TBBPA, HBCD, PBDE), les retardateurs azotés et phosphorés inorganiques. Les retardateurs bromés sont les plus couramment utilisés dans le monde en raison de leur efficacité et de leur faible coût, bien que leur usage soit réglementé en Europe et dans certains États américains. Ces composés persistent dans l'environnement, bioaccumulent, sont toxiques et peuvent se transporter sur de longues distances, affectant même des régions éloignées comme l'Arctique. Face à leurs effets toxiques avérés, notamment neurotoxiques et endocriniens, des alternatives telles que les retardateurs organophosphorés (OP) sont développés, mais ceux-ci présentent également des risques similaires. Ainsi, la présence croissante de ces substances émergentes dans l'environnement pose un défi majeur pour la santé humaine et la protection des écosystèmes (Pereira *et al.*, 2015).

1.2.8 Les métabolites et les produits de transformation

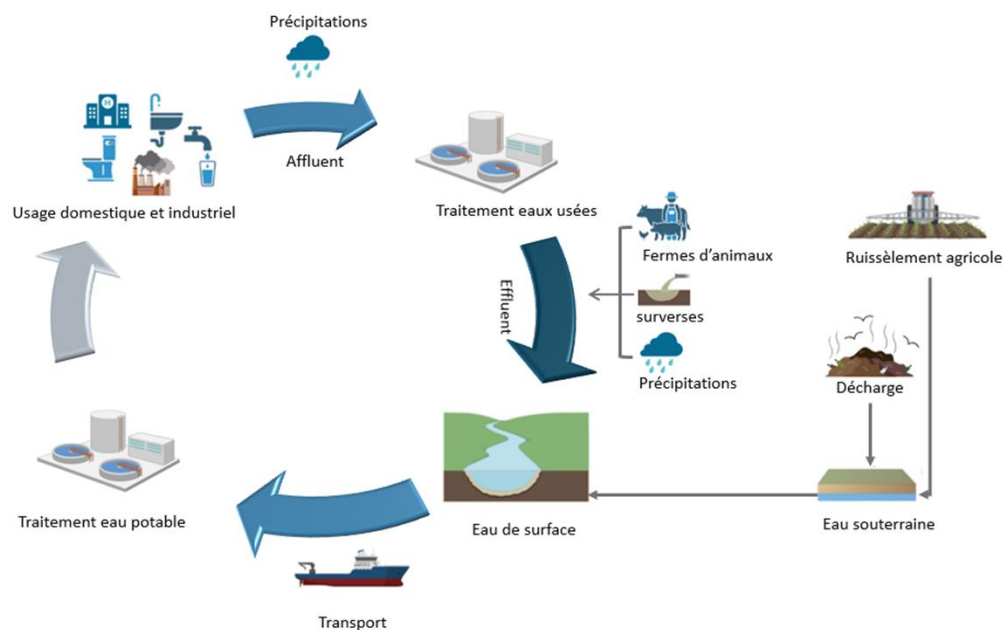
Certains contaminants émergents possèdent la capacité de subir des processus de métabolisation chez l'être humain et les animaux, ainsi que des transformations abiotiques ou biotiques dans l'environnement ou au cours des procédés de traitement des eaux usées. Ces processus peuvent conduire à la formation de métabolites ou de produits de transformation distincts, parfois dotés d'une toxicité propre ou accrue (Ghosh *et al.*, 2024). Des recherches menées par Bedner et MacCrehan ont mis en évidence que la structure chimique de l'acétaminophène (paracétamol) le rend particulièrement réactif avec le chlore, utilisé couramment dans les stations de traitement des eaux. En simulant les conditions de traitement avec de l'hypochlorite (un agent chlorant) dans de l'eau distillée et des eaux usées, les chercheurs ont observé la formation de 11 nouveaux composés en moins d'une heure, durée typique du contact entre les réactifs dans une station d'épuration. Parmi les sous-produits formés figurent 1,4-benzoquinone, un composé reconnu pour ses propriétés mutagènes ; *N*-acétyl-*p*-benzoquinone imine (NAPQI), un hépatotoxique bien connu, responsable des lésions hépatiques graves en cas de surdosage de paracétamol chez l'humain (Burton, 2006).

1.3 Sources et devenir des contaminants d'intérêt émergent

Les eaux usées représentent l'une des principales sources de contaminants émergents dans les milieux aquatiques (Lapworth *et al.*, 2012). Les contaminants émergents sont rejetés dans l'environnement et spécialement dans les écosystèmes aquatiques à travers les différentes activités humaines soient agriculture, transport, activités industrielles et l'utilisation des produits chimiques domestiques. L'eau de surface est disponible en grandes quantités dans, les fleuves, les rivières, les canaux et les lacs, la qualité de l'eau de surface varie considérablement en fonction des activités anthropiques situées en amont, des débits fluctuants ainsi que les caractéristiques d'écoulements changeantes (Houtman, 2010). La nature de la source influence directement les niveaux d'exposition ainsi que les caractéristiques des substances concernées. Les propriétés physico-chimiques telles que la solubilité dans l'eau, la polarité ou encore la volatilité ainsi que certains facteurs environnementaux comme la température, le pH, la présence de matière organique, les précipitations ou encore la localisation géographique (altitude, latitude), jouent un rôle essentiel dans les processus de transport et de transformation des contaminants émergents. Certains de ces contaminants présentent une grande solubilité dans l'eau, ce qui facilite leur dispersion dans les milieux aquatiques, notamment par ruissellement. La polarité d'un composé détermine sa répartition entre les phases organique et aqueuse (Stefanakis et Becker, 2016).

Les sources des contaminants émergents varient largement en termes de quantité et de caractéristiques, et sont généralement regroupées en sources ponctuelles et sources diffuses. La pollution par sources ponctuelles provient de sites spécifiques et localisés, où les apports dans les milieux aquatiques peuvent généralement être identifiés de manière précise sur le plan spatial, la pollution par sources ponctuelles inclut les déversements structurels qui influence en continu la qualité de l'eau telle que les effluents des stations de traitement des eaux usées industrielles et municipales qui sont considérées comme la principale source ponctuelle de pollution rejetée au niveau des sorties des stations d'épuration situées en zones urbaines, industrielles, ainsi que dans les zones agricoles (Houtman, 2010); (Lapworth *et al.*, 2012); (Stefanakis et Becker, 2016), en raison de leur forte solubilité, de leur faible volatilité et de leur faible capacité à se dégrader, les contaminants émergents peuvent traverser les différents processus de traitement des eaux sans être complètement éliminés par exemple, une grande variété de produits chimiques domestiques tels que les produits pharmaceutiques et les produits de soins personnels se retrouvent non seulement dans les eaux usées domestiques, mais aussi dans les eaux de surface, les eaux souterraines, et par conséquent dans l'eau potable (Morin-Crini *et al.*, 2022); (Stefanakis et Becker, 2016). Les activités d'extraction de ressources, les sites d'enfouissement de déchets, les usines de transformation

alimentaire sont aussi des exemples de déversement structurels, les déversements accidentels qui sont des événements imprévus qui peuvent affecter de manière importante la qualité de l'eau, bien que leurs effets soient généralement temporaires. Parmi les exemples courants, on trouve les accidents maritimes, les accidents industriels ainsi que les surverses causées par les débordements combinés des réseaux d'égouts et des eaux pluviales (Houtman, 2010); (Lapworth *et al.*, 2012); (Stefanakis et Becker, 2016). Les sources diffuses ou appelées aussi sources non ponctuelles, elles couvrent généralement de grandes étendues géographiques, ce qui complique grandement la localisation précise de la source exacte de ces polluants et se caractérise par une forte variation saisonnière, contrairement aux sources ponctuelles, les sources diffuses rejettent généralement des charges polluantes plus faibles dans l'environnement (Houtman, 2010); (Lapworth *et al.*, 2012). Les sources diffuses incluent le ruissellement agricole provenant des boues organiques et du fumier, les eaux pluviales, les ruissellements urbains, les fuites des réseaux d'assainissement urbains ainsi que la dépollution atmosphérique diffuse (Lapworth *et al.*, 2012).



1.4 Traitement et élimination des contaminants d'intérêt émergent

L'élimination efficace des contaminants émergents potentiellement toxiques que ce soit dans les eaux usées ou l'eau potable est une étape cruciale pour assurer une bonne qualité d'eau afin de préserver la santé humaine et les écosystèmes. L'élimination des CE présente un défi majeur pour les traitements conventionnels en raison de leur faible concentration allant de nanogramme par litre (ng/L) au microgramme par litre (µg/L), leur grande solubilité, leur faible volatilité, de leur persistance et de leur résistance à la dégradation ce qui leur permet de passer à travers les processus de traitement (Ghosh *et al.*, 2024); (Mahmood *et al.*, 2022). Pour pallier cette limitation, des avancées significatives ont été réalisées dans les technologies de traitement des eaux usées, intégrant une série de procédés innovants visant à améliorer la gestion des effluents et des boues d'épuration, afin de se conformer à des réglementations de plus en plus strictes en matière de rejets. Parmi ces technologies, on peut citer : les procédés d'oxydation avancée (POA), les zones humides artificielles (ZHA), l'adsorption sur charbon actif granulaire, les procédés d'hydrolyse, l'utilisation de zéolites ou d'autres matériaux argileux, les bioréacteurs à membranes, la chloration, ainsi que la filtration sur sable et autres médias filtrants (Mohapatra et Kirpalani, 2019).

1.4.1 Traitement des eaux municipales

Le traitement conventionnel des eaux usées est composé principalement de trois traitements, le traitement primaire, secondaire et tertiaire. Le traitement primaire comprend le traitement préliminaire et le processus de sédimentation. Le traitement préliminaire consiste principalement en un dégrillage, un dessableur et un bassin d'écémage pour l'élimination des grosses particules, des débris, les huiles et les graisses des eaux usées afin de protéger les équipements mécaniques et d'empêcher le colmatage des vannes dans les stations d'épurations. En suite les eaux usées sont soumises à une sédimentation ou à une précipitation chimique dans des bassins de décantation primaires ce qui permet d'éliminer les solides organiques, les particules colloïdales et les particules en suspension plus fines sous forme de boues. Le traitement secondaire ou biologique est utilisé pour éliminer les effluents organiques qui échappent au traitement primaire. Cette méthode de traitement des eaux usées se divise en deux groupes : la filtration et les boues activées. Différents filtres tels que les lits de contact, les filtres à sable irréguliers et les filtres à ruissellement sont utilisés dans ce traitement. Finalement, le traitement tertiaire également appelé méthode de traitement avancée c'est une étape facultative, cette étape élimine une quantité remarquable de phosphore, azote, de matières organiques biodégradables, de métaux lourds, de virus et de bactéries pathogènes, le traitement avancé peut également faire appel à des techniques de séparation physico-

chimique telles que l'adsorption sur charbon, la floculation/précipitation, les membranes pour la filtration avancée (ultrafiltration (UF), nanofiltration (NF)) l'échange d'ions et l'osmose inverse (RO), etc., ces méthodes ont démontré une grande efficacité dans l'élimination des CE. En revanche, elles sont très coûteuses (Gangaraju Gedda *et al.*, 2021). La désinfection des eaux usées peut être assurée par la chloration, l'ozonation ou le rayonnement UV. La chloration, couramment utilisée, élimine les micro-organismes en détruisant leur matériel cellulaire, mais le chlore résiduel, même à faible concentration, est toxique pour les écosystèmes aquatiques, ce qui rend souvent nécessaire une déchloration. L'ozonation, produite par l'exposition de l'oxygène à une haute tension, est très efficace contre les virus et bactéries, mais reste peu économique en raison de sa forte consommation énergétique. Le traitement par UV, quant à lui, altère l'ADN des micro-organismes sans laisser de résidus chimiques. Cependant, à faible dose, certains peuvent réparer les dommages subis, réduisant ainsi l'efficacité du procédé (US EPA, 2015).

Dans le cadre de ce projet, les échantillons d'affluents et d'effluents analysés ont été prélevés dans une station d'épuration des eaux usées de la grande région métropolitaine de Montréal, les principales étapes de traitement utilisées sont illustrées dans la Figure 1.2

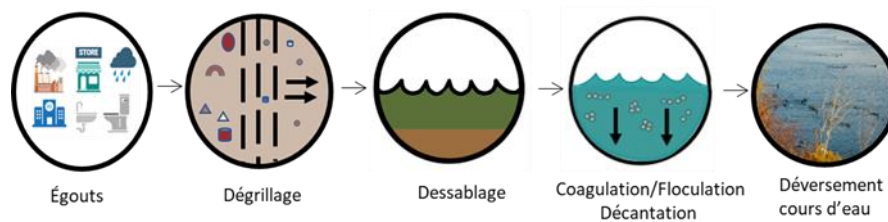


Figure 1.2 Principales étapes de traitement des eaux usées municipale

1.4.2 Traitement de l'eau potable

Le traitement conventionnel de l'eau potable est constitué principalement de la coagulation, floculation, décantation, filtration et désinfection. L'eau brute traitée est prise des eaux de surface ou des eaux souterraines, les prises d'eau ont des formes et des tailles variées, en fonction du type de source et de la topographie de la source d'eau (Nasier et Abdulrazzaq, 2021).

La coagulation et la floculation sont des processus fondamentaux et faciles qui sont largement utilisés dans les usines de traitement de l'eau potable. L'objectif est d'améliorer le processus d'élimination des matières

en suspension et des contaminants pendant l'étape de sédimentation en utilisant la gravité. Ce procédé consiste à neutraliser la charge des matières en suspension, à les déstabiliser et à les agglomérer. Ce procédé combine des réactions chimiques et physiques (Nasier et Abdulrazzaq, 2021), la coagulation/floculation est un processus facile à opérer et économique, plusieurs coagulants peuvent être utilisés tels que L'hydroxyde de calcium (Ca(OH)_2), sulfate ferrique ($\text{Fe}_2(\text{SO}_4)_3 \cdot 7\text{H}_2\text{O}$), sulfate d'aluminium ($\text{Al}_2(\text{SO}_4)_3 \cdot 18\text{H}_2\text{O}$), chlorure ferrique ($\text{FeCl}_3 \cdot 7\text{H}_2\text{O}$) et le sulfate d'aluminium ($\text{Al}_2(\text{SO}_4)_3$) (Mahmood *et al.*, 2022). La filtration est l'étape d'élimination des particules restantes du processus de sédimentation. La peut se faire sur sable ou charbon actif pour éliminer les particules fines, la matière organique dissoute et certains micro-contaminants (Nasier et Abdulrazzaq, 2021). La désinfection est une étape cruciale dans les stations de traitement d'eau potable, utilisée pour éliminer les agents pathogènes susceptibles de nuire à la santé humaine. Le chlore est le désinfectant le plus couramment utilisé dans ce processus, en raison de son coût abordable et de son efficacité reconnue.

Cependant, lorsque le chlore entre en réaction avec des composés organiques présents dans l'eau, il peut former des sous-produits de désinfection, dont certains sont toxiques pour l'homme et potentiellement cancérogènes. L'ozonation et les rayons ultraviolets (UV) sont aussi utilisés comme méthode de désinfection (Nasier et Abdulrazzaq, 2021). La figure 1.3 représente les principales étapes du traitement de l'eau potable des six usines de la grande région métropolitaine de Montréal ciblées dans ce projet.

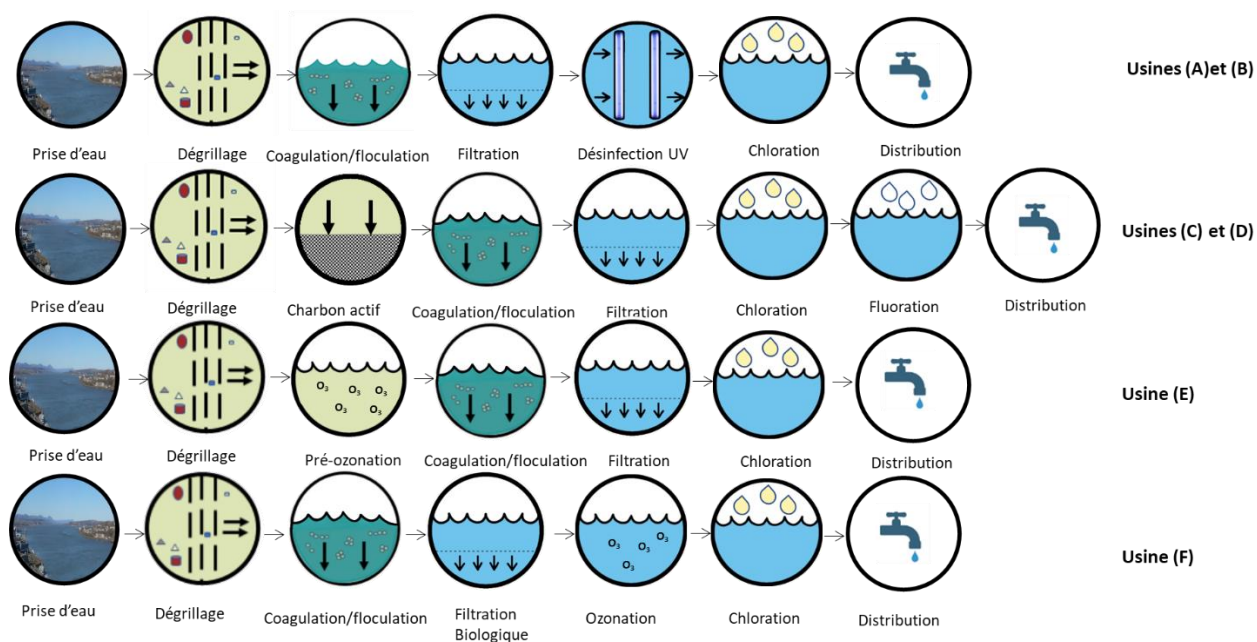


Figure 1.3 Étapes principales du traitement de l'eau potable des six usines

1.5 Réglementation des contaminants d'intérêt émergent dans les eaux usées et l'eau potable

La gestion des contaminants émergents dans les milieux aquatiques est un enjeu majeur pour la santé publique et l'environnement, reconnu par de nombreuses institutions à l'échelle internationale. Aux États-Unis, l'*Environmental Protection Agency (USEPA)* actualise régulièrement la liste des contaminants prioritaires dans le cadre du Clean Water Act. La *Contaminant Candidate List (CCL)* identifie des substances non réglementées, mais susceptibles d'être présentes dans l'eau potable. La dernière version, *CCL5 (2022)*, comprend 66 substances chimiques, 3 groupes chimiques (PFAS, cyanotoxines, DBPs) et 12 agents microbiens. Ces listes servent de base pour d'éventuelles réglementations futures sous le *Safe Drinking Water Act*. Un projet de nouvelle liste *CCL6*, est en cours de finalisation (Harish et Jegatheesan, 2025).

Dans l'Union européenne, la Directive-Cadre sur l'Eau (DCE) adoptée en 2000 constitue le fondement de la surveillance des substances prioritaires, liste 35 substances que les États membres doivent contrôler dans les eaux de surface, côtières et souterraines. L'article 7.3 de la directive encourage la réduction des traitements nécessaires pour produire de l'eau potable. Cette liste est régulièrement mise à jour en

fonction des données fournies par les États membres. Le Royaume-Uni, quant à lui, applique un plan national distinct et un programme d'investigation chimique (Harish et Jegatheesan, 2025).

La réglementation canadienne et québécoise relative à la qualité de l'eau encadre de manière rigoureuse l'eau potable, les eaux de surface et les eaux usées, en s'appuyant sur des normes visant à préserver la santé publique et à protéger les écosystèmes aquatiques. Santé Canada, en concertation avec les autorités provinciales et territoriales élabore des recommandations nationales qui établissent des concentrations maximales acceptables pour une variété de contaminants microbiologiques, chimiques et radiologiques. Bien que ces recommandations ne soient pas juridiquement contraignantes, elles constituent une référence normative à l'échelle du pays. Concernant les eaux usées, le Règlement sur les effluents des systèmes d'assainissement des eaux usées, adopté en vertu de la Loi sur les pêches, fixe des seuils minimaux de performance visant à limiter les rejets de substances nocives dans les milieux aquatiques. Au Québec, la protection des sources d'eau destinée à la consommation humaine est encadrée par le Règlement sur le prélèvement des eaux et leur protection, tandis que le Règlement sur les ouvrages municipaux d'assainissement impose des obligations précises en matière de traitement, de surveillance et de gestion des rejets. L'ensemble de ces dispositifs réglementaires permet la surveillance et le contrôle d'une vaste gamme de contaminants, selon la nature de l'eau, dans une perspective intégrée de gestion environnementale et de prévention des risques pour la santé (Canada, 2014).

En raison des coûts élevés associés à leur analyse en laboratoire, les substances toxiques et les contaminants émergents ne sont pas échantillonnés régulièrement à grande échelle. Leur surveillance est plutôt réalisée dans le cadre d'études ciblées, de durée limitée, portant sur des substances précises, des régions particulières ou des problématiques spécifiques. Depuis la fin des années 1980, environ 200 sites situés dans les cours d'eau du sud du Québec ont fait l'objet de prélèvements (MELCCFP, 2025b).

1.6 Analyse des contaminants d'intérêt émergent

Dans ce chapitre, le cadre théorique relatif au processus analytique des contaminants émergents sera détaillé. Après prélèvement, les échantillons subissent une extraction en phase solide (SPE) visant à isoler et concentrer les analytes d'intérêt à partir de matrices complexes. Cette étape permet d'éliminer les interférences tout en améliorant la sensibilité de l'analyse. Les analytes extraits sont ensuite séparés par chromatographie liquide haute performance (HPLC) et détectés à l'aide d'une spectrométrie de masse en

tandem (LC-MS/MS). Enfin, l'identification et la confirmation des contaminants d'intérêt émergent (CIE) sont réalisées grâce aux données spectrales obtenues.

1.6.1 Extraction en phase solide

Avant l'analyse par UHPLC-HRMS/MS, une étape d'extraction de l'échantillon est primordiale, une bonne préparation d'échantillons influe directement sur la limite de détection en améliorant la sensibilité, la répétabilité et la reproductibilité de l'analyse et améliore la performance analytique du système UHPLC-HRMS/MS (Humbert, 2010). Plusieurs méthodes d'extractions sont utilisées et le choix de ces méthodes dépend de la matrice de l'échantillon, des propriétés physico-chimiques des composés et de l'objectif de l'analyse.

Dans le cadre de cette étude, l'extraction en phase solide (SPE) a été choisie, cette méthode est basée sur le partage des composés entre une phase liquide qui est l'échantillon et une phase stationnaire qui est l'adsorbant (Humbert, 2010). Le processus de la SPE consiste en 4 étapes consécutives (Figure 1.4) soient le conditionnement de l'adsorbant en utilisant un solvant organique, cela permet l'activation des groupements fonctionnels de la phase stationnaire et l'élimination des contaminants suivi du chargement de l'échantillon qui est introduit dans la cartouche avec un débit approprié, dans cette étape, les analytes d'intérêts sont retenus tandis que les autres impuretés sont éluées ensuite un lavage avec un solvant qui a moins d'interaction avec les composés d'intérêt est réalisé ce qui permet l'élution des impuretés restantes. La dernière étape est l'élution des analytes de la phase stationnaire en utilisant un solvant qui a plus d'affinité aux analytes d'intérêts (Humbert, 2010).

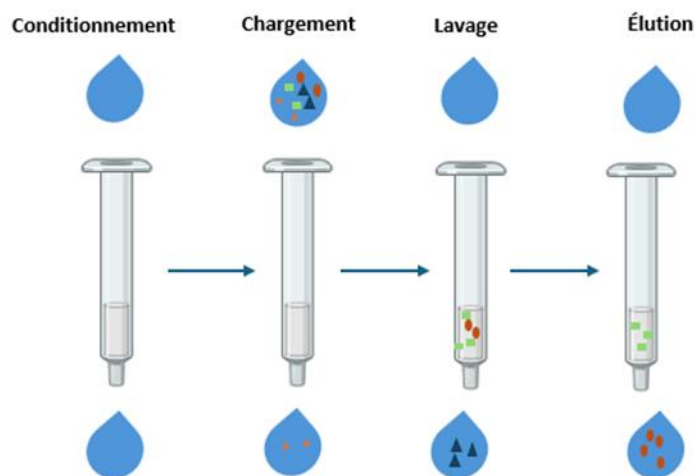


Figure 1.4 Étapes d'extraction en phase solide

Les cartouches d'extraction utilisées dans cette étude ont les phases C18, HLB, MCX et X-AW, comme indiqué à la figure 1.5. La cartouche C18 c'est une cartouche hydrophobe de chaîne de 18 atomes de carbones lié à une particule de silice qui retient les composés non-polaire et libère les analytes polaires. Le polymère HLB (*hydrophilic-lipophilic balanced*) ou le poly (*N*-vinylpyrrolidone-divinylbenzène) contient à la fois des régions apolaires (benzène et chaînes aliphatiques) et des régions polaires (pyrrolidone). Les cartouches HLB sont équipées d'un adsorbant polymérique universel en phase inverse conçue pour l'extraction efficace d'un large éventail de composés acides, basiques et neutres à partir de matrices variées et selon un protocole simple et standardisé. Grâce à sa mouillabilité à l'eau, l'adsorbant HLB conserve une capacité de rétention élevée et assure d'excellents taux de récupération, même en cas de dessèchement du lit adsorbant (Jeong et al., 2017).

La cartouche SPE polymères MCX a été développée pour pallier les limites des adsorbants mixtes classiques à base de silice utilisés en extraction en phase solide. Composée d'un polymère hydrophile à échange de cations forts, elle offre une excellente sélectivité et une grande sensibilité à l'égard des composés basiques. Son mécanisme de rétention repose sur une double interaction : l'échange ionique et l'interaction hydrophobe (mode inverse). Ce processus s'appuie sur un copolymère organique stable à haute surface spécifique qui reste efficace dans une large gamme de pH (de 0 à 14). La cartouche X-AW est conçue pour l'extraction de composés acides faibles, en particulier ceux ayant un pKa inférieur à 5.

Cette cartouche utilise un adsorbant polymère fonctionnalisé en échangeur d'anions faibles, permettant une rétention complète des composés acides dans des conditions de lavage 100 % organiques, assurant ainsi une élimination maximale des interférences.

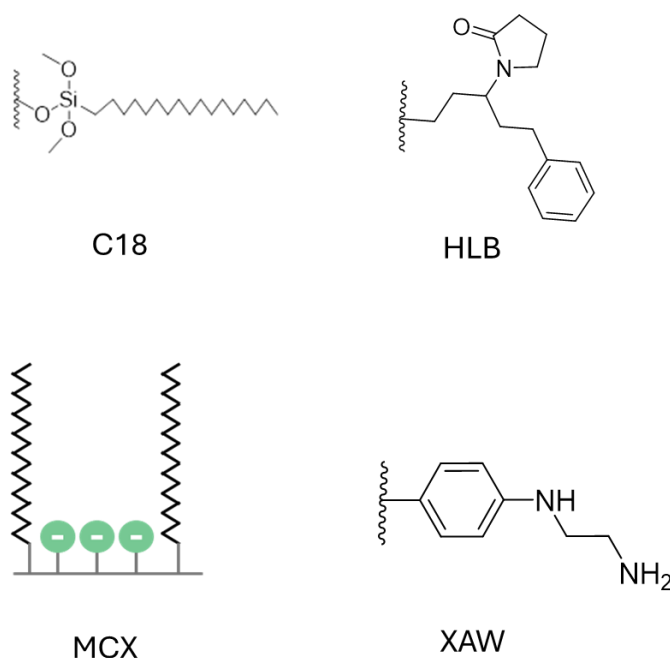


Figure 1.5 Phases stationnaires des cartouches d'extraction testées pour la préparation des eaux usées

1.6.2 Chromatographie liquide haute performance couplée à la spectrométrie de masse en tandem à haute résolution.

1.6.2.1 Chromatographie liquide haute performance

La chromatographie est une méthode de séparation des différents composés d'un mélange plus au moins complexe. Les deux techniques de séparation analytique les plus utilisées dans les analyses environnementales sont la chromatographie liquide (LC) et la chromatographie gazeuse (GC). La chromatographie gazeuse est limitée pour les composés volatile, semi-volatile et thermostable, 75% de tous les composés connus ne peuvent pas se séparer par GC sauf s'ils subissent une étape préalable de

dérivation (Snyder *et al.*, 2011). Par conséquent, la chromatographie liquide est la meilleure technique pour les composés volatile, non-volatile et hydrophile. Dans le cadre de cette étude des contaminants émergents qui sont de nature polaire peu volatile la Chromatographie liquide plus exactement la chromatographie liquide à ultra- haute performance a été utilisée.

La chromatographie à haute performance (HPLC) est une évolution de la chromatographie liquide, en appliquant une pression plus élevée et utilisant des particules plus petites ce qui permet une analyse plus rapide, plus efficace et plus sensible. Le principe de séparation est basé sur la partition des composés entre une phase mobile et une phase stationnaire, le choix de ces derniers est basé sur la polarité, la charge électrique et la taille moléculaire de l'échantillon. Dans le cadre de l'analyse des CE, la séparation est basée sur la polarité.

Le système UHPLC est constitué de deux réservoirs contenant deux phases mobiles différentes A et/ou B (Figure 1.6) qui sont reliés à un système de pompes qui fonctionne généralement de 8000 à 15000 psi pour contrôler le débit de la phase mobile (0.2 à 0.7 ml/min) et la pousser vers la colonne sans pulsations (Figure 1.6). Deux types d'élution pourrait être réalisées avec la phase mobile, une élution isocratique et un gradient d'élution, pour l'élution isocratique la composition de la phase mobile reste constante en revanche dans le gradient d'élution la composition de la phase mobile varie au cours de la séparation, cette méthode est utilisée généralement pour les analyses d'échantillons complexes ou des mélanges inconnus.

Le système d'injection qui est composé d'un circuit pour la phase mobile sous pression et d'un autre circuit pour l'échantillon à analyser, les deux circuits sont mis en contact grâce à une boucle (Figure 1.6) qui permet le transport du mélange vers la colonne. La colonne chromatographique contient la phase stationnaire qui permet la séparation des composés de l'échantillon, soit en mode chromatographique phase normal (phase mobile est apolaire et la phase stationnaire est polaire) ou en mode chromatographique phase inverse (phase mobile est polaire et phase stationnaire est apolaire) Aujourd'hui, en raison de sa reproductibilité accrue et de sa vaste applicabilité, la chromatographie en phase inverse est utilisée dans environ 75 % de toutes les méthodes HPLC (Waters, 2025). Le détecteur permet d'envoyer un signal sous forme de chromatogramme au passage des composés en temps réel, l'intensité du signal est corrélée à la quantité du composé détecté (Figure 1.6). Dans le contexte de cette étude le détecteur utilisé est le spectromètre de masse à haute résolution.

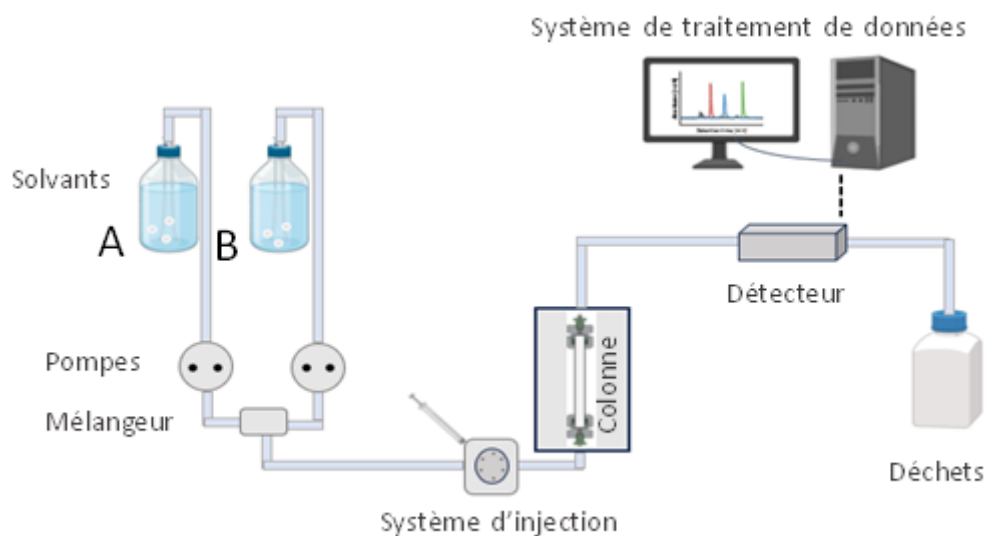


Figure 1.6 Schéma général d'un système de chromatographie liquide à haute performance

Dans le cadre de cette étude, les échantillons ont été séparés en mode phase inverse avec une colonne de *Biphenyl* type *core-shell* tandis que la phase mobile est constituée d'une phase aqueuse A (eau) et d'un solvant organique polaire B (Acétonitrile). Les particules *core-shell* sont conçues avec un noyau de silice solide et non poreux enveloppé d'une couche externe poreuse de groupements biphenyls (*Kinetex Core-Shell HPLC Columns Phenomenex*) (Figure 1.7). Cette structure permet un transfert de masse de l'analyte plus rapide entre la phase mobile et la phase stationnaire, car la diffusion se produit uniquement à travers la fine coque poreuse plutôt que la particule entière ce qui améliore l'efficacité de la séparation. Les interactions entre les composés polaire de la phase mobile et la colonne biphenyl apolaire sont faibles ce qui mène à l'élution des composés polaire en premier, en revanche les composés apolaires ont plus d'affinité avec la colonne apolaire par conséquent ils sont retenus et élués vers la fin de la séparation.

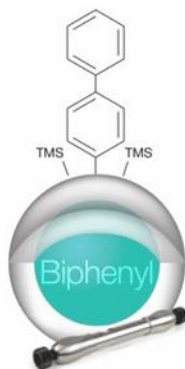


Figure 1.7 Représentation de la phase stationnaire de la colonne analytique Biphenyl type Core-Shell utilisé pour ce projet de recherche

1.6.2.2 Spectrométrie de masse à haute résolution

La spectrométrie de masse (MS) est une technique analytique puissante utilisée pour quantifier des substances connues, identifier des composés inconnus présents dans un échantillon, et pour élucider la structure et les propriétés chimiques de différentes molécules. La méthode est basée sur l'ionisation des composés dans le but de générer des molécules chargées, puis la séparation de ces derniers dans un analyseur de masse selon leurs rapport masse/charge (m/z) et enfin la détection et la quantification (Figure 1.11). Une identification analytique robuste requiert simultanément une haute résolution et une précision élevée du rapport masse/charge (m/z), afin d'optimiser la sélectivité analytique en minimisant les interférences liées au bruit de fond matriciel, et de permettre une détermination rigoureuse de la formule brute des composés inconnus sur la base de leur signature isotopique et fragmentation caractéristique (Krauss *et al.*, 2010). Parmi les technologies hybride de spectrométrie de masse en tandem, à haute résolution, on trouve les systèmes quadripôle-temps de vol (QqTOF) et piège ionique linéaire (Orbitrap) (Krauss *et al.*, 2010), ils fournissent des informations de haute qualité en combinant des données en spectre complet avec une haute résolution et précision de masse. L'ionisation par électro-spray (ESI) est de loin la plus commune dans l'analyse de biomolécules polaires et semi-polaires, incluant aussi les contaminants environnementaux (Krauss *et al.*, 2010). Cette ionisation douce permet l'analyse robuste et fiable pour l'étude de biomolécules non volatiles et thermolabiles.

Dans le cadre de cette étude, Une analyse non ciblée des contaminants émergents a été réalisée en utilisant un système de détection QqTOF avec une ionisation électro-nébulisation (ESI) en mode positive et négative. La figure 1.8 représente le schéma général d'un spectromètre de masse.

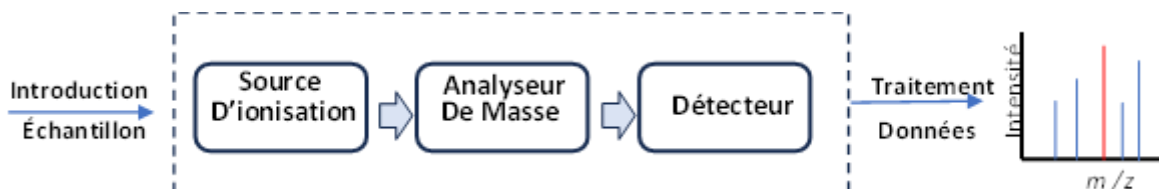


Figure 1.8 Schéma général d'un spectromètre de masse

1.6.2.2.1 Analyseur de masse quadripôle temps de vol (QqTOF)

L'analyseur de masse a pour rôle de séparer les ions formés dans la source d'ionisation en fonction de leur rapport masse/charge (m/z). Le pouvoir de résolution de masse (MRP), l'exactitude de masse, la sensibilité et la gamme de masse analysable sont les principales caractéristiques déterminant les performances d'un spectromètre de masse (Lai et Wang, 2023). L'exactitude de masse est la précision du rapport masse/charge (m/z) fourni par l'analyseur de masse, elle correspond à la différence observée entre la valeur théorique du m/z (m théorique) et la valeur m/z mesurée (m mesurée). Cette différence peut être le plus souvent exprimée en partie par million (ppm). La précision est étroitement liée à la stabilité et à la résolution de l'analyseur, un instrument à faible résolution ne peut pas fournir une précision de mesure élevée (de Hoffmann *et al.*, 2007). En spectrométrie de masse à haute résolution (HRMS), des spectres complets avec un pouvoir de résolution élevé sont acquis sur l'ensemble du chromatogramme. Le MRP reflète la capacité à séparer des pics de masse adjacents, il est défini par le rapport entre la masse (m) observée et la largeur du pic à 50 % de sa hauteur ($\Delta m_{50\%}$) ($\text{MRP} = m / \Delta m_{50\%}$), pour un analyseur de masse TOF le pouvoir de résolution est égal aussi au rapport du temps de vol total de l'ion (T) et 2x la largeur du pic spectral (Δt) ($\text{MRP} = T / 2\Delta t$) (Xian *et al.*, 2012). La résolution de masse quant à elle est définie comme la séparation minimale entre deux pics spectraux de même hauteur et même largeur, de sorte qu'une vallée détectable apparaisse entre eux (G Marshall *et al.*, 2013). Par conséquent, on considère qu'un analyseur de masse est à haute résolution lorsque son MRP est supérieur à 10 000 (Xian *et al.*, 2012). Dans le cadre de cette étude, l'instrument hybride utilisé est le QqTOF, combinant l'efficacité élevée de fragmentation des composés via la technologie quadripolaire avec la vitesse d'analyse rapide et à la haute résolution de

masse offerte par l'analyseur temps de vol (TOF) (Allen et McWhinney, 2019). Le premier quadripôle (Q1) fonctionne comme un filtre de masse, permettant la sélection d'ions parents spécifiques en fonction de leur rapport masse/charge (m/z), ou en mode radiofréquence seule (RF seulement) dans lequel tous les ions sont transmis à travers le quadripôle sans filtrage vers le deuxième quadripôle (q2). Le deuxième quadripôle (q2) agit comme une cellule de collision, où les ions sont bombardés par des molécules de gaz neutres (azote, argon, hélium), ce qui entraîne leur fragmentation en ions fils par un processus appelé dissociation induite par collision (CID : *collision induced dissociation*). Le (q2) peut également fonctionner en mode radiofréquence seule (RF seulement), sans provoquer la fragmentation des ions (Allen et McWhinney, 2019). Après avoir quitté la cellule de collision, les ions sont réaccélérés et dirigés vers le modulateur d'ions de l'analyseur TOF. Au départ, la région du modulateur est exempte de champ, de sorte que les ions continuent à se déplacer dans leur direction initiale. Un champ électrique pulsé est appliqué à travers l'espace du modulateur, poussant les ions dans une direction orthogonale à leur trajectoire initiale dans la colonne d'accélération, où ils acquièrent leur énergie finale (Chernushevich *et al.*, 2001), ces ions pénètrent ensuite dans le tube de vol, une région de dérive sans champ électrique, où se produit la séparation des ions selon leur masse, les ions de masse plus faible auront un temps de vol plus court, tandis que les ions plus lourds mettront plus de temps pour atteindre le détecteur (Allen et McWhinney, 2019). Dans le but d'augmenter le pouvoir de résolution, un système de réflectron est intégré après la zone de dérive, ce miroir ionique permet de compenser la dispersion de l'énergie cinétique et spatiale des ions avec le même rapport m/z (Chernushevich *et al.*, 2001) (Figure 1.9).

L'analyseur de masse par temps de vol est particulièrement appréciée grâce à sa résolution de masse relativement élevée >40000 (FWHM) avec une précision de masse inférieure à 5 ppm, sa gamme de masse théoriquement illimitée, permettant l'analyse de masses très élevées ainsi que sa grande compatibilité avec d'autres techniques et finalement la simplicité de sa conception et son montage (Boesl, 2017).

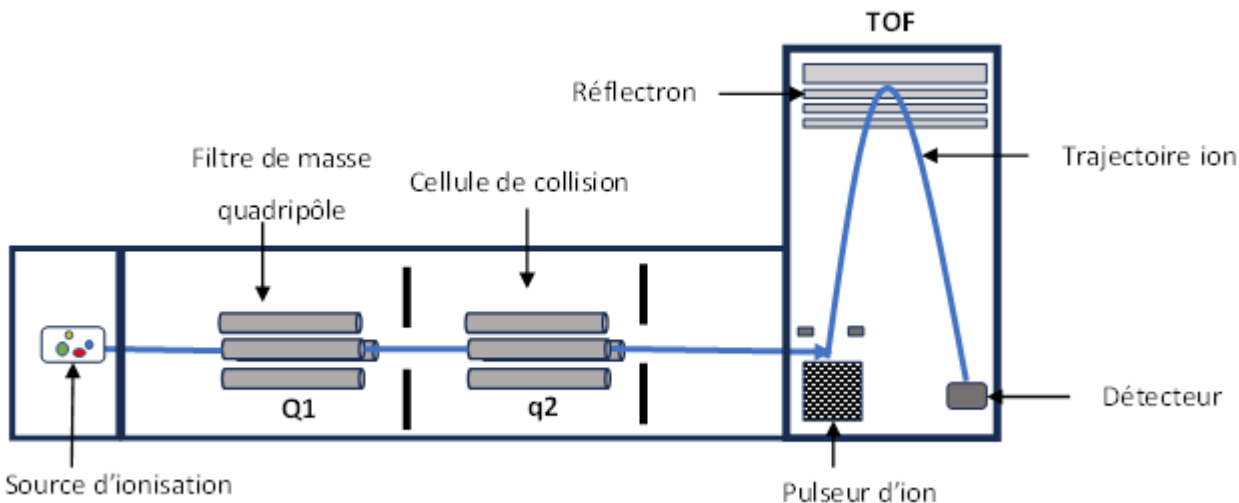


Figure 1.9 Schéma de l'analyseur de masse quadripôle temps de vol (QqTOF)

1.6.2.2.2 Acquisition de données

En spectrométrie de masse deux modes d'acquisition de données en analyse non ciblées sont couramment utilisés : l'acquisition dépendante des données (DDA) et l'acquisition indépendante des données (DIA), dans cette étude la DIA a été utilisée. La DIA repose sur la fragmentation des ions précurseurs sélectionnés lors de l'analyse du Q1 (Figure 1.10). Cette approche non ciblée garantit une couverture complète des composés présents dans l'échantillon, offrant ainsi une collecte étendue et non biaisée des données MS₂, cette stratégie entraîne toutefois une augmentation considérable du volume de données générées. Face à cet afflux massif d'informations, les laboratoires doivent adapter leur infrastructure en prévoyant des capacités de stockage accrues, en renforçant les performances des équipements informatiques, et en mettant en place des protocoles rigoureux d'archivage et de gestion des données. Une telle organisation est essentielle pour assurer la traçabilité, la reproductibilité des résultats, et le respect des bonnes pratiques en matière de gouvernance des données scientifiques (Allen et McWhinney, 2019).

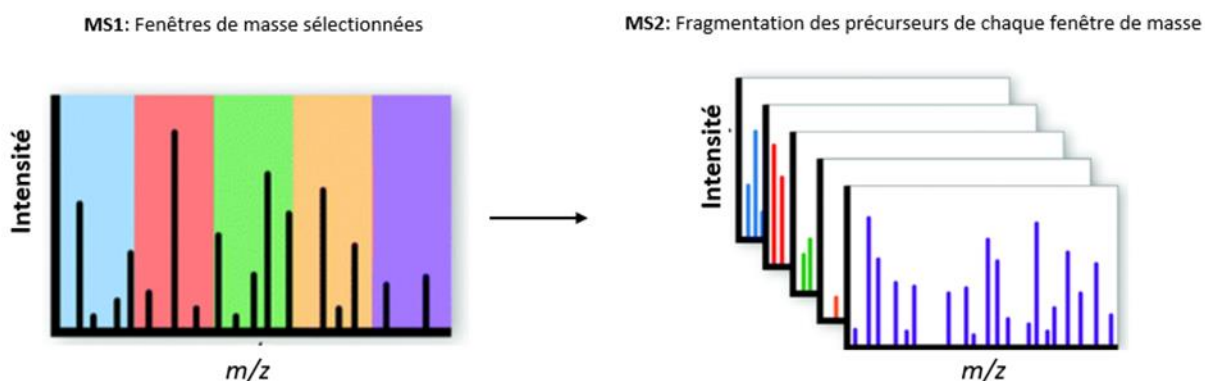


Figure 1.10 Aperçu de l'acquisition indépendante des données (DIA))

1.7 Objectif de l'étude

Dans le cadre de cette étude, une analyse approfondie et non ciblée des contaminants émergents présents dans les eaux usées et l'eau potable de la région métropolitaine de Montréal a été menée à l'aide de la chromatographie liquide à haute performance couplée à la spectrométrie de masse haute résolution en tandem (LC-HRMS/MS) de type quadripôle-temps de vol (LC-QqTOF). Les prélèvements ont été réalisés sur plusieurs mois afin de mieux appréhender la variabilité temporelle des contaminants. Des échantillons d'affluents et d'effluents d'eaux usées ont été collectés de février à septembre 2022 tandis que des échantillons d'eau potable ont été prélevés entre février et juin 2023 avant et après traitement dans six usines utilisant des procédés de traitement plus au moins variés. Tous les échantillons ont d'abord subi une extraction en phase solide (SPE) afin de concentrer les composés d'intérêt et d'éliminer les interférences de matrice. Quatre types de cartouches SPE aux propriétés distinctes ont été utilisées pour permettre une large couverture analytique. L'analyse a ensuite été réalisée en mode non ciblée par (LC-HRMS/MS). Trois méthodes différentes ont été appliquées variant les conditions de la phase mobile et le mode d'ionisation comme suit : phase mobile acide en ionisation positive et négative, ainsi qu'une phase mobile neutre en ionisation négative.

Les objectifs de cette étude s'articulent autour de plusieurs axes complémentaires visant à évaluer la présence et la variation des contaminants émergents dans les matrices d'eaux usées et potables. Le premier objectif consiste à caractériser la diversité des contaminants détectés, dans les eaux usées, en

fonction de l'utilisation de différents adsorbants lors de la préparation des échantillons par SPE. Une comparaison des résultats obtenus a par la suite aidé à identifier les cartouches SPE offrant la meilleure couverture analytique pour des analyses non ciblées de contaminants variés. Le second objectif vise à évaluer la complémentarité des méthodes employées, en particulier la composition de la phase mobile et les modes d'ionisation, sur la détection des contaminants. Un troisième volet de l'étude porte sur l'évaluation de la variation temporelle des contaminants dans les eaux usées et l'eau potable. Ce suivi longitudinal permettra d'identifier d'éventuelles tendances saisonnières, variations de charge ou épisodes de contamination ponctuelle reflétant des changements d'origine anthropique ou environnementale.

En parallèle, une comparaison entre les échantillons en amont et en aval d'un traitement tant pour les eaux usées que pour l'eau potable permettra d'estimer l'efficacité des traitements appliqués dans les différentes installations. L'objectif est de déterminer l'impact des procédés de traitements sur la rétention ou la transformation des contaminants. Enfin, une analyse comparative entre les usines de production de l'eau potable a été menée afin d'évaluer l'influence des sources de contamination (d'alimentation) et des technologies de traitement sur les profils de contamination détectés.

Le chapitre 2 est consacré à la description de l'ensemble des protocoles analytiques appliqués depuis le prélèvement des échantillons jusqu'au traitement de données suivant l'analyse non ciblée des contaminants émergents par LC-HRMS/MS. Le chapitre 3 présente les résultats d'eaux usées, et en analysant la variation temporelle des contaminants détectés. Une attention particulière est portée à l'évaluation de la performance des différentes cartouches d'extraction et des méthodes analytiques utilisées en fonction des types de composés détectés. Le chapitre 4 est dédié à l'étude d'eau potable prélevé en amont et en aval du traitement dans six usines de la grande région métropolitaine de Montréal. Enfin, le mémoire se conclut par une synthèse générale mettant en perspective l'ensemble des résultats obtenus. La conclusion discute des implications de choix méthodologiques sur la couverture analytique des contaminants, l'efficacité des traitements étudiés, ainsi que les différences observées entre les différentes usines. Elle propose également des perspectives pour des futures études.

CHAPITRE 2

MÉTHODOLOGIE

2.1 Matériels et méthode

2.1.1 Produits chimiques

Les produits chimiques utilisés dans l'analyse des contaminants émergents sont l'acide formique (FA), méthanol (MeOH), acétate d'ammonium ($\text{NH}_4\text{CH}_3\text{CO}_2$), hydroxyde ammonium (NH_4OH), acétonitrile (ACN) grade HPLC sont achetés de Sigma-Aldrich, Eau ultrapure (H_2O) vient de Millipore Synergy UV system (Billerica, MA, USA).

2.1.2 Prélèvement des échantillons

Les prélèvements ont été recueillis dans des flacons stériles de 250 ml en polyéthylène téréphtalate (PET), contenant 160 mg/L de thiosulfate de sodium. De février 2022 à septembre 2022, un total de 32 échantillons ont été prélevés à une des stations d'épuration des eaux usées de la région métropolitaine de Montréal, à une fréquence de deux échantillons par mois. Parmi ces échantillons, 16 provenaient des affluents, échantillons bruts qui n'ont pas subi de traitement et 16 des effluents, échantillons bruts après traitement. La station d'épuration des eaux usées reçoit et traite l'ensemble des eaux usées municipales provenant des résidences, des commerces, de l'industrie et des eaux pluviales. Le traitement des eaux comprend les étapes de criblage, d'élimination du sable, de coagulation et de floculation.

De février 2023 à juin 2023, 60 échantillons ont été collectés auprès de six usines de production d'eau potable (A, B, C, D, E, F) situées dans la région métropolitaine de Montréal, à raison d'un échantillon par mois. Ces échantillons comprenaient 30 prélèvements d'eau brute avant traitement et 30 prélèvements d'eau potable après traitement. Les usines A, B, C, D et E prélèvent leur eau brute dans le fleuve Saint-Laurent, au niveau du lac Saint-Louis. Ce lac reçoit les eaux de deux principales sources : le fleuve Saint-Laurent, alimenté par les Grands Lacs, et la rivière des Outaouais, via le lac des Deux-Montagnes. La rivière des Outaouais est un affluent majeur du fleuve Saint-Laurent, qui prend sa source dans les Grands Lacs et

traverse la région de l'Outaouais avant de se jeter dans le Saint-Laurent. L'usine F quant à elle, prélève son eau brute dans la rivière des Prairies, située en aval du lac des Deux-Montagnes. Cette rivière est un affluent du fleuve Saint-Laurent qui prend sa source dans le lac des Deux-Montagnes et se jette dans le Saint-Laurent. Ces usines de production d'eau potable assurent l'approvisionnement en eau potable pour une grande partie de la population de la région métropolitaine de Montréal.

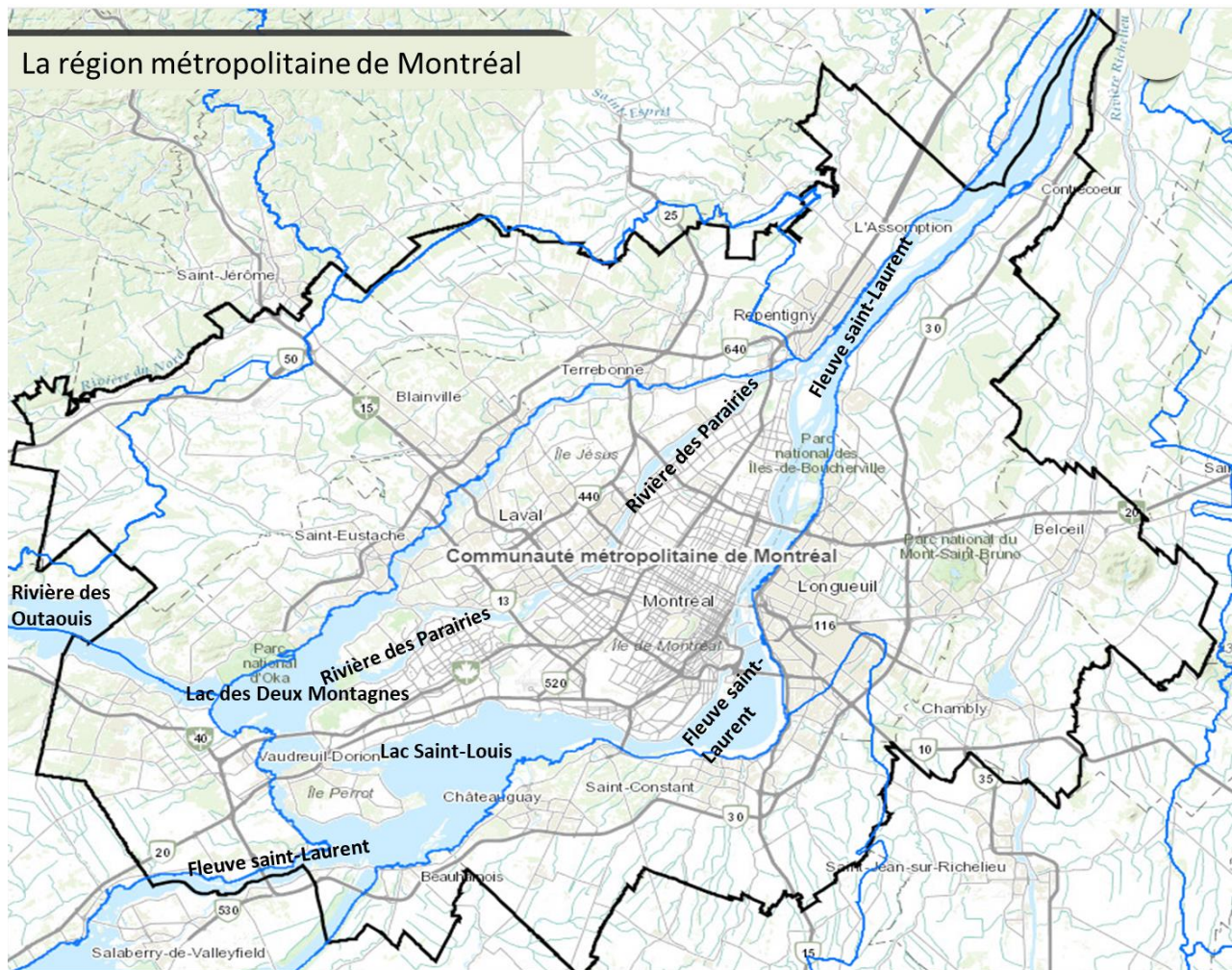


Figure 2.1 La carte de la grande région métropolitaine de Montréal inspirée de (MELCCFP, 2025a)

2.1.3 Préparation des échantillons

Les échantillons d'eaux usées et d'eau potable ont été prélevés avant et après traitement dans des flacons de 250 ml stériles en polyéthylène téréphtalate (PET), contenant 160 mg/L de thiosulfate de sodium achetés chez Fisher Scientific. Cette procédure vise à neutraliser efficacement le chlore résiduel présent dans les échantillons, garantissant ainsi que les analyses microbiologiques reflètent fidèlement la qualité de l'eau au moment de la collecte. Les échantillons ont été transportés dans des glacières à 4°C. Ils étaient stockés à plus long terme dans un congélateur à -30°C. L'extraction en phase solide des analytes a été effectuée avec un collecteur sous vide et en utilisant quatre types différentes de cartouches SPE. Les cartouches *Bond Elut C18* utilisées étaient d'Agilent Technologies avec une phase inverse hydrophobe d'adsorbant de 200 mg qui retiennent les composés apolaires ou modérément polaires. Les cartouches Oasis HLB (*Waters Limited*) avec une phase polymère hydrophile-lipophile équilibrée de 60 mg (1 cc), permettent l'extraction d'une large gamme de composés, y compris les acides, les bases, les neutres et les composés polaires. Les cartouches OASIS MCX (*Waters Limited*) utilisées ont eu une phase polymère à échangeur mixte (cationique et hydrophobe) et un adsorbant de 30 mg (1 cc) conçues pour la rétention sélective des composés basiques. Les cartouches Strata-X-AW (33 µm *Polymeric Weak Anion*, 60 mg 1cc) ont été utilisées pour l'extraction efficace de composés plus acides combinant aussi des interactions hydrophobes, des liaisons π - π et un échange d'anions faible. Les cartouches ont été conditionnées avec le chargement de l'échantillon, suivi par un lavage de la cartouche et finalement l'élution de l'extrait qui a été séché sous vide dans un *SpeedVac* (UVS800DDA-115, ThermoFisher, Asheville, NC, USA). Le protocole détaillé de l'extraction SPE est illustré dans le tableau 2.1. L'extrait sec a été reconstitué avec 200 µL de 25% MeOH dans de l'eau ultrapure. Il est essentiel de s'assurer que l'extrait est complètement dissous et homogène avant l'injection.

Tableau 2.1 Protocole de l'extraction en phase solide des échantillons d'eaux usée et de l'eau potable

	C18	HLB	MCX	STRATA-X-AW
Conditionnement	2 ml MeOH 2 ml H ₂ O	2 ml MeOH 2 ml H ₂ O	2 ml MeOH 2 ml 1% FA, H ₂ O	2 ml MeOH 2 ml H ₂ O
Chargement	5 ml échantillons d'eau usée/ 100 ml eau potable			
Lavage 1	2 ml H ₂ O	2 ml H ₂ O	1 ml 1% FA, H ₂ O	1ml 25 mM acétate d'ammonium
Lavage 2				1 ml MeOH
Élution 1	1 ml MeOH	1 ml MeOH	1 ml MeOH, 1% FA	1 ml MeOH, 5% NH ₄ OH
Élution 2			1 ml MeOH, 5% NH ₄ OH	

2.1.4 Analyse LC-HRMS/MS

Un système UHPLC Nexera® (Shimadzu, Columbia, MD, USA) couplé à un spectromètre de masse quadripôle à temps de vol (QqTOF) TripleTOF® 5600+ (AB Sciex, Concord, ON, Canada), équipé d'une source DuoSpray™ permettant l'ionisation par électrospray positif et négatif, a été utilisé pour l'analyse des échantillons. Pour la séparation des analytes, une colonne Kinetex Biphenyl (100 × 2,1 mm, 2,6 µm, Phenomenex) a été utilisée avec un débit de 0,25 ml/min à une température de 40 °C. En utilisant un gradient d'élution (Figure 2.2) avec deux phases mobiles, les échantillons ont subi trois méthodes (Tableau 2.2) en changeant la polarité d'ionisation ou la phase mobile aqueuse, comme indiqué dans le Tableau ci-dessous. La phase mobile organique était de l'acétonitrile de grade HPLC, avec l'ajout de 0.1% d'acide formique pour les méthodes avec phase mobile acide, et sans ajout pour la méthode avec la phase mobile aqueuse ayant de l'acétate d'ammonium. Le gradient HPLC (Figure 2.2) a débuté à 5 % de B, maintenu pendant 0,25 min, suivi d'un gradient de 5 à 50 % de B en 10 min, atteignant 95 % de B à 13 min, et maintenu jusqu'à 15 min (Figure 2.2), suivi d'un temps de rééquilibration de la colonne avant la prochaine injection.

Tableau 2.2 Trois méthodes utilisant la colonne biphenyl pour l'analyse des contaminants dans les échantillons d'eau

		Méthodes 1 et 2		Méthode 3
Phase aqueuse	mobile	0.1% acide formique, H ₂ O		5mM d'acétate d'ammonium, H ₂ O
Polarité d'ionisation		Positive		Négative

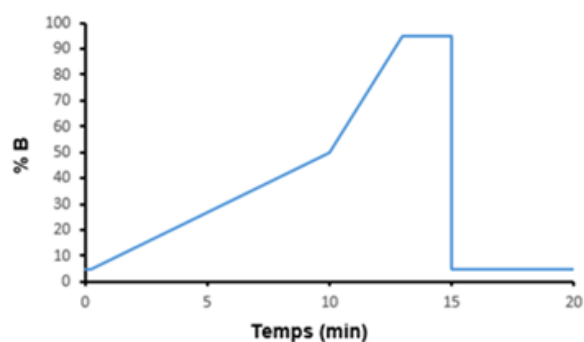


Figure 2.2 Gradient d'élution utilisé pour la séparation chromatographique des échantillons d'eaux extraits par SPE. La composition de la phase mobile organique (acétonitrile, avec ou sans acide formique 0.1%)

Ces trois méthodes ont été utilisées pour leur complémentarité pour permettre la séparation des contaminants dans les matrices d'eaux usées et d'eaux potables. Les paramètres de la source d'ionisation comprenaient une tension d'ionisation de 5 000 V, un gaz de rideau de 35 psi, des gaz de séchage et de nébulisation de 50 psi, une température de source de 500 °C et un potentiel DP (*declustering*) de 80 V. L'instrument a effectué une acquisition de spectrométrie de masse en mode TOF-MS (*Time-of-Flight Mass Spectrometry*) sur une plage de m/z 120 à 925, avec un temps d'accumulation de 250 ms. Cette acquisition a été suivie d'une analyse MS/MS (spectrométrie de masse en tandem) sur les huit ions les plus intenses dans la plage de m/z 40 à 700, à une énergie de collision de 30+/-10V.

2.1.5 Traitement de données

Le traitement de données commence par l'étape de la détection des pics (par leur m/z et temps de rétention), suivi par l'identification des analytes par leur masse exacte (et donc leur formule chimique) et la recherche des spectres MS/MS acquis à l'aide de bases de données spectrales à haute résolution. Les

données brutes LC-MS ont été traitées par le logiciel Markerview™ 1.3.1 (Sciex, Concord, ON, Canada) pour produire une liste de pics avec selon certaines caractéristiques (temps de rétention (t_r), masse exacte (m/z), intensité (cps)) été généré directement à partir des fichiers de données brutes (.wiff) avec un décalage de soustraction du bruit de fond (*background subtraction offset*) de 10 scans, largeur minimale de pic spectrale de 5 ppm, largeur minimale de pic RT : 5 scans, seuil de bruit de 5. Les critères pour les pics chromatographiques utilisées étaient une tolérance au temps de rétention et masse de 0,20 min et 15 ppm, respectivement, ainsi qu'un seuil d'intensité de 5000 cps. Une méthode de recherche a été par la suite créé dans le logiciel SCIEX OS-Q 2.0.1, utilisant les paramètres de recherche. La bibliothèque de recherche contient les bibliothèques NIST 2017 MS/MS (13808 composés), *The Sciex "all-in-one" accurate mass metabolite* (650 métabolites) et la bibliothèque interne personnalisée contenant 194 spectres de référence acquis dans des conditions MS/MS identiques. Seules les entités présentant un score de correspondance avec la bibliothèque de 85 ou plus et une précision de masse du précurseur dans une marge de ± 10 ppm (pour les ions $[M+H]^+$ ou $[M-H]^-$) ont été retenues pour l'analyse ultérieure. L'intégration des aires des pics d'intérêts a été réalisée à l'aide du logiciel quantitatif de MultiQuant 2.0.1. L'analyse statistique de ces pics quantifiés a été effectuée avec le logiciel Markerview™ 1.3.1 et le logiciel MetaboAnalyst version 6.0 (Figure 2.3).

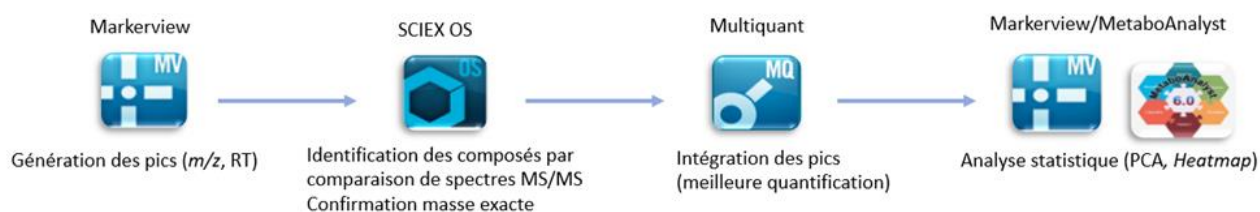


Figure 2.3 Les logiciels et étapes utilisées lors du traitement de données

CHAPITRE 3

RÉSULTATS DES ANALYSES NON CIBLÉES D'ÉCHANTILLONS D'EAUX USÉES

Dans le cadre de ce travail, une série d'expériences a été menée afin d'identifier et de comparer la présence de contaminants émergents dans les eaux usées. La surveillance de la qualité de l'eau est essentielle pour la santé publique et la sécurité environnementale puisque l'eau joue un rôle vital dans les écosystèmes et la sécurité sanitaire. Les contaminants émergents, tels que les différents produits pharmaceutiques, les produits de soins personnels et les produits chimiques industriels, suscitent de plus en plus d'inquiétudes en raison de leur persistance dans les sources d'eau et de leurs effets potentiels à long terme sur la santé et l'environnement.

Dans ce chapitre, des eaux usées provenant d'une station d'épuration située dans la grande région de Montréal, dont les effluents traités sont rejetés dans le fleuve Saint-Laurent, ont été collectées toutes les deux semaines sur une période de huit mois, de février à septembre 2022. Une étape préliminaire a été réalisée sur une portion des échantillons afin d'évaluer différents protocoles d'extraction en phase solide (SPE), dans le but de déterminer quels contaminants pouvaient être détectés par chromatographie liquide à haute performance couplée à la spectrométrie de masse en tandem à haute résolution (LC-HRMS/MS) dans ces échantillons. Sur la base des profils analytiques obtenus, deux cartouches SPE ont été retenues comme les plus performantes et complémentaires, suivant de l'analyse de tous les échantillons issus de ces deux cartouches. Les résultats de ces analyses sont présentés et discutés dans ce chapitre, avec l'objectif principal de caractériser la diversité des contaminants détectés dans les eaux usées en fonction de plusieurs paramètres : le type d'adsorbant utilisé lors de la préparation des échantillons par SPE, la complémentarité des méthodes analytiques appliquées notamment la composition de la phase mobile et les modes d'ionisation ainsi que la variation temporelle de certains contaminants au cours de la période d'étude.

3.1 Comparaison d'extraction de contaminants à l'aide de cartouches d'extraction différentes

Les échantillons des effluents des eaux usées prélevés à la sortie de la station d'épuration, durant la période de mai à juillet 2022 ont tout d'abord été utilisés afin d'évaluer plusieurs protocoles d'extraction en phase solide des différents contaminants. Les quatre cartouches d'extraction en phase solide ayant été évalué sont la Bond Elut-C18, OASIS HLB, OASIS MCX et Strata-X-AW. Les extraits ont ensuite été analysés par LC-HRMS/MS en utilisant trois méthodes analytiques, avec l'ionisation en mode positif et négatif avec une phase mobile acide (FA (+) et FA (-), respectivement), et une deuxième analyse en mode négatif en changeant la phase mobile à un pH neutre à l'aide de l'acétate d'ammonium (AmAc (-)). L'identification des composés présents dans les échantillons repose sur une approche qualitative combinant la mesure de la masse exacte de l'ion précurseur et l'analyse des spectres MS/MS à haute résolution. La masse exacte permet de proposer une formule chimique probable, tandis que la comparaison des spectres MS/MS avec ceux contenus dans des bases de données spectrales facilite l'attribution putative des contaminants. Ces identifications restent putatives en l'absence de standards analytiques confirmatoires. Par la suite, l'information quantitative est obtenue en intégrant les pics chromatographiques correspondant à chaque composé identifié. Cette intégration s'effectue en extrayant la masse exacte de la molécule protonée $[M+H]^+$ en mode positif ou déprotonée $[M-H]^-$ en mode négatif, selon les conditions d'acquisition, permettant ainsi d'évaluer les niveaux relatifs des contaminants dans les échantillons.

Plusieurs tableaux figurent en annexe 1, présentant les composés détectés dans les échantillons d'effluents, ainsi que les aires de pics moyennes et les pourcentages de variation relative observés au cours des différents prélèvements., et ce pour chacune des trois méthodes LC-HRMS/MS. Les identifications des contaminants sont basées sur la recherche de spectres MS/MS dans des bases de données spectrales. En utilisant les aires moyennes des pics chromatographiques de chaque composé d'intérêt dans les échantillons d'effluents, les cartes thermiques ci-dessous (Figure 3.1) ont été construites.

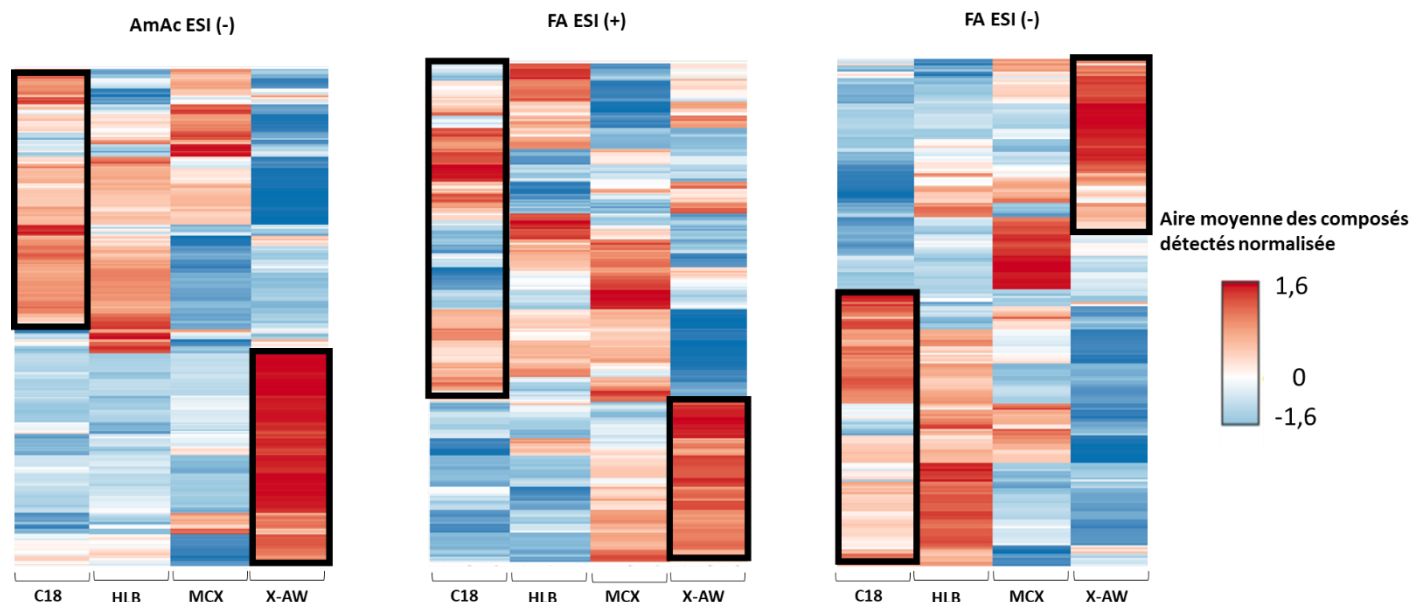


Figure 3.1 Cartes thermiques pour illustrer les abondances relatives des composés détectés durant la période de mai à juillet 2022 (listés en annexe 1) dans les eaux usées selon le type de cartouche SPE utilisé et méthodes analytiques. Ces cartes thermiques ont été produites à l'aide du logiciel MetaboAnalyst 6.0

Cette approche a permis d'évaluer l'influence du type de cartouche et des méthodes analytiques sur le profil des composés détectés. L'intensité des signaux, représentée par un dégradé de couleurs allant du bleu (faible abondance) au rouge (forte abondance), permet de visualiser rapidement les différences de sélectivité et de performance d'extraction entre les combinaisons cartouches et conditions analytiques. Une discrimination nette entre les profils d'extraction est observable selon le type de cartouche, ce qui reflète la sélectivité propre à chacune.

Les cartouches C18 et HLB présentent un grand nombre de signaux communs, avec des zones de forte intensité propres à chacune, notamment dans certaines conditions analytiques. Ces résultats confirment que ces deux cartouches sont polyvalentes, capables d'extraire un large éventail de composés. Cependant, la carte ne montre pas que C18 soit clairement plus efficace que HLB lorsqu'on observe l'abondance globale des différents composés. En revanche, la cartouche X-AW présente un profil distinct, avec des groupes de signaux bien séparés et intenses, dans les trois conditions analytiques. En effet, cette cartouche utilise un adsorbant échangeur d'anions faibles, ce qui favorise la rétention sélective des composés acides, et donc une extraction plus ciblée. Quant à la cartouche MCX, elle est plutôt composée d'un adsorbant

échangeur de cations, ce qui est efficace pour l'extraction des composés basiques. Cette cartouche montre plutôt un profil moins riche en signaux et plus dispersé notamment pour les deux méthodes en mode négatif ce qui peut refléter soit une sélectivité étroite, soit une faible concentration de composés basiques dans les effluents analysés.

Les cartouches C18 et X-AW présentent des profils d'extraction globalement distincts, mais complémentaires, ce qui suggère que d'utiliser les deux permettent de couvrir une plus grande diversité de composés, par conséquent ces dernières ont été retenues pour les analyses ultérieures. Leur combinaison permet une couverture chimique étendue, en tirant parti de leur sélectivité respective. De plus, la complémentarité des méthodes analytiques, notamment l'alternance entre phase mobile acide et neutre et les deux modes d'ionisation, résulte à la détection d'un large éventail de contaminants émergents dans les eaux usées.

3.2 Complémentarité des méthodes analytiques

En utilisant les données issues de la carte thermique, les échantillons extraits par les cartouches C18 et X-AW ont été regroupés pour une analyse comparative unique. Cette comparaison est illustrée par le diagramme de Venn à la Figure 3.2. Au total, 528 contaminants ont été détectés avec la cartouche C18, contre 428 avec la cartouche X-AW, dont 293 contaminants communs aux deux méthodes.

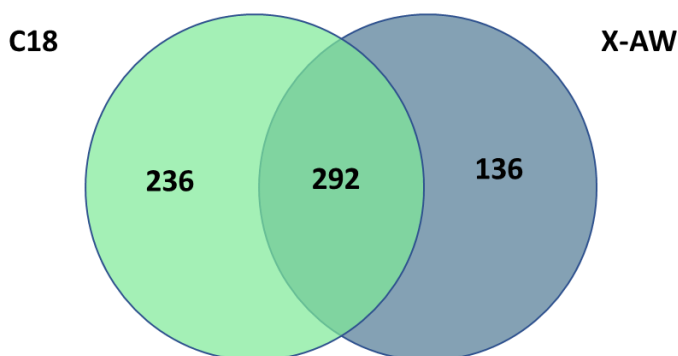


Figure 3.2 Diagramme de Venn illustrant le nombre de composés détectés dans les échantillons eaux usées à l'aide d'extraction sur phase solide avec des cartouches C18 et X-AW

Les résultats montrent que la cartouche C18 permet de détecter un plus grand nombre de contaminants que la X-AW. Cette différence peut s'expliquer par la nature de l'adsorbant de la C18, particulièrement efficace pour retenir les composés hydrophobes ou faiblement polaires, fréquemment présents dans les échantillons environnementaux. En revanche, la cartouche X-AW permet l'extraction d'un nombre non négligeable de contaminants distincts de ceux détectés par la C18. Contrairement à cette dernière, la X-AW présente une affinité accrue pour les composés polaires et ionisables (négativement). Par la suite, trois méthodes chromatographiques, FA(+), FA(-), et AmAc(-), ont été comparées afin d'évaluer leur complémentarité dans la détection de composés présents dans deux types d'extraits d'eaux usées : un extrait obtenu à l'aide des cartouches SPE C18 ou X-AW (Figure 3.3).

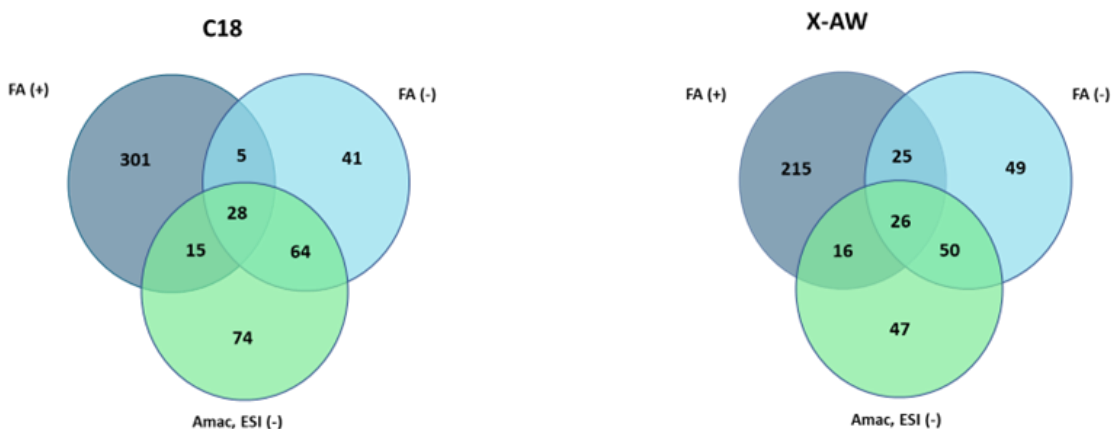


Figure 3.3 Diagrammes de Venn illustrant le nombre de composés identifiés à partir de leurs spectres MS/MS à haute résolution, en utilisant trois méthodes d'acquisition différentes et deux préparations d'échantillons par SPE

Dans le cas de l'extrait obtenu avec la cartouche C18, la condition FA(+) s'est révélée la plus performante, avec 349 composés identifiés de façon putative (par comparaison avec des spectres de base de données), et 301 de ces composés ont été détectés uniquement dans cette condition. En comparaison, FA(-) et AmAc(-) ont permis la détection de 41 et 74 composés uniquement couvert par chacune de ces méthodes, respectivement. Le chevauchement entre les deux méthodes en mode négatif est important donnant 64 composés communs, tandis que 28 composés ont été détectés par l'ensemble des trois conditions. Cela indique que l'ionisation en mode positif est essentielle pour accéder à un grand nombre de composés,

mais qu'une complémentarité avec les méthodes en mode négatif est nécessaire pour maximiser la couverture analytique.

Pour l'extrait obtenu avec la cartouche X-AW, une distribution similaire est observée. La condition FA(+) permet la détection de 215 composés uniques, en comparaison de 49 et 47 uniques pour FA(-) et AmAc(-), respectivement. Le recoupement entre les deux méthodes en mode négatif est également marqué avec 50 composés partagés et 26 composés sont communs aux trois conditions. Ces résultats illustrent la complémentarité entre les conditions de polarité, mais aussi l'influence de la méthode d'extraction. En résumé, les résultats montrent que chaque condition chromatographique contribue à la détection de sous-ensembles spécifiques de composés et contaminants, et que leur combinaison permet d'élargir considérablement la couverture analytique. L'association de ces méthodes d'extraction à des conditions LC-MS/MS complémentaires constitue donc une stratégie efficace pour une caractérisation approfondie des matrices des eaux usées complexes.

3.3 Identification des contaminants détectés

Les diagrammes circulaires présentés ci-dessous, à la figure 3.4, illustrent la répartition des composés détectés dans les extraits d'eaux usées, obtenus à partir des cartouches C18 et X-AW, selon les trois méthodes analytiques distinctes. Ces composés sont répartis en cinq catégories: les produits pharmaceutiques, les hormones, les produits naturels, les produits synthétiques et les métabolites endogènes.

Les résultats indiquent que l'utilisation de la C18 et la méthode FA(+) permet d'atteindre une meilleure couverture de détection des produits pharmaceutiques, des produits naturels, des produits synthétiques et des hormones. En mode ionisation négatif, il est possible de remarquer que les performances observées sont comparables entre les deux cartouches (C18 et X-AW), quelle que soit la méthode analytique utilisée. Toutefois, le nombre de composés détectés est globalement inférieur au mode positif.

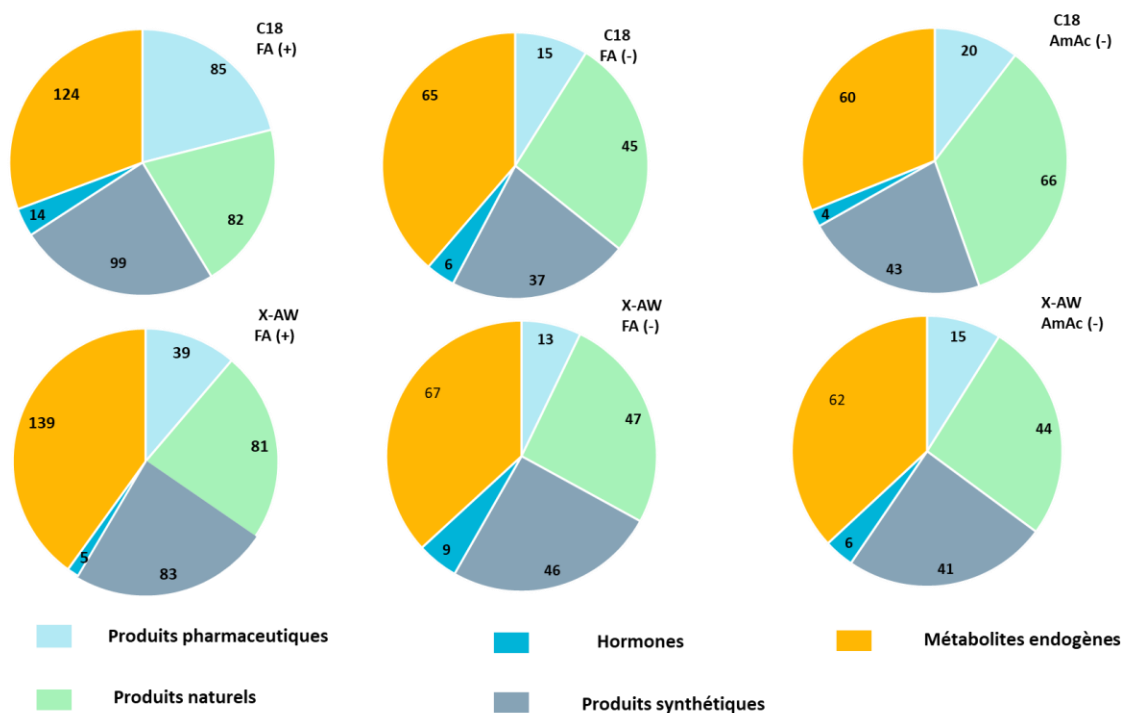


Figure 3.4 Distribution des catégories des composés détectés selon les conditions d'extraction et d'analyse

Parmi les cinq catégories, la détection des hormones reste celle avec le plus faible nombre de composés, et cela quel que soit le protocole analytique utilisé. Cette sous-représentation pourrait entre autres être liée à cette catégorie assez restreinte en termes de molécules possibles et à une ionisation moins efficace pour la plupart d'entre-eux, spécifiquement ceux qui ne sont pas conjugués avec un groupement sulfaté. Les métabolites endogènes représentent la catégorie ayant le plus de composés détectés pour toutes les conditions d'extractions et d'analyse. Le nombre maximal de métabolites endogènes détectés, soit 139 composés, est obtenu avec la combinaison du SPE X-AW et la méthode FA(+). Cette forte présence s'explique par plusieurs raisons : ils proviennent naturellement du corps humain, mais aussi de l'environnement naturel de l'eau. En tant que plus grande agglomération urbaine du Québec, la région métropolitaine de Montréal compte plus de 4 millions d'habitants, ce qui en fait l'une des zones les plus densément peuplées du pays (*Portrait de la région métropolitaine*, 2025). Cette densité démographique implique une production soutenue de métabolites d'origine humaine, contribuant ainsi à leur présence marquée dans les eaux usées.

Parmi tous les composés identifiés lors de l'analyse, certains ont été retenus en raison de leur statut potentiel de contaminants émergents. Ces substances ont été sélectionnées et regroupées dans des tableaux en fonction de leur nature chimique, à savoir : les produits pharmaceutiques et leurs métabolites, les produits naturels et leurs métabolites, les composés synthétiques ainsi que les hormones et leurs produits de transformation.

3.3.1 Les produits pharmaceutiques et leurs métabolites

L'analyse des échantillons d'eaux usées a permis d'identifier une large gamme de substances pharmaceutiques, incluant à la fois des médicaments ainsi que certains métabolites de médicaments (Tableau 3.1). Au total, 85 composés ont été détectés, illustrant la diversité des produits consommés par la population qui persistent dans les eaux usées. Ces substances couvrent une grande variété de classes thérapeutiques, telles que les anti-inflammatoires non stéroïdiens (paracétamol, ibuprofène, diclofénac), les antihypertenseurs (valsartan, losartan), les antidépresseurs (venlafaxine, citalopram), les antipsychotiques (quetiapine, amisulpride), les antibiotiques (ciprofloxacine, sulfaméthoxazole), les antifongiques, les antirétroviraux (abacavir, darunavir), ainsi que des médicaments spécialisés comme les immunosuppresseurs (acide mycophénolique), antiparasitaires (thiabendazole), et des substances utilisées en neurologie (carbamazépine, topiramate, gabapentine, etc.).

Parmi cette liste de produit pharmaceutique, une substance détectée a particulièrement attiré l'attention. Il s'agit de la phénacétine, un composé utilisé comme analgésique et antipyrétique, ayant toutefois été retiré du marché dans plusieurs pays en raison de ses effets néphrotoxiques et de son potentiel cancérigène. Ce médicament est notamment interdit au Canada depuis 1973 et aux États-Unis depuis 1983 (Canada, 2018). La phénacétine est connue comme agent de coupe dans la cocaïne, en raison de ses propriétés physiques similaires (Ladroue et al., 2017). La phénacétine est également utilisée comme réactif de laboratoire et dans certaines préparations de teintures capillaires (comme stabilisant du peroxyde d'hydrogène) au Canada, mais aucun médicament commercialisé n'en contient actuellement (Canada, 2017), son identification par LC-HRMS/MS dans les échantillons fera l'objet de la sous-section 3.4.

Une observation importante concerne la proportion significative de métabolites détectés, souvent sous forme de conjugués glucuronidés ou sulfatés tels que l'acétaminophène sulfate (Mazaleuskaya et al., 2015), la codéine-6-glucuronide (Vree et Verwey-van Wissen, 1992), l'acide mycophénolique glucuronide (Wolff et al., 2007) et l'oxazépam glucuronide (Dinis-Oliveira, 2017). Cela témoigne des biotransformations

métaboliques humaines de phase I et II, majoritairement via la glucuronidation, la sulfatation, l'hydroxylation, la déméthylation, la désalkylation, la carboxylation ou l'acétylation, mais aussi parfois par des transformations environnementales comme la dégradation abiotique ou microbienne, qui peuvent affecter quels composés qui pourraient être présents dans nos eaux usées (Picó et Barceló, 2015). L'approche non ciblée a ainsi permis de révéler à la fois des composés déjà bien connus comme contaminants dans l'environnement et d'autres moins documentés, offrant une vue globale et exploratoire du spectre des contaminants présents.

Tableau 3.1 Les médicaments (et leurs métabolites) détectés dans les échantillons d'eaux usées selon la méthode d'extraction et d'analyse

<i>Nom</i>	<i>Formule</i>	<i>Masse exacte (Da)</i>	<i>RT (min)</i>	<i>SPE</i>	<i>LC-MS</i>	<i>Autres informations</i>
2-phenylbutyric acid	C ₁₀ H ₁₂ O ₂	164.08	3.7	X-AW	AmAc(-)	traitement de troubles métaboliques
4-hydroxy-valsartan	C ₂₄ H ₂₉ N ₅ O ₄	451.22	7.3	C18	FA(+)	métabolite de valsartan
5-acetyl-2-hydroxybenzoic acid	C ₉ H ₈ O ₄	180.04	2.0	X-AW	AmAc(-)	métabolite de l'acide salicylique
5-acetyl-2-hydroxybenzoic acid	C ₉ H ₈ O ₄	180.04	2.0	X-AW	FA(-)	métabolite de l'acide salicylique
10,11-dihydro-10-hydroxycarbamazepine	C ₁₅ H ₁₄ N ₂ O ₂	254.11	5.1	C18	FA(+)	métabolite de carbamazepine
abacavir	C ₁₄ H ₁₈ N ₆ O	286.15	3.1	C18	FA(+)	antirétroviral (VIH)
acebutolol	C ₁₈ H ₂₈ N ₂ O ₄	336.20	4.1	C18	FA(+)	bêta-bloquant
acetaminophen	C ₈ H ₉ NO ₂	151.06	3.4	C18	AmAc(-)	antalgique et antipyrétique
acetaminophen	C ₈ H ₉ NO ₂	151.06	1.7	C18	FA(-), FA(+)	antalgique et antipyrétique
acetaminophen sulfate	C ₈ H ₉ NO ₅ S	231.02	2.3	C18, X-AW	AmAc(-)	métabolite de l'acétaminophène
acetaminophen sulfate	C ₈ H ₉ NO ₅ S	231.02	2.3	X-AW	FA(-)	métabolite de l'acétaminophène
amisulpride	C ₁₇ H ₂₇ N ₃ O ₄ S	369.17	4.3	C18	FA(+)	antipsychotique
atenolol	C ₁₄ H ₂₂ N ₂ O ₃	266.16	2.0	C18	FA(+)	bêta-bloquant (hypertension, angine)
atorvastatin	C ₃₃ H ₃₅ FN ₂ O ₅	558.25	10.8	C18, X-AW	FA(+)	hypolipidémiant
bezafibrate	C ₁₉ H ₂₀ ClNO ₄	361.11	8.9	C18, X-AW	FA(+)	hypolipidémiant (réduction du cholestérol)
bisoprolol	C ₁₈ H ₃₁ NO ₄	325.23	5.3	C18	FA(+)	bêta-bloquant
capsaicin	C ₁₈ H ₂₇ NO ₃	305.20	9.5	C18	FA(+)	analgésique topique
carbamazepine	C ₁₅ H ₁₂ N ₂ O	236.09	7.1	C18	FA(+)	antiépileptique, stabilisateur de l'humeur
carbamazepine epoxide	C ₁₅ H ₁₂ N ₂ O ₂	252.09	4.6	C18	FA(+)	métabolite de carbamazepine
carbamazepine glucuronide	C ₂₁ H ₂₀ N ₂ O ₇	412.13	5.8	C18	FA(+)	métabolite de carbamazepine
cephalexin	C ₁₆ H ₁₇ N ₃ O ₄ S	347.09	3.8	X-AW	FA(+)	antibiotique
cetirizine	C ₂₁ H ₂₅ ClN ₂ O ₃	388.16	8.2	C18, X-AW	FA(+)	antihistaminique
ciprofloxacin	C ₁₇ H ₁₈ FN ₃ O ₃	331.13	4.2	X-AW	FA(+)	antibiotique
ciprofloxacin piperazinyl-N4-sulfate	C ₁₇ H ₁₈ FN ₃ O ₆ S	411.09	5.2	X-AW	FA(-)	métabolite de ciprofloxacine
citalopram	C ₂₀ H ₂₁ FN ₂ O	324.16	6.9	C18	FA(+)	antidépresseur
clindamycin	C ₁₈ H ₃₃ ClN ₂ O ₅ S	424.18	5.3	C18	FA(+)	antibiotique (infections bactériennes)
codeine-6-glucuronide	C ₂₄ H ₂₉ NO ₉	475.18	2.9	C18, X-AW	FA(+)	métabolite de codéine
darunavir	C ₂₇ H ₃₇ N ₃ O ₇ S	547.24	9.3	C18	FA(+)	antirétroviral (VIH)
desacetyldiltiazem	C ₂₀ H ₂₄ N ₂ O ₃ S	372.15	6.3	C18	FA(+)	métabolite de diltiazem
desalkylflurazepam	C ₁₅ H ₁₀ ClFN ₂ O	288.05	8.0	C18	FA(+)	métabolite de flurazepam
desmethylocitalopram	C ₁₉ H ₁₉ FN ₂ O	310.15	6.8	C18	FA(+)	métabolite de citalopram
dextrorphan	C ₁₇ H ₂₃ NO	257.18	4.4	C18	FA(+)	métabolite de dextrométhorphan
dextrorphan O-glucuronide	C ₂₃ H ₃₁ NO ₇	433.21	3.1	C18, X-AW	FA(+)	métabolite de dextrométhorphan

diclofenac	C ₁₄ H ₁₁ Cl ₂ NO ₂	295.02	6.4	C18, X-AW	AmAc(-)	anti-inflammatoire non stéroïdien
diclofenac	C ₁₄ H ₁₁ Cl ₂ NO ₂	295.02	10.4	C18, X-AW	FA(+)	anti-inflammatoire non stéroïdien
diclofenac-C ₆ H ₂ Cl ₂ +NAC	C ₁₃ H ₁₆ N ₂ O ₅ S	312.08	2.6	C18, X-AW	FA(+)	métabolite de diclofenac
dihydrobupropion	C ₁₃ H ₂₀ ClNO	241.12	5.2	C18	FA(+)	métabolite de bupropion
dihydroxy-10,11-dihydrocarbamazepine	C ₁₅ H ₁₄ N ₂ O ₃	270.10	4.6	C18	FA(+)	métabolite de carbamazepine
diltiazem	C ₂₂ H ₂₆ N ₂ O ₄ S	414.16	7.5	C18	FA(+)	bloqueur des canaux calciques
diphenhydramine	C ₁₇ H ₂₁ NO	255.16	6.8	C18	FA(+)	antihistamine
fenofibric acid	C ₁₇ H ₁₅ ClO ₄	318.07	10.2	C18, X-AW	FA(+)	hypolipidémiant
fexofenadine	C ₃₂ H ₃₉ NO ₄	501.29	8.4	C18, X-AW	FA(-), FA(+)	antihistaminique
flecainide	C ₁₇ H ₂₀ F ₆ N ₂ O ₃	414.14	6.8	C18	FA(+)	antiarythmique
fluconazole	C ₁₃ H ₁₂ F ₂ N ₆ O	306.10	4.3	C18	FA(+)	antifongique
flucytosine	C ₄ H ₄ FN ₃ O	129.03	1.9	C18	FA(+)	antifongique
furosemide	C ₁₂ H ₁₁ ClN ₂ O ₅ S	330.01	4.2	C18, X-AW	AmAc(-)	diurétique
gabapentin	C ₉ H ₁₇ NO ₂	171.13	2.4	C18	FA(+)	antiépileptique, douleur neuropathique
gabapentin	C ₉ H ₁₇ NO ₂	171.13	1.8	C18	AmAc(-)	antiépileptique, douleur neuropathique
gliclazide	C ₁₅ H ₂₁ N ₃ O ₃ S	323.13	9.2	C18, X-AW	FA(+)	antidiabétique
guaifenesin	C ₁₀ H ₁₄ O ₄	198.09	4.2	C18	FA(+)	expectorant
hydrochlorothiazide	C ₇ H ₈ ClN ₃ O ₄ S ₂	296.96	2.9	C18	AmAc(-)	diurétique, hypertension
hydroxyterbinafine	C ₂₁ H ₂₅ NO	307.19	6.9	C18	FA(+)	métabolite de terbinafine
ibuprofen	C ₁₃ H ₁₈ O ₂	206.13	5.9	C18, X-AW	AmAc(-)	anti-inflammatoire non stéroïdien
ibuprofen	C ₁₃ H ₁₈ O ₂	206.13	9.8	C18, X-AW	FA(+)	anti-inflammatoire non stéroïdien
ibuprofen-carboxy	C ₁₃ H ₁₆ O ₄	236.10	6.0	X-AW	FA(+)	métabolite de l'ibuprofène
ibuprofen+O	C ₁₃ H ₁₈ O ₄	222.1256	2.6	C18, X-AW	AmAc(-)	métabolite de l'ibuprofène
ibuprofen+O	C ₁₃ H ₁₈ O ₃	222.1256	5.6	C18, X-AW	FA(-)	métabolite de l'ibuprofène
irbesartan	C ₂₅ H ₂₈ N ₆ O	428.23	8.1	C18, X-AW	FA(+)	antihypertenseur
ketamine	C ₁₃ H ₁₆ ClNO	237.09	4.2	C18	FA(+)	anesthésique, analgésique, drogue illicite
labetalol	C ₁₉ H ₂₄ N ₂ O ₃	328.18	5.7	C18	FA(+)	bêta-bloquant (hypertension)
levetiracetam	C ₈ H ₁₄ N ₂ O ₂	170.11	2.2	C18	FA(+)	antiépileptique
lidocaine	C ₁₄ H ₂₂ N ₂ O	234.17	3.5	C18	FA(+)	anesthésique local
losartan	C ₂₂ H ₂₃ ClN ₆ O	422.16	8.1	C18, X-AW	FA(+)	antihypertenseur
methocarbamol	C ₁₁ H ₁₅ NO ₅	241.10	4.7	C18	FA(+)	myorelaxant
metoprolol	C ₁₅ H ₂₅ NO ₃	267.18	4.3	C18	FA(+)	bêta-bloquant (hypertension, angine)
minoxidil	C ₉ H ₁₅ N ₅ O	209.13	3.8	C18	FA(+)	vasodilatateur, traitement perte de cheveux
mycophenolic acid	C ₁₇ H ₂₀ O ₆	320.13	5.5	C18, X-AW	AmAc(-)	immunosuppresseur
mycophenolic acid	C ₁₇ H ₂₀ O ₆	320.13	8.5	C18, X-AW	FA(+)	immunosuppresseur
mycophenolic acid glucuronide	C ₂₃ H ₂₈ O ₁₂	496.16	2.8	C18	AmAc(-)	métabolite de l'acide mycophénolique
mycophenolic acid glucuronide	C ₂₃ H ₂₈ O ₁₂	496.16	6.2	C18, X-AW	FA(-)	métabolite de l'acide mycophénolique
N-acetylsulfamethoxazole	C ₁₂ H ₁₃ N ₃ O ₄ S	295.06	5.5	C18, X-AW	FA(+)	métabolite de sulfamethoxazole

N-acetylsulfapyridine	C ₁₃ H ₁₃ N ₃ O ₃ S	291.07	5.5	C18	FA(+)	métabolite de sulfapyridine
naproxen	C ₁₄ H ₁₄ O ₃	230.09	8.6	C18	FA(-), FA(+)	anti-inflammatoire non stéroïdien
naproxen	C ₁₄ H ₁₄ O ₃	230.09	4.7	X-AW	AmAc(-)	anti-inflammatoire non stéroïdien
O-desmethylnaproxen	C ₁₃ H ₁₂ O ₃	216.08	6.1	C18, X-AW	FA(-), FA(+)	métabolite de naproxène
O-desmethyltramadol	C ₁₅ H ₂₃ NO ₂	249.17	3.2	C18	FA(+)	métabolite de tramadol
O-desmethylvenlafaxine	C ₁₆ H ₂₅ NO ₂	263.19	3.9	C18, X-AW	FA(+)	métabolite de venlafaxine
oxazepam	C ₁₅ H ₁₁ ClN ₂ O ₂	286.05	7.5	C18	FA(+)	benzodiazépine (anxiété, insomnie)
oxazepam glucuronide	C ₂₁ H ₁₉ ClN ₂ O ₈	462.08	6.2	C18, X-AW	FA(+)	métabolite de oxazepam
p-hydroxybenzoylecgonine	C ₁₆ H ₁₉ NO ₅	305.13	3.2	C18	FA(+)	métabolite de cocaïne
perindopril	C ₁₉ H ₃₂ N ₂ O ₅	368.23	6.2	C18, X-AW	FA(+)	antihypertenseur
phenacetin	C ₁₀ H ₁₃ NO ₂	179.09	5.1	C18	FA(+)	analgésique
phenoxymethylpenicilloic acid	C ₁₆ H ₂₀ N ₂ O ₆ S	368.10	5.3	X-AW	FA(+)	métabolite de phenoxyméthylpenicilline
prednisolone 21-sulfate	C ₂₁ H ₂₈ O ₈ S	440.15	5.2	C18	FA(-)	métabolite de prednisolone
pregabalin	C ₈ H ₁₇ NO ₂	159.13	2.1	C18	FA(+)	anticonvulsivant, douleur neuropathique
pseudoephedrine	C ₁₀ H ₁₅ NO	165.115364	2.3	C18, X-AW	FA(+)	médicament décongestionnant
quetiapine	C ₂₁ H ₂₅ N ₃ O ₂ S	383.17	6.4	C18	FA(+)	antipsychotique, stabilisateur de l'humeur
quetiapine métabolite 2O, -2H	C ₂₁ H ₂₃ N ₃ O ₄ S	413.14	5.5	C18, X-AW	FA(+)	métabolite de quetiapine
rac-N,O-didesmethylvenlafaxine	C ₁₅ H ₂₃ NO ₂	249.17	3.6	C18	FA(+)	métabolite de venlafaxine
ranitidine	C ₁₃ H ₂₂ N ₄ O ₃ S	314.14	2.6	C18	FA(+)	anti-ulcéreux (bloqueur h2)
ritalinic acid	C ₁₃ H ₁₇ NO ₂	219.13	3.7	C18	FA(+)	métabolite de méthylphénidate (ritaline)
rosuvastatin	C ₂₂ H ₂₈ FN ₃ O ₆ S	481.17	8.6	C18, X-AW	FA(-)	hypolipidémiant
S-methyl-3-thioacetaminophen	C ₉ H ₁₁ NO ₂ S	197.0511	3.5	C18	AmAc(-), FA(-)	métabolite de l'acétaminophène
salicylic acid	C ₇ H ₆ O ₃	138.03	4.5	X-AW	FA(+)	kératolytique / anti-inflammatoire topique
sitagliptin	C ₁₆ H ₁₅ F ₆ N ₅ O	407.12	4.8	C18, X-AW	FA(+)	antidiabétique
sotalol	C ₁₂ H ₂₀ N ₂ O ₃ S	272.12	2.0	C18	FA(+)	antiarythmique et bêta-bloquant
sulfamethoxazole	C ₁₀ H ₁₁ N ₃ O ₃ S	253.05	5.1	C18, X-AW	FA(+)	antibiotique
sulfapyridine	C ₁₁ H ₁₁ N ₃ O ₂ S	249.06	3.4	C18	FA(+)	antibiotique (sulfamide)
sulfasalazine	C ₁₈ H ₁₄ N ₄ O ₅ S	398.07	5.3	C18, X-AW	AmAc(-)	anti-inflammatoire / immunosuppresseur
telmisartan	C ₃₃ H ₃₀ N ₄ O ₂	514.24	7.9	C18	AmAc(-)	antihypertenseur
telmisartan	C ₃₃ H ₃₀ N ₄ O ₂	514.24	8.7	C18, X-AW	FA(-), FA(+)	antihypertenseur
telmisartan	C ₃₃ H ₃₀ N ₄ O ₂	514.24	7.8	X-AW	AmAc(-)	antihypertenseur
theophylline	C ₇ H ₈ N ₄ O ₂	180.06	2.3	C18	AmAc(-), FA(-)	bronchodilatateur, métabolite de la caféine
thiabendazole	C ₁₀ H ₇ N ₃ S	201.04	3.0	C18	FA(+)	antiparasitaire
thymopentin	C ₃₀ H ₄₉ N ₉ O ₉	679.37	5.2	X-AW	FA(+)	immunomodulateur
tolycaine	C ₁₅ H ₂₂ N ₂ O ₃	278.16	4.9	C18	FA(+)	anesthésique local
topiramate	C ₁₂ H ₂₁ NO ₈ S	339.10	5.8	C18	AmAc(-)	antiépileptique, prévention migraine
trazodone	C ₁₉ H ₂₂ ClN ₅ O	371.15	6.3	C18	FA(+)	antidépresseur et hypnotique
trimethoprim	C ₁₄ H ₁₈ N ₄ O ₃	290.14	3.5	C18	FA(+)	antibiotique

valproic acid	C ₈ H ₁₆ O ₂	144.12	3.3	X-AW	AmAc(-)	antiépileptique / thymorégulateur
valproic acid glucuronide	C ₁₄ H ₂₄ O ₈	320.15	3.2	C18, X-AW	AmAc(-)	métabolite de l'acide valproïque
valproic acid glucuronide	C ₁₄ H ₂₄ O ₈	320.15	5.7	C18	FA(-)	métabolite de l'acide valproïque
valsartan	C ₂₄ H ₂₉ N ₅ O ₃	435.23	4.5	C18, X-AW	AmAc(-)	antihypertenseur
valsartan	C ₂₄ H ₂₉ N ₅ O ₃	435.23	9.5	C18, X-AW	FA(-), FA(+)	antihypertenseur
venlafaxine	C ₁₇ H ₂₇ NO ₂	277.20	5.5	C18, X-AW	FA(+)	antidépresseur
vitexin 4-O-glucoside	C ₂₇ H ₃₀ O ₁₅	594.16	3.9	C18, X-AW	FA(-)	métabolite de vitexin

Un exemple particulièrement représentatif est celui de la carbamazépine (Figure 3.5), un anticonvulsivant couramment utilisé, retrouvée dans les eaux usées accompagnées de plusieurs de ses métabolites caractéristiques. Parmi eux, la carbamazépine-10,11-époxyde (EP-CBZ), formés par l'oxydation via les cytochromes P450, constitue le principal métabolite actif. Celui-ci peut ensuite subir une hydrolyse enzymatique pour donner le 10,11-dihydro-10-hydroxycarbamazépine, qui peut à son tour être hydroxylé en dihydroxy-10,11-dihydrocarbamazépine. En parallèle, une glucuronidation (phase II) peut conduire à la formation de carbamazépine glucuronidé (CBZ-Glu), une forme hydrosoluble facilitant son excrétion dans l'urine (Trager, 2007); (Lertratanangkoon et Horning, 1982). Cette cascade métabolique illustre la capacité de l'approche non ciblée à détecter différents stades de transformation biologique des xénobiotiques et à suivre le devenir environnemental de substances actives.

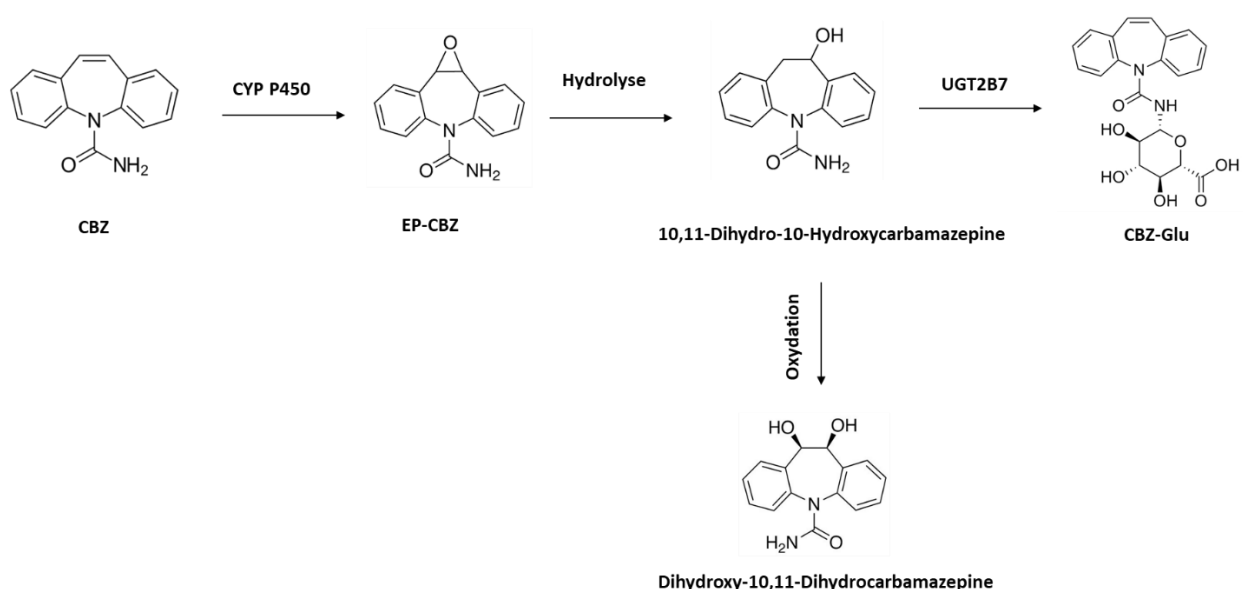


Figure 3.5 Voies de transformation (métabolisme) de la carbamazépine

Enfin, cette étude illustre la pertinence d'une approche non ciblée pour l'évaluation globale de la contamination pharmaceutique dans les eaux usées. Elle permet non seulement de suivre les tendances

de consommation médicamenteuse à l'échelle d'une population, mais aussi de détecter de potentiels produits de transformation inattendus, renforçant ainsi la surveillance environnementale.

3.3.2 Les stéroïdes et leurs métabolites

L'analyse LC-MS/MS des eaux usées a permis d'identifier un large éventail de composés stéroïdiens, incluant des hormones endogènes, et plusieurs métabolites conjugués. Les stéroïdes détectées dans les échantillons d'eaux usées sont énumérées au tableau 3.2. Bien qu'une bonne partie des composés détectés soient des formes métabolisées (glucuronidés ou sulfatés), ils représentent fidèlement l'activité hormonale globale d'origine humaine et, potentiellement, exogène. Des hormones clés ont été identifiées, telles que l'androstènedione, la testostérone, la progestérone, ou encore des métabolites majeurs comme la 17-hydroxyprogestérone et le DHEA-S (déhydroépiandrostérone sulfate). Ces composés jouent un rôle central dans la régulation endocrinienne, et leur détection reflète une activité hormonale humaine normale, notamment via les processus métaboliques de phase I et II. Les figures 3.6 et 3.7 montrent des chromatogrammes représentatifs des stéroïdes non-conjugués et conjugués, respectivement. Les non-conjugués sont généralement mieux détectés en mode positif et les conjugués, en contraste, sont souvent mieux détectés en mode négatif.

De nombreux métabolites sulfatés ou glucuronidés (androstérone sulfate, cortisol 21-sulfate, épitestostérone glucuronide, etc.) traduisent des mécanismes physiologiques d'élimination et pointent vers l'origine humaine des substances retrouvées. Ces résultats s'inscrivent dans le cadre de la biosurveillance environnementale des hormones naturelles, qui sont régulièrement excrétées par voie urinaire ou fécale (Liu *et al.*, 2009). Par ailleurs, la présence de composés susceptibles d'avoir une origine exogène ou dopante, tels que la boldénone, l'androstatrione (ATD) ou la testostérone propionate, soulève la question d'un usage non thérapeutique des stéroïdes. Ces substances sont parfois utilisées comme agents anabolisants ou suppléments hormonaux, notamment dans le cadre du dopage sportif, et leur détection dans les effluents urbains suggère un intérêt particulier pour leur surveillance ciblée (Backe *et al.*, 2011).

En somme, ces données mettent en lumière un panorama hormonal complexe dans les matrices environnementales, révélant à la fois des fonctions physiologiques normales et des apports anthropiques potentiels. Ce profil hormonal est d'un grand intérêt pour l'évaluation de l'exposition environnementale aux hormones actives, et pour anticiper leurs effets potentiels sur les écosystèmes aquatiques.

Tableau 3.2 Les Stéroïdes détectés dans les échantillons d'eaux usées selon la méthode d'extraction et d'analyse

<i>Nom</i>	<i>Formule</i>	<i>Masse exacte (Da)</i>	<i>RT (min)</i>	<i>SPE</i>	<i>LC-MS</i>	<i>Autres informations</i>
11β-hydroxyandrostenedione	C ₁₉ H ₂₆ O ₃	302.19	7.9	C18	FA(+)	précurseur dans la synthèse des glucocorticoïdes
16α-hydroxyandrostenedione	C ₁₉ H ₂₆ O ₃	302.19	7.4	C18	FA(+)	précurseur d'oestrogène
17-hydroxyprogestérone	C ₂₁ H ₃₀ O ₃	330.22	12.3	X-AW	FA(+)	précurseur du cortisol et androgènes
1α-méthyl-5α-androstane-3α,17β-diol glucuronide	C ₂₆ H ₄₂ O ₈	482.29	3.1	X-AW	AmAc(-)	métabolite conjugué des stéroïdes
3-déhydroépiandrostérone sulfate (DHEA-S)	C ₁₉ H ₂₈ O ₅ S	368.17	7.4	X-AW	FA(-)	précurseur des androgènes et oestrogènes
3β-allopregnanolone sulfate	C ₂₁ H ₃₄ O ₅ S	398.21	6.5	C18, X-AW	AmAc(-)	métabolite sulfaté de la progestérone
3β-allopregnanolone sulfate	C ₂₁ H ₃₄ O ₅ S	398.21	7.7	C18, X-AW	FA(-)	métabolite sulfaté de la progestérone
4-androsten-17β-ol-3-one sulfate	C ₁₉ H ₂₈ O ₅ S	368.17	6.3	C18, X-AW	AmAc(-)	métabolite sulfaté de la testostérone
4-androsten-17β-ol-3-one sulfate	C ₁₉ H ₂₈ O ₅ S	368.17	7.4	C18, X-AW	FA(-)	métabolite sulfaté de la testostérone
5α-androstan-3β-ol-17-one sulfate	C ₁₉ H ₃₀ O ₅ S	370.18	6.5	C18	AmAc(-), FA(-)	métabolite sulfaté
5α-androstan-3β-ol-17-one sulfate	C ₁₉ H ₃₀ O ₅ S	370.18	5.5	X-AW	AmAc(-)	métabolite sulfaté
5α-androstan-3β-ol-17-one sulfate	C ₁₉ H ₃₀ O ₅ S	370.18	7.7	X-AW	FA(-)	métabolite sulfaté
5α-androsten-2-one	C ₁₉ H ₂₈ O	272.21	9.8	C18	FA(+)	prohormone/ modulateur hormonal
5α-pregnan-3α,17-diol-20-one 3-sulfate	C ₂₁ H ₃₄ O ₆ S	414.21	5.1	C18, X-AW	AmAc(-)	métabolite sulfaté
5α-pregnan-3α,17-diol-20-one 3-sulfate	C ₂₁ H ₃₄ O ₆ S	414.21	6.4	C18, X-AW	FA(+)	métabolite sulfaté
5β-tétrahydrocortisone	C ₂₁ H ₃₂ O ₅	364.22	7.0	C18	FA(+)	métabolite de la cortisone
androstan-3-ol-17-one 3-glucuronide	C ₂₅ H ₃₈ O ₈	466.26	8.1	X-AW	FA(-)	métabolite de la dihydrotestostérone
androstatrione (ATD)	C ₁₉ H ₂₂ O ₂	282.16	6.9	C18	FA(+)	supplément illégal dans le sport
androstènedione	C ₁₉ H ₂₆ O ₂	286.19	9.9	C18	FA(+)	précurseur de la testostérone et des oestrogènes
androstérone	C ₁₉ H ₃₀ O ₂	290.22	8.1	C18	FA(+)	métabolite de la testostérone
androstérone sulfate	C ₁₉ H ₃₀ O ₅ S	370.18	7.6	C18	FA(-)	métabolite sulfaté de l'androstérone
androstérone sulfate	C ₁₉ H ₃₀ O ₅ S	370.18	6.5	X-AW	AmAc(-)	métabolite sulfaté de l'androstérone
boldénone	C ₁₉ H ₂₄ O ₂	284.18	8.6	C18	FA(+)	supplément illégal dans le sport
cortisol 21-sulfate	C ₂₁ H ₃₀ O ₈ S	442.17	6.0	X-AW	FA(-)	métabolite conjugué du cortisol
épitestostérone glucuronide	C ₂₅ H ₃₆ O ₈	464.24	7.3	X-AW	FA(+)	métabolite de l'épitestostérone
étiocholanedione	C ₁₉ H ₂₈ O ₂	288.21	10.5	C18	FA(+)	métabolite de la androstènedione
norethandrolone	C ₂₀ H ₃₀ O ₂	302.22	11.2	C18	FA(+)	stéroïde anabolisant
testostérone propionate	C ₂₂ H ₃₂ O ₃	344.24	10.9	C18, X-AW	FA(+)	testostérone synthétique

Certains noms sont répétés s'ils ont été détectés avec deux méthodes à des temps de rétention distincts (FA (-) et AmAc (-)).

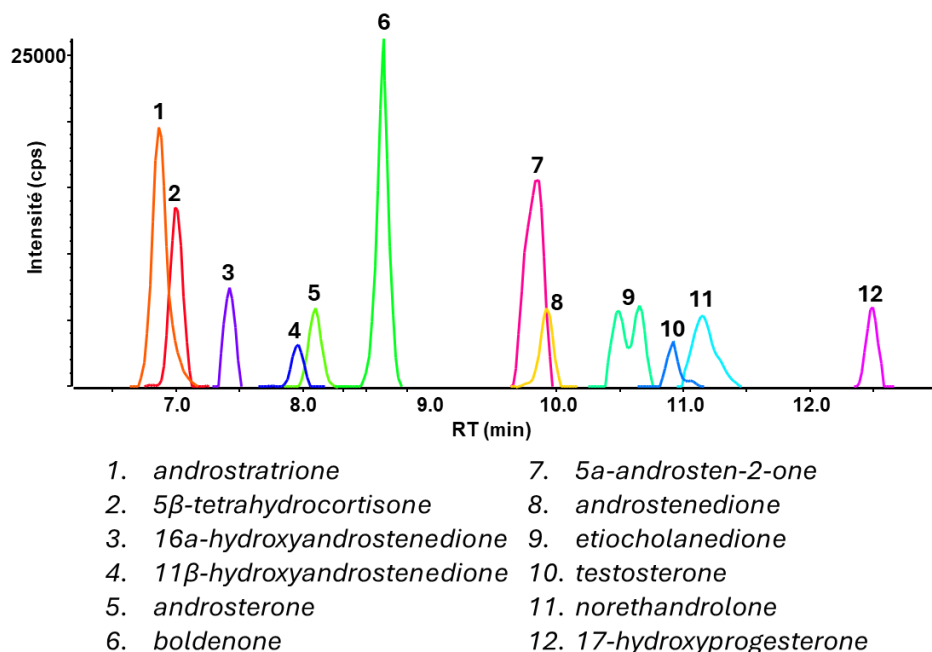


Figure 3.6 Chromatogramme représentative montrant les pics des stéroïdes non-conjugués identifiées dans les eaux usées identifiés par correspondance spectrales MS/MS, avec la méthode FA(+)

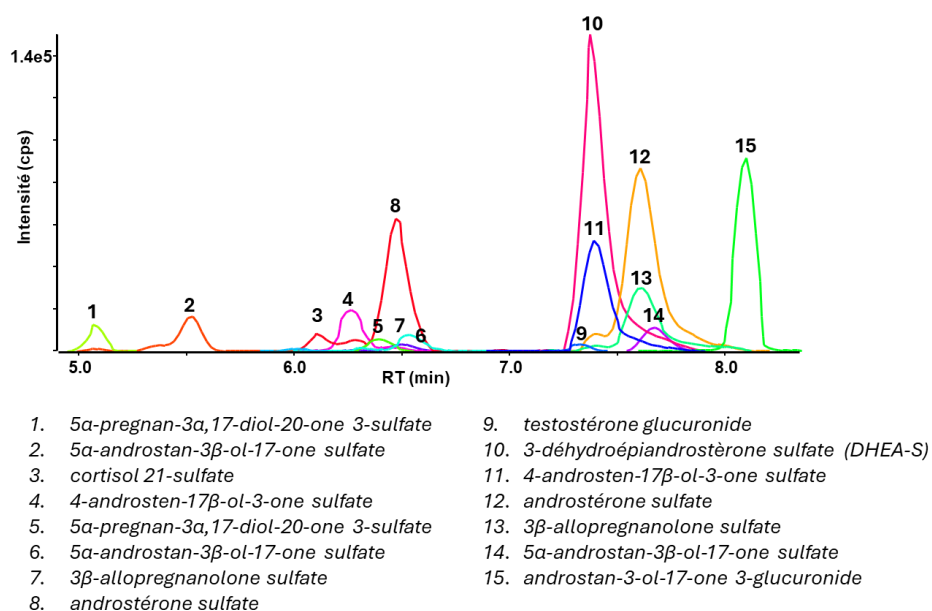


Figure 3.7 Chromatogramme représentative montrant les pics des stéroïdes conjugués identifiées dans les eaux usées extraits identifiés par correspondance spectrales MS/MS, avec la méthode AmAc(-)

3.3.3 Les produits naturels et leurs métabolites

L'analyse des échantillons d'eaux usées a permis de détecter 13 composés correspondant aux produits naturels et de leurs métabolites, révélant à la fois des usages domestiques courants, des pratiques de consommation spécifiques et des apports potentiels issus de produits pharmaceutiques ou de compléments alimentaires (tableau 3.3). Parmi les substances les plus fréquemment identifiées figurent les alcaloïdes stimulants tels que la caféine et la théobromine, naturellement présentes dans des produits de consommation courante comme le café, le thé et le chocolat. Leur détection systématique en fait des marqueurs robustes de pollution domestique (Buerge *et al.*, 2003). Les métabolites de la caféine, notamment l'acide diméthyluréique et l'acide triméthylurique, ont également été retrouvés, confirmant la persistance de ces composés dans les eaux usées.

Par ailleurs, la présence de substances illicites ou réglementées, telles que la cocaïne et ses principaux métabolites (benzoylecgonine, benzoynorecgonine, p-hydroxybenzoylecgonine), ainsi que le THC-COOH, un métabolite majeur du cannabis, témoigne d'une consommation significative de drogues au sein de la population étudiée. De même, la cathinone, stimulant naturel dérivé des feuilles de *khat*, bien que moins fréquemment étudié, a été identifiée. Cette détection illustre l'intérêt croissant de surveiller des composés émergents issus de nouvelles pratiques de consommation.

Au-delà des stimulants, plusieurs familles chimiques caractéristiques des produits naturels ont été détectées, notamment les flavonoïdes, alcaloïdes, triterpènes, ainsi que les acides gras alkylphénoliques. La quercétine-3-glucoside, un flavonoïde largement répandu dans les végétaux, a été identifié, de même que la berbérine, un alcaloïde aux propriétés pharmacologiques bien documentées, pour son effet à réguler la glycémie. La présence de déméthylzeylasteral, un triterpénoïde bioactif extrait de plantes médicinales telles que *Tripterygium wilfordii*, suggère une possible origine liée à l'usage de produits phytothérapeutiques (Yang *et al.*, 2021). Enfin, la détection d'acides ginkgoliques, composés caractéristiques du *Ginkgo biloba*, renforce l'hypothèse d'apports provenant d'un usage phytothérapique et des suppléments à base de plantes dans la population urbaine (Boateng *et al.*, 2024).

Tableau 3.3 Les produits naturels (et leurs métabolites) détectés dans les échantillons d'eaux usées selon la méthode d'extraction et d'analyse

<i>Nom</i>	<i>Formule</i>	<i>Masse exacte (Da)</i>	<i>RT (min)</i>	<i>SPE</i>	<i>LC-MS</i>	<i>Autres informations</i>
benzoylecgonine	C ₁₆ H ₁₉ NO ₄	289.13	3.9	C18	AmAc(-)	métabolite de cocaïne
benzoylecgonine	C ₁₆ H ₁₉ NO ₄	289.13	4.1	C18	FA(+)	métabolite de cocaïne
benzoynorecgonine	C ₁₅ H ₁₇ NO ₄	275.12	4.0	C18, X-AW	FA(+)	métabolite de cocaïne
berberine	C ₂₀ H ₁₈ NO ₄	336.12	7.7	X-AW	FA(+)	alcaloïdes
caféine	C ₈ H ₁₀ N ₄ O ₂	194.08	3.4	C18, X-AW	FA(+)	stimulant (café, thé boissants énergisantes)
cathinone	C ₉ H ₁₁ NO	149.08	7.2	X-AW	FA(+)	stimulant naturel (feuille de khat)
cocaïne	C ₁₇ H ₂₁ NO ₄	303.15	5.3	C18, X-AW	FA(+)	stimulant, drogue illicite
daidzein 4'-sulfate	C ₁₅ H ₁₀ O ₇ S	334.01	3.9	C18	AmAc(-)	métabolite de daidzein
demethylzeylasteral	C ₂₉ H ₃₈ O ₅	466.27	9.4	C18	FA(-)	triterpènes ou lignanes
ginkgolic Acid (C15:1)	C ₁₅ H ₂₄ O ₃	252.17	12.8	C18, X-AW	FA(-)	acides gras alkylphénoliques
ginkgolic Acid (C15:1)	C ₁₅ H ₂₄ O ₅	252.17	10.6	X-AW	AmAc(-)	acides gras alkylphénoliques
quercetin 3-glucoside	C ₂₁ H ₂₀ O ₁₂	464.10	4.4	C18	FA(-)	flavonoïdes
steviol	C ₂₀ H ₃₀ O ₃	318.22	8.6	C18, X-AW	FA(-), FA(+)	stéviosides
THC-COOH	C ₂₁ H ₂₈ O ₄	344.20	11.5	C18	FA(+)	métabolite de cannabis
Theobromine	C ₇ H ₈ N ₄ O ₂	180.06	2.1	C18, X-AW	FA(+)	stimulant (cacao, chocolat), métabolite de la caféine

3.3.4 Les produits synthétiques et leurs métabolites

L'analyse non ciblée menée sur les échantillons d'eaux usées a permis d'identifier un large éventail de produits synthétiques d'origines diverses (tableau 3.4). Ces composés, largement issus de produits de consommation courante, témoignent de la complexité chimique des rejets urbains et de la variété des sources de contamination. Parmi les substances détectées, les édulcorants artificiels tels que le sucralose et l'aspartame figurent parmi les plus représentés. Le sucralose, en particulier, se distingue par sa grande stabilité chimique et sa faible biodégradabilité, ce qui en fait un traceur efficace des eaux usées domestiques (Subedi et Kannan, 2014). Sa présence récurrente dans les échantillons témoigne d'un apport continu lié à la consommation alimentaire.

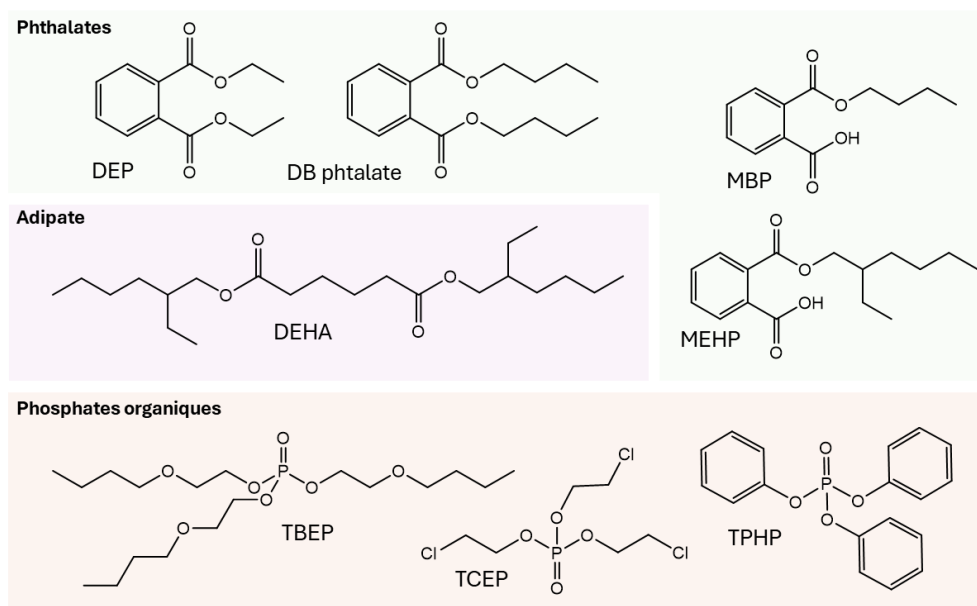
Concernant les plastifiants, les résultats mettent en évidence la présence de phthalates (tels que DEP, DB phtalate, DEHA) et de leurs métabolites (MBP, MEHP), ainsi que d'adipate et de phosphates organiques (notamment TBEP, TCEP, TPHP). Leurs structures sont illustrées à la figure 3.8. Ces substances sont couramment utilisées dans la fabrication de plastiques souples, encres, emballages alimentaires et cosmétiques. Leur détection fréquente illustre leur utilisation généralisée et leur persistance environnementale, souvent associée à des effets perturbateurs endocriniens (John D. Meeker et Heather M. Stapleton, 2009).

Tableau 3.4 Produits synthétiques (et leurs métabolites) détectés dans les échantillons d'eaux usées selon la méthode d'extraction et d'analyse

<i>Nom</i>	<i>Formule</i>	<i>Masse exacte (Da)</i>	<i>RT (min)</i>	<i>SPE</i>	<i>LC-MS</i>	<i>Autres informations</i>
1,2-benzenedicarboxylic acid (phthalic acid)	C ₈ H ₆ O ₄	166.03	2.6	C18, X-AW	FA(-)	conservateur, produits personnels
2-hydroxy-atrazine	C ₈ H ₁₅ N ₅ O	197.13	3.1	C18	FA(+)	métabolite de l'atrazine
2,5-di-tert-butylhydroquinone (BHQ)	C ₁₄ H ₂₂ O ₂	222.16	8.5	C18	AmAc(-)	antioxydant, additif alimentaire, métabolite du BHT
2,5-di-tert-butylhydroquinone (BHQ)	C ₁₄ H ₂₂ O ₂	222.16	10.9	C18, X-AW	FA(-)	antioxydant, additif alimentaire, métabolite du BHT
3,5-di-tert-butyl-4-hydroxybenzoic acid	C ₁₅ H ₂₄ O ₃	250.16	7.4	C18	AmAc(-)	métabolite de BHT
3,5-di-tert-butyl-4-hydroxybenzoic acid	C ₁₅ H ₂₄ O ₃	250.16	10.0	C18, X-AW	FA(+)	métabolite de BHT
3,5-di-tert-butyl-4-hydroxybenzoic acid	C ₁₅ H ₂₄ O ₃	250.16	11.6	C18	FA(-)	métabolite de BHT
3,5-dichlorosalicylic acid	C ₇ H ₄ Cl ₂ O ₃	205.95	4.2	C18	AmAc(-)	métabolite de dicamba (pesticide)
4-nitrophenol	C ₆ H ₅ NO ₃	139.03	4.4	C18	AmAc(-)	métabolite de certains pesticides
4,6-dinitro-o-cresol	C ₇ H ₆ N ₂ O ₅	198.03	3.4	X-AW	AmAc(-)	herbicide/insecticide
8-hydroxyquinoline	C ₉ H ₇ NO	145.05	1.9	X-AW	FA(+)	antifongique, antiseptique
anthraquinone	C ₁₄ H ₈ O ₂	208.05	7.5	X-AW	FA(+)	composé aromatique polycyclique
aspartame	C ₁₄ H ₁₈ N ₂ O ₅	294.12	3.7	C18	AmAc(-)	édulcorant artificiel
aspartame	C ₁₄ H ₁₈ N ₂ O ₅	294.12	3.4	C18	FA(+)	édulcorant artificiel
atrazine	C ₈ H ₁₄ ClN ₅	215.09	6.9	C18	FA(+)	herbicide sélectif
benzedrone	C ₁₇ H ₁₉ NO	253.15	11.3	X-AW	FA(+)	stimulant, drogue illicite
benzophenone	C ₁₃ H ₁₀ O	182.07	9.7	X-AW	FA(+)	UV-filtre, additif soins personnels
benzyl butyl phthalate	C ₁₉ H ₂₀ O ₄	312.14	11.9	C18, X-AW	FA(+)	plastifiant
BHT+O	C ₁₅ H ₂₄ O ₂	236.18	9.8	C18	AmAc(-)	métabolite de BHT
BHT-acid	C ₁₅ H ₂₂ O ₄	250.16	6.6	C18	AmAc(-)	métabolite de BHT
BHT-acid	C ₁₅ H ₂₂ O ₃	250.16	10.0	C18, X-AW	FA(+)	métabolite de BHT
BHT-aldehyde	C ₁₅ H ₂₂ O ₂	234.16	8.0	C18, X-AW	AmAc(-)	métabolite de BHT
bis(2-ethylhexyl) adipate (DEHA)	C ₂₂ H ₄₂ O ₄	370.31	13.0	C18	FA(+)	plastifiant
bisphénol A (BPA)	C ₁₅ H ₁₆ O ₂	228.12	8.0	C18	AmAc(-)	plastifiant
bisphénol S (BPS)	C ₁₂ H ₁₀ O ₄ S	250.03	5.3	C18, X-AW	AmAc(-), FA(-), FA(+)	bisphénol, plastiques thermiques, encres
BPAP+O	C ₂₀ H ₁₈ O ₃	306.1256	8.9	C18	FA(-)	métabolite de BPA
butylparaben	C ₁₁ H ₁₄ O ₃	194.09	8.4	C18	AmAc(-)	conservateur, produits personnels
CP 47,497-C8-homolog C8 hydroxy	C ₂₂ H ₃₆ O ₃	348.27	8.2	C18	AmAc(-)	métabolite de cannabinoïde synthétique
desethylatrazine	C ₆ H ₁₀ ClN ₅	187.06	4.0	C18	FA(+)	métabolite de l'atrazine
dibutyl adipate	C ₁₄ H ₂₆ O ₄	258.18	10.3	C18	FA(+)	plastifiant
dibutyl phthalate (DB phthalate)	C ₁₆ H ₂₂ O ₄	278.15	11.5	C18, X-AW	AmAc(-)	plastifiant, cosmétiques, encres
diethyl phthalate (DEP)	C ₁₂ H ₁₄ O ₄	222.09	8.7	C18	FA(+)	plastifiant

diethyltoluamide (DEET)	C ₁₂ H ₁₇ NO	191.13	7.5	C18, X-AW	FA(+)	répulsif anti-insect
dodemorph	C ₁₈ H ₃₅ NO	281.27	9.9	X-AW	FA(+)	fongicide
ethyl 4-hydroxybenzoate (éthylparabène)	C ₉ H ₁₀ O ₃	134.0732	9.6	X-AW	AmAc(-), FA(+)	parabène
imazapyr	C ₁₃ H ₁₅ N ₃ O ₃	261.11	3.6	X-AW	FA(+)	herbicide
méthamphétamine	C ₁₀ H ₁₅ N	149.12	3.0	C18	FA(+)	stimulant, drogue de synthèse
methyl 4-hydroxybenzoate (methylparabène)	C ₈ H ₈ O ₃	152.05	4.7	X-AW	AmAc(-)	cosmétique, additif soins personnels
mono-2-ethylhexyl phthalate (MEHP)	C ₁₆ H ₂₂ O ₄	278.15	10.8	C18, X-AW	FA(-), FA(+)	métabolite de DEHP
mono-2-ethylhexyl phthalate	C ₁₆ H ₂₂ O ₄	278.15	6.3	X-AW	AmAc(-)	métabolite de DEHP
monobutyl phthalate (MBP)	C ₁₂ H ₁₄ O ₄	222.09	7.7	C18, X-AW	FA(-), FA(+)	métabolite de DBP
monobutyl phthalate	C ₁₂ H ₁₄ O ₄	222.09	3.1	X-AW	AmAc(-)	métabolite de DBP
N-tamp-fhxsap	C ₁₅ H ₂₁ F ₁₃ N ₂ O ₄ S	572.10	8.0	C18	FA(+)	composé perfluoré (PFAS)
o-phenylphenol	C ₁₂ H ₁₀ O	170.07	4.7	C18, X-AW	AmAc(-)	fongicide
o-phenylphenol	C ₁₂ H ₁₀ O	170.07	8.6	C18, X-AW	FA(-)	fongicide
oxybenzone	C ₁₄ H ₁₂ O ₃	228.08	10.7	C18, X-AW	FA(+)	filtre UV, écran solaire
oxybenzone-CH ₂	C ₁₃ H ₁₀ O ₃	214.06	8.3	C18, X-AW	FA(-), FA(+), (-AmAc)	métabolite de l'oxybenzone
phthalic anhydride	C ₈ H ₄ O ₃	148.02	11.8	X-AW	FA(-), FA(+)	précurseur de phtalates
sucralose	C ₁₂ H ₁₉ Cl ₃ O ₈	396.01	3.0	C18	AmAc(-)	édulcorent artificiel
TBHQ+SO ₃	C ₁₀ H ₁₄ O ₅ S	246.06	2.5	C18, X-AW	AmAc(-)	métabolite de TBHQ
TBHQ+SO ₃	C ₁₀ H ₁₄ O ₅ S	246.06	3.8	C18, X-AW	FA(-)	métabolite de TBHQ
terephthalic acid	C ₈ H ₆ O ₄	166.03	3.2	X-AW	FA(+)	précurseur du PET
tri(3-chloropropyl) phosphate (TCPP)	C ₉ H ₁₈ Cl ₃ O ₄ P	291.03	9.4	C18	FA(+)	retardateur de flamme organophosphoré
tributyl phosphate (TBP)	C ₁₂ H ₂₇ O ₄ P	266.16	10.4	C18	FA(+)	plastifiant et retardateur de flamme
tridemorph	C ₁₉ H ₃₉ NO	297.30	12.7	X-AW	FA(+)	fongicide
triethyl phosphate (TEP)	C ₆ H ₁₅ O ₄ P	182.07	4.7	C18	FA(+)	plastifiant et retardateur de flamme
triphenylphosphate (TPBP)	C ₁₈ H ₁₅ O ₄ P	326.07	11.6	C18	FA(+)	plastifiant et retardateur de flamme
triphenylphosphate (TPHP)	C ₁₈ H ₁₅ O ₄ P	326.07	11.6	X-AW	FA(+)	plastifiant et retardateur de flamme
tris(2-butoxyethyl) phosphate (TBEP)	C ₁₈ H ₃₉ O ₇ P	398.24	11.4	C18, X-AW	FA(+)	plastifiant et retardateur de flamme
tris(2-chloroethyl) phosphate (TCEP)	C ₆ H ₁₂ Cl ₃ O ₄ P	283.95	7.3	C18	FA(+)	plastifiant et retardateur de flamme
UV-P (Drometrizole)	C ₁₃ H ₁₁ N ₃ O	225.09	11.4	C18, X-AW	FA(+)	filtre UV, écran solaire

Tableau 3.5 Structures des contaminants plastifiants divers détectés dans les eaux usées



Les bisphénols, en particulier le bisphénol A (BPA) et son substitut BPS, ont également été identifiés dans les échantillons. Malgré les restrictions d'usage du BPA, ce composé demeure un polluant prioritaire à surveiller en raison de sa toxicité et de son potentiel de perturbation endocrinienne. Le BPS, souvent présenté comme une alternative plus sûre, soulève également des préoccupations toxicologiques, en raison de sa structure chimique similaire (Rochester et Bolden, 2015). La figure 3.9 démontrent les structures ainsi que les pics chromatographiques et les spectres obtenues pour ces deux bisphénols.

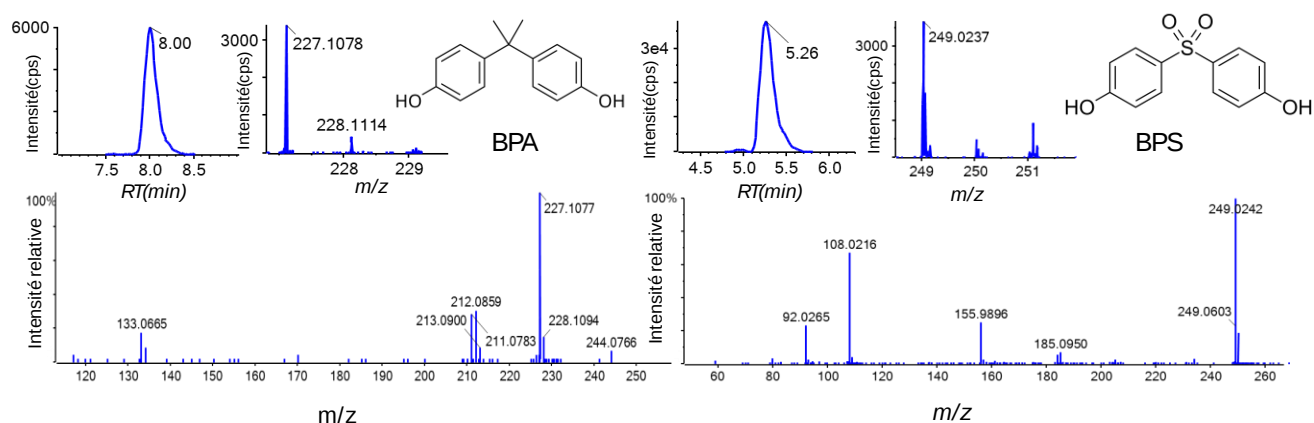


Figure 3.8 Résultats obtenus pour l'identification putative de deux bisphénols, BPA et BPS dans les échantillons d'eaux usées. Les deux sont bien détectés avec la méthode AmAc (-) et les spectres MS/MS correspondent bien à ceux rapportés dans la littérature (Ousji *et al.*, 2020); (Ousji et Sleno, 2021)

Les échantillons contiennent également un nombre significatif de composés agrochimiques, tels que l'atrazine et ses métabolites (2-hydroxyatrazine, desethylatrazine, desisopropylatrazine, atratone), les métabolites de la métalochlore et l'acétochlore ainsi que l'imazapyr, le tridemorph (fongicide) et le DEET (N,N-diéthyl-meta-toluamide), un répulsif anti-insectes largement utilisé. Leur présence dans les eaux usées peut résulter de rejets diffus ou ponctuels, en lien avec les usages domestiques, agricoles ou urbains. Ces substances sont connues pour leur mobilité élevée dans l'environnement et leur résistance aux traitements conventionnels en station d'épuration.

Enfin, plusieurs filtres UV ont été détectés, dont l'oxybenzone, la benzophenone et le drometrizole (UV-P), utilisés dans les produits cosmétiques et les écrans solaires. Leur caractère lipophile et leur toxicité potentielle vis-à-vis de la faune aquatique en font des composés d'intérêt à surveiller dans le contexte de la contamination urbaine.

2.6 Identification non ciblée de la phénacétine

Comme déjà mentionné, la phénacétine a été détectée dans les échantillons d'eaux usées dans les échantillons extraits à l'aide de cartouches C18, et analysés en mode positive, avec une phase mobile acide (FA (+)). Le signal correspondant a été observé à un temps de rétention de 5.1 minutes, avec un ion

précurseur $[M+H]^+$ détecté à m/z 180,1019 montrant plusieurs fragments caractéristiques m/z 162, 138, 58, 121 et 120 (Figure 3.5).

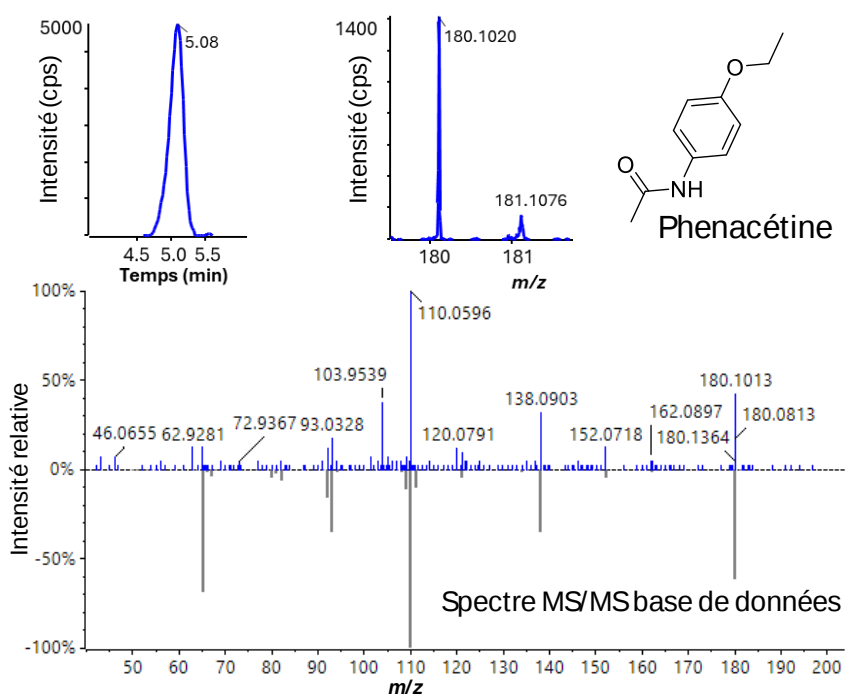


Figure 3.9 La détection de la phenacétine avec la méthode FA (+) au temps de rétention 5.1 min. Cette figure montre son chromatogramme d'ions extraits de la molécule protonée à m/z 180.01, son spectre MS et la bonne correspondance entre le spectre MS/MS d'un échantillon représentatif, avec celle dans la base de données

L'identification a été effectuée par comparaison avec des bibliothèques spectrales, permettant une annotation de niveau 2 selon la classification de (Schymanski *et al.*, 2015). Aucune confirmation par standard analytique n'a toutefois été réalisée à ce stade de notre étude, ce qui implique que cette identification demeure putative. La présence de ce composé, pourtant interdit depuis plusieurs décennies, souligne l'intérêt et la sensibilité de l'approche non ciblée pour révéler des contaminants inattendus. Une confirmation par standard serait nécessaire pour valider cette identification, et une attention particulière pourrait être portée à ce type de molécules dans le cadre de futures campagnes de surveillance environnementale.

3.4 Identification non ciblée de la cocaïne

L'identification de la cocaïne dans les échantillons des eaux usées a été réalisée à l'aide de l'extraction SPE C18, la séparation chromatographique avec l'acide formique et la détection en mode positive. La cocaïne a été détectée avec un ion précurseur $[M+H]^+$ à m/z 304,1471, le spectre MS/MS associé (Figure 3.11) montre plusieurs fragments caractéristiques à m/z 272, 182, 150, 122, 105 et 82, en parfaite cohérence avec les voies de fragmentation décrites dans la littérature (Bijlsma *et al.*, 2013). Le fragment m/z 272 résulte de la perte d'un groupe méthyle, tandis que les fragments m/z 105 et 122 sont associés au groupement benzoylé de la molécule. Les ions à m/z 182 et 150 correspondent à des fragments du noyau tropinique, soulignant une cassure au niveau du cycle azoté. La benzoylecgonine (m/z 290), principal métabolite de la cocaïne, a également été détectée, ainsi que l'ecgonine et un produit d'oxydation, l'OH-benzoylecgonine, traduisant des processus de dégradation (Bijlsma *et al.*, 2013).

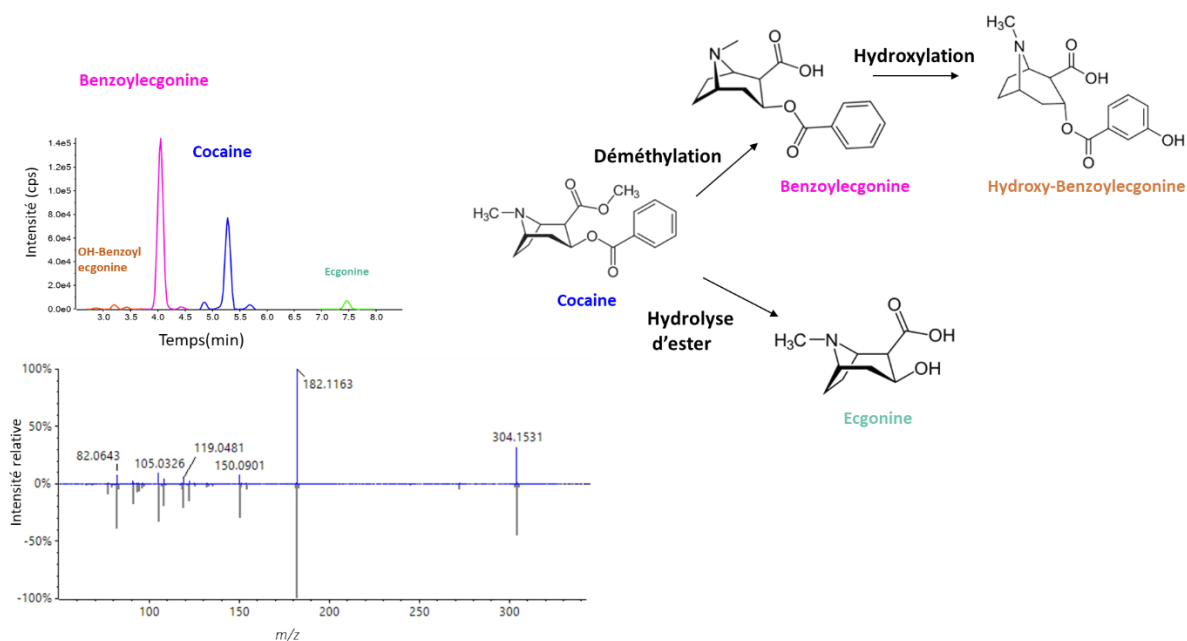


Figure 3.10 Chromatogramme d'ions extraits et structures de la cocaïne et ses métabolites retrouvés dans les eaux usées, ainsi que le spectre MS/MS de la cocaïne en mode positive et ses voies de fragmentation

Ces résultats confirment la présence de la cocaïne et de ses métabolites dans les échantillons analysés, et démontrent l'intérêt de combiner une approche non ciblée à haute résolution pour la détection initiale avec une confirmation ciblée par MS/MS pour la surveillance environnementale des substances

psychoactives. Cette méthodologie permet d'assurer une identification fiable, même en présence de matrices complexes.

3.5 Impact des méthodes analytiques sur la détection des contaminants émergents

3.5.1 Impact du choix de cartouche d'extraction

L'analyse des données du tableau 3.2 des stéroïdes extraits à l'aide des cartouches C18 et X-AW ont permis de mettre en évidence des différences notables dans l'efficacité d'extraction en fonction du type de métabolite conjugué ou non conjugué. Les cartouches C18, basées sur une phase stationnaire hydrophobe, se sont révélées particulièrement efficaces pour l'extraction des métabolites non conjugués, tels que les hormones libres, prohormones et stéroïdes naturels ou synthétiques. Ces molécules, généralement moins polaires, interagissent fortement avec la phase C18, assurant une bonne rétention et récupération. Parmi les hormones extraites avec cette cartouche figurent l'androstènedione, le boldénone, la testostérone propionate ainsi que plusieurs précurseurs et dérivés des androgènes et oestrogènes (Figure 3.12). Les structures des stéroïdes conjugués détectés exclusivement avec la cartouche X-AW sont indiquées à la Figure 3.13.

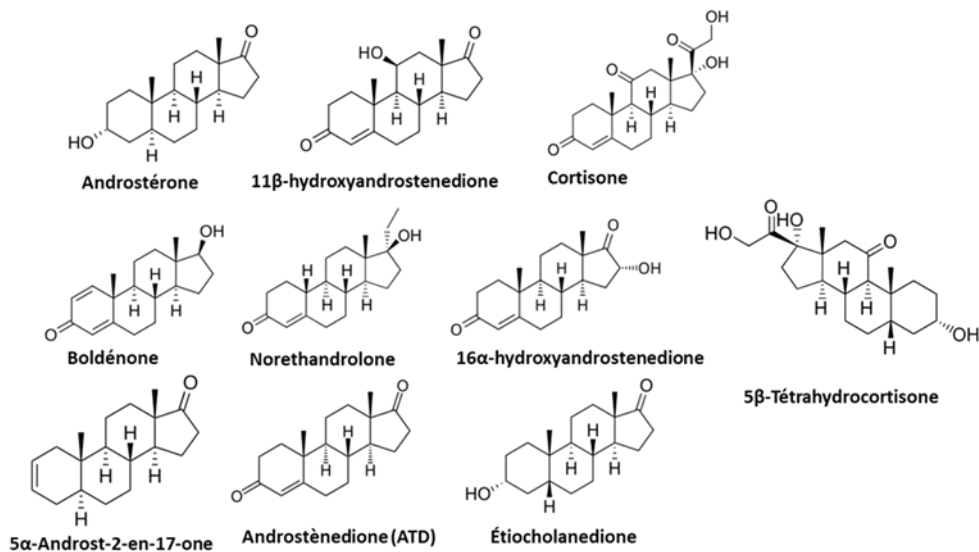


Figure 3.11 Stéroïdes non-conjugués extraits exclusivement avec la cartouche C18

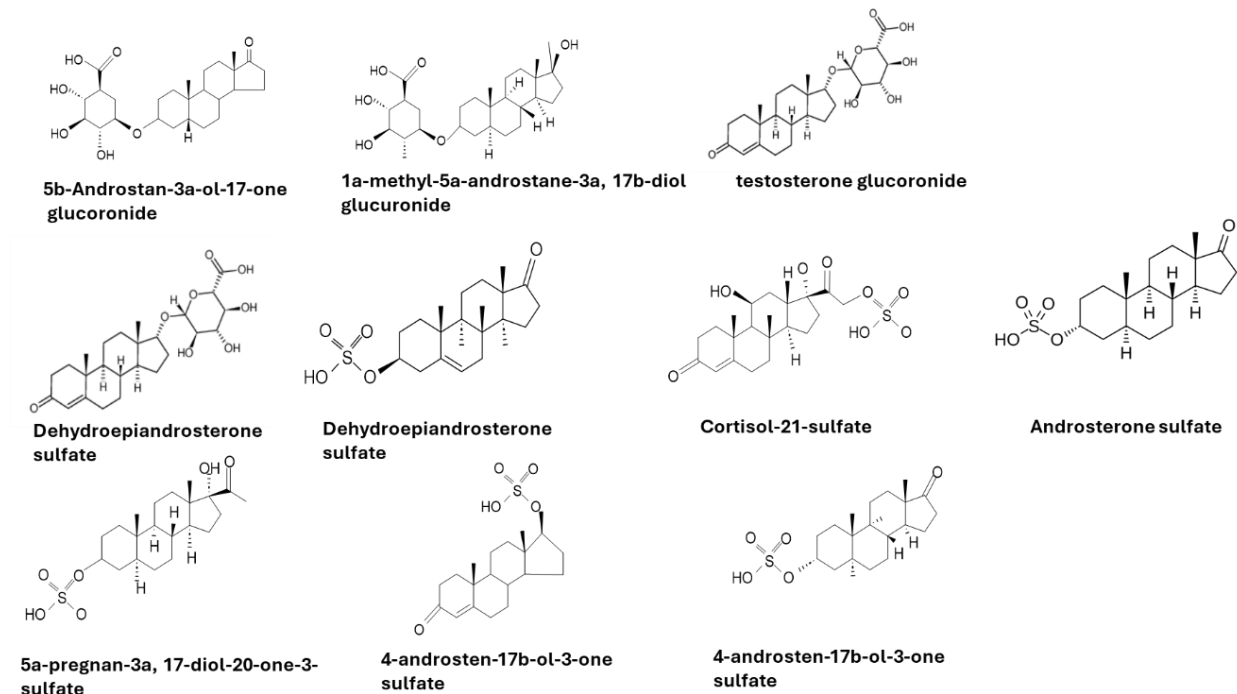


Figure 3.12 Stéroïdes conjugués extraits exclusivement avec la cartouche X-AW

L'analyse des temps de rétention a également souligné que les métabolites conjugués présentaient généralement des temps de rétention plus courts que les métabolites non conjugués, reflétant leur nature plus polaire. En conclusion, l'utilisation conjointe des cartouches C18 et X-AW permet une couverture analytique optimale des stéroïdes et leurs métabolites, en assurant une extraction efficace tant des composés non conjugués que des conjugués.

3.5.2 Impact du mode d'ionisation

Les molécules possédant des caractéristiques basiques peuvent être facilement ionisées en mode positif via un transfert de proton, tandis que les molécules possédant des groupes fonctionnels acides (et dépourvus de groupes basiques) donnent généralement de meilleurs spectres en mode négatif pour leur molécule déprotonée (Steckel et Schlosser, 2019). Par conséquent, la majorité des produits pharmaceutiques contiennent des groupes fonctionnels basiques (amines primaires, secondaires ou tertiaires, hétérocycles azotés), ce qui les rend facilement protonables lors de l'ionisation ESI. L'efficacité de l'ionisation électro-spray dépend fortement de plusieurs descripteurs moléculaires, dont la basicité ainsi que du pH du solvant et de la configuration instrumentale (Kiontke *et al.*, 2016). À un pH acide,

comme dans les conditions couramment utilisées en LC-HRMS, les molécules basiques sont plus facilement protonées, ce qui explique pourquoi les produits pharmaceutiques sont plus efficacement détectés en ESI (+) que dans d'autres modes. De plus, une étude antérieure (Oss *et al.*, 2010) a établi une échelle d'efficacité d'ionisation en ESI (+) pour différents composés organiques, démontrant que les substances les plus efficacement ionisées sont généralement des bases faibles à modérées, particulièrement celles contenant des amines secondaires ou tertiaires.

Prenant l'exemple de la venlafaxine, un antidépresseur de la classe des inhibiteurs de la recapture de la sérotonine et de la noradrénaline (IRSN) utilisé dans le traitement des troubles anxieux et dépressifs (Coutens *et al.*, 2022), sa structure moléculaire comporte une amine tertiaire cyclique (Figure 3.14), caractérisée par une forte affinité pour le proton lors du processus d'ionisation.

En revanche, certains médicaments possèdent des groupes fonctionnels acides (comme les groupes carboxyliques -COOH , les phénols -OH ou les sulfates $\text{-OSO}_3\text{H}$), qui peuvent facilement perdre un proton. Ces molécules peuvent donc être ionisées en mode négatif lors de l'analyse en spectrométrie de masse, sous forme $[\text{M-H}]^-$. La naproxène (Figure 3.15) est un exemple typique de médicament qui s'ionise en mode négatif grâce à la présence de son groupe acide carboxylique. Certains médicaments peuvent être ionisés aussi bien en mode positif qu'en mode négatif tels que : le diclofénac, l'ibuprofène, l'acide mycophénolique, l'acétaminophène, le telmisartan et le valsartan. L'exemple du valsartan est mis en évidence à la Figure 3.16. On les appelle les molécules ampholytes, alors le choix du mode d'ionisation dépend du pH de la solution et des paramètres du spectromètre de masse.

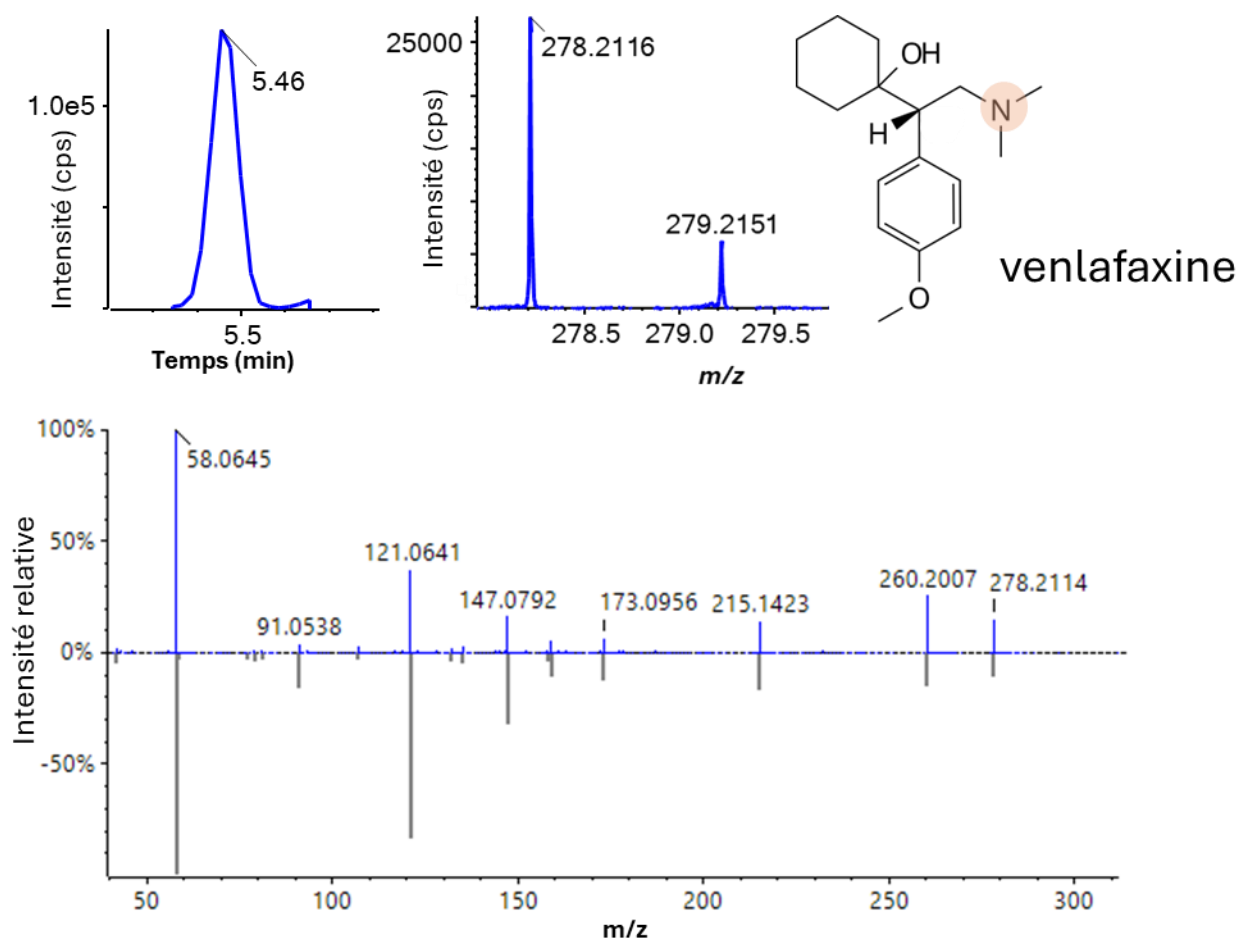


Figure 3.13 La venlafaxine est bien détectée en mode positif grâce à son amine tertiaire qui peut facilement être protonée. Cette figure montre son chromatogramme d'ions extraits de la molécule protonée à m/z 278.21, à un temps de rétention de 5.5 min. Le spectre MS/MS de nos données d'eaux usées correspond bien avec celui dans la base de données pour une bonne identification putative

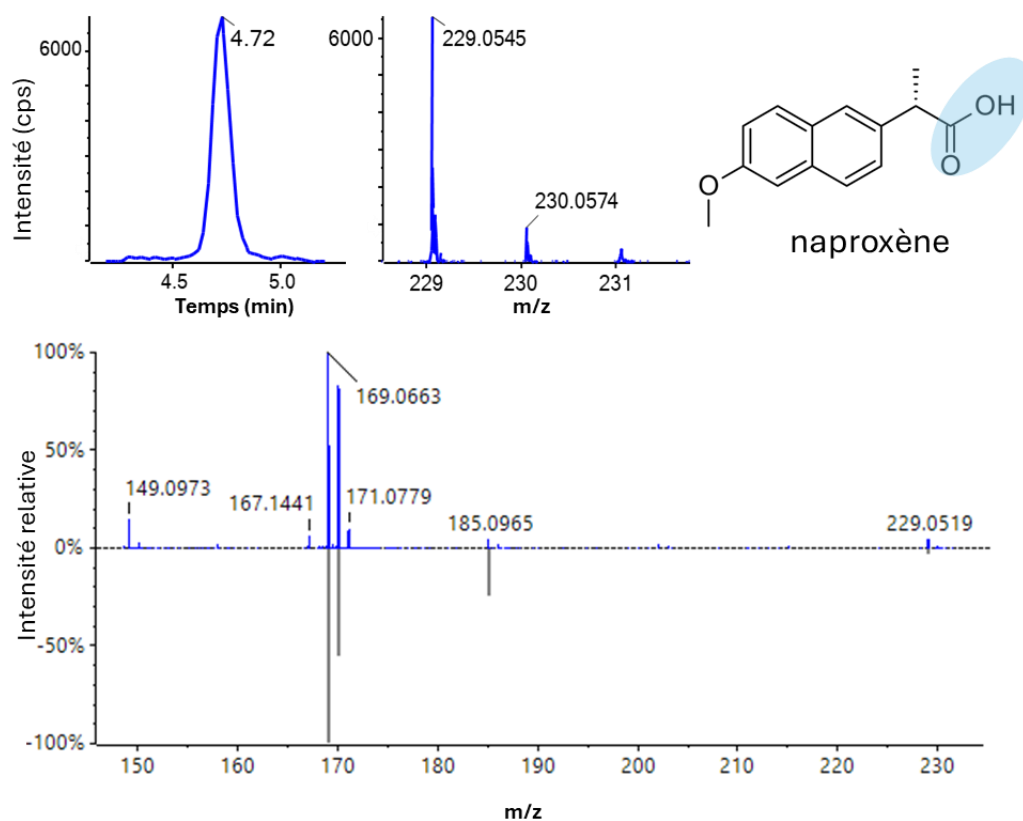


Figure 3.14 La naproxène est bien détectée en mode négatif grâce à son groupement d'acide carboxylique qui peut facilement être déprotonée. Cette figure montre son chromatogramme d'ions extraits de la molécule protonée à m/z 229.05, à un temps de rétention de 4.7 min. Le spectre MS/MS de nos données d'eaux usées correspond bien avec celui dans la base de données pour une bonne identification putative.

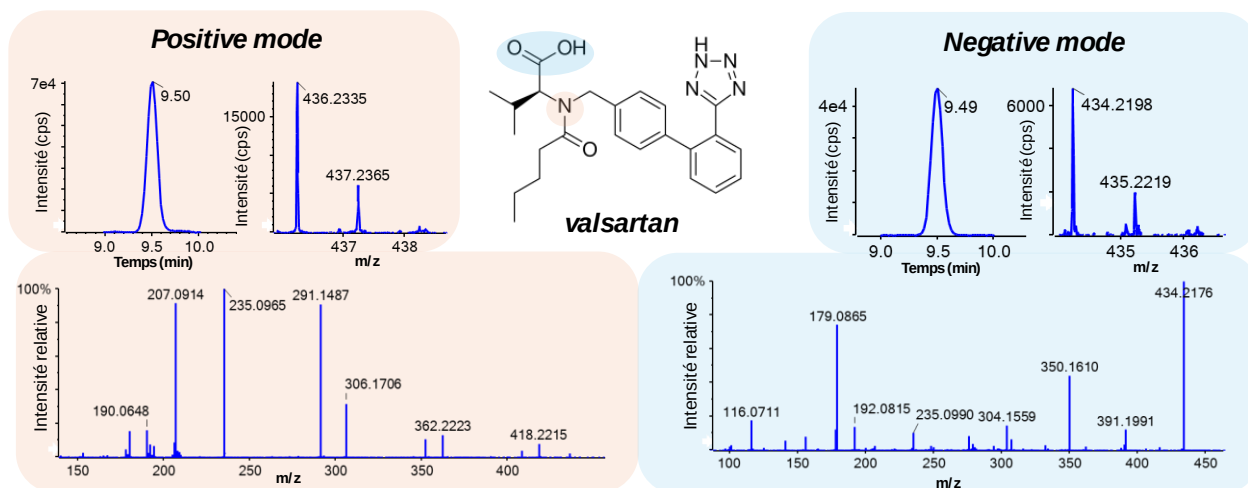


Figure 3.15 Le valsartan est bien détectée à 9.5 min en mode positif et négatif grâce à son amine tertiaire qui peut facilement être protonée, et son groupement d'acide carboxylique pouvant être déprotonée. Les spectres MS/MS résultants des deux modes ont plusieurs fragments divers utiles à confirmer sa structure par correspondance spectrale.

3.5.3 L'impact de la phase mobile

Il y a eu un impact important en mode négatif pour certains composés selon le pH de la phase mobile (pH~3 pour la méthode FA(-) et pH~7 avec la phase mobile aqueuse ayant 5 mM d'acétate d'ammonium). Pour montrer l'impact de la phase mobile, une comparaison a été réalisée pour le métabolite hydroquinone de butyle tertiaire sulfaté (TBHQ+SO₃), qui peut être formé via le métabolisme phase II du BHA ou le TBHQ (Ousji et Sleno, 2020). On voit un grand avantage à utiliser la méthode AmAc(-) pour ce composé, et plusieurs autres contaminants détectés dans nos échantillons d'eau. Comme le montre le chromatogramme (Figure 3.17, un net avantage est observé avec l'acétate d'ammonium, qui génère un signal environ trois fois plus intense comparé à celui obtenu avec l'acide formique 0.1%.

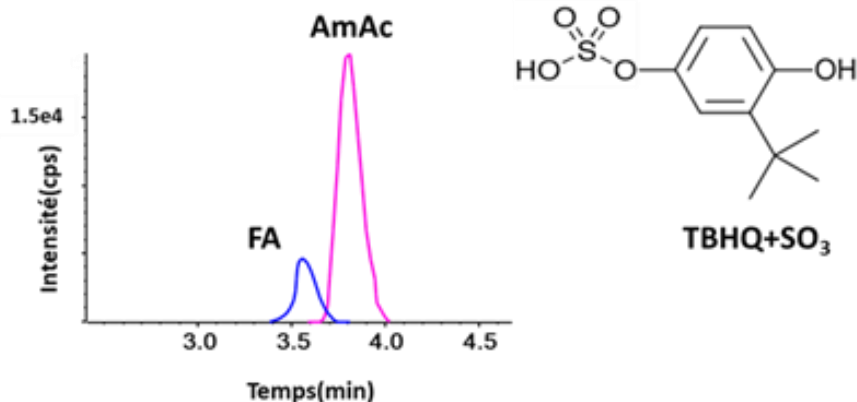


Figure 3.16 Chromatogramme extrait de la molécule déprotonée de TBHQ+SO₃ extrait par la cartouche X-AW comparant les deux phases mobiles utilisées en mode négatif

Ce gain en intensité s'accompagne également d'un pic plus étroit et plus symétrique, indiquant une meilleure efficacité de séparation chromatographique. Ces résultats s'expliquent par la nature acide du métabolite, qui favorise la déprotonation en mode négatif, mécanisme mieux pris en charge par l'acétate d'ammonium. Ce dernier, en tant que tampon volatil, optimise non seulement la désolvatation en ESI, mais stabilise également les formes anioniques du composé, améliorant ainsi la sensibilité et la reproductibilité de la détection.

En revanche, l'acide formique, bien qu'utilisé couramment même en mode négatif, est plus adapté aux analyses en mode positif, car il favorise la protonation des composés. Ces observations confirment l'importance du choix du modificateur de phase mobile selon le mode d'ionisation et la nature chimique du composé analysé. L'acétate d'ammonium apparaît ici comme la meilleure option pour la détection sensible et précise des métabolites sulfatés en mode négatif.

3.6 Variation temporelle des contaminants émergents

La composition chimique des eaux usées présente une variabilité temporelle significative, influencée par une combinaison de facteurs anthropiques, environnementaux et techniques. Les concentrations en contaminants émergents notamment les produits pharmaceutiques, cosmétiques, pesticides, métabolites évoluent en fonction de cycles hebdomadaires et saisonniers. Cette dynamique est étroitement corrélée aux modulations des activités humaines, à la variabilité des rejets industriels, ainsi qu'aux conditions

météorologiques, telles que les précipitations pouvant entraîner une dilution ou un ruissellement accru. L'analyse de ces variations permet d'évaluer non seulement les tendances d'exposition aux polluants, mais également la performance des procédés de traitement au cours du temps.

Le diagramme de barres à la Figure 3.18 présente la variation mensuelle niveaux de l'oxybenzone et de son métabolite déméthylé (oxybenzone-CH₂)(Guesmi *et al.*, 2020) dans les affluents et effluents des eaux usées de la grande région de Montréal. Ces deux composés, utilisés comme filtres UV dans de nombreux produits cosmétiques, montrent une forte saisonnalité, avec des concentrations nettement plus élevées durant les mois de printemps et d'été, de mai à août, période correspondant à une utilisation accrue de crèmes solaires.

Dans les affluents, l'oxybenzone est particulièrement abondant en été, ce qui reflète directement les habitudes de consommation. Bien que les concentrations diminuent après le traitement, la présence résiduelle dans les effluents indique une réduction modeste, suggérant que les procédés des eaux usées conventionnels ne permettent pas une bonne élimination de ce composé. Son métabolite présente un profil temporel très similaire.

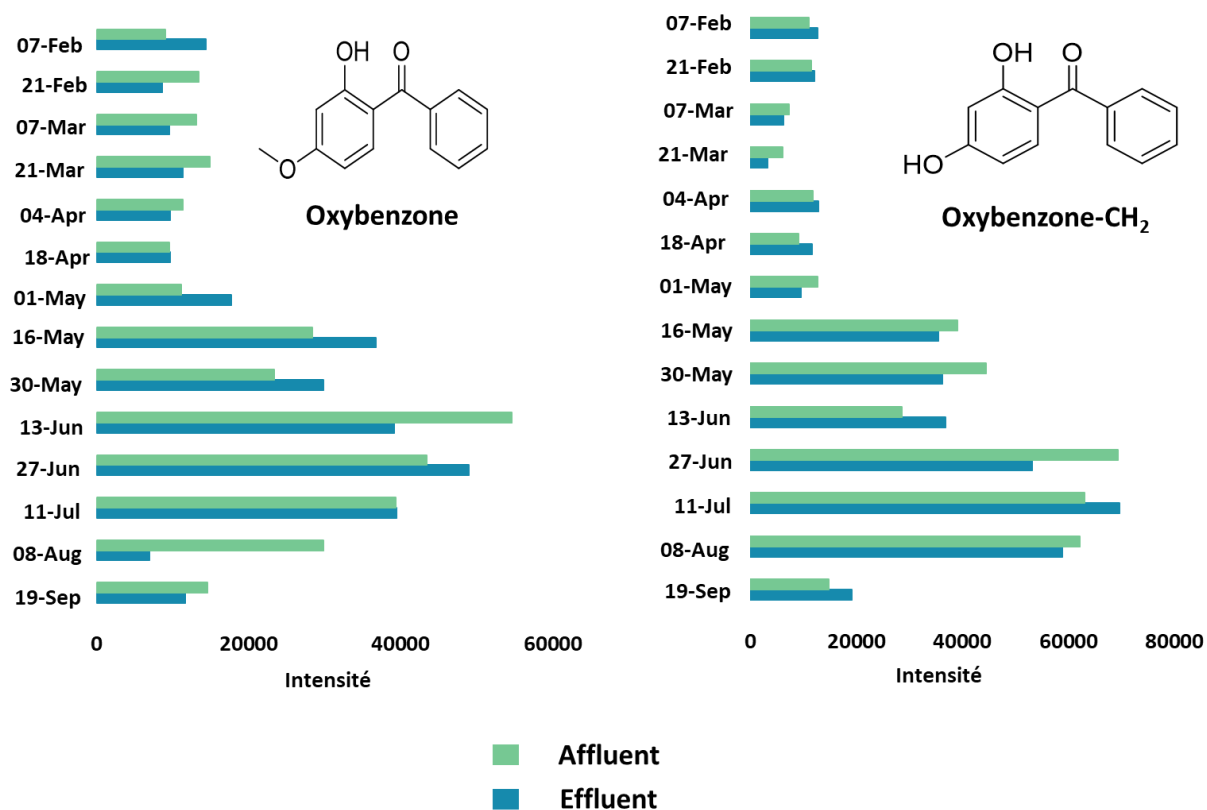


Figure 3.17 Profil temporel de l'oxybenzone et son métabolite déméthylé dans les eaux usées de la région métropolitaine de Montréal, détecté en mode positif avec la méthode d'extraction SPE C18

La Figure 3.19 illustre la variation mensuelle des concentrations relatives de DEET (*N,N*-diéthyl-méta-toluamide), un répulsif contre les insectes, dans les affluents et effluents des eaux usées. On observe une augmentation marquée des concentrations entre le printemps et la fin de l'été, avec un pic prononcé en juin, période correspondant à une utilisation accrue de produits antimoustiques en lien avec les activités extérieures estivales. Cette saisonnalité nette témoigne d'un usage dépendant des conditions climatiques.

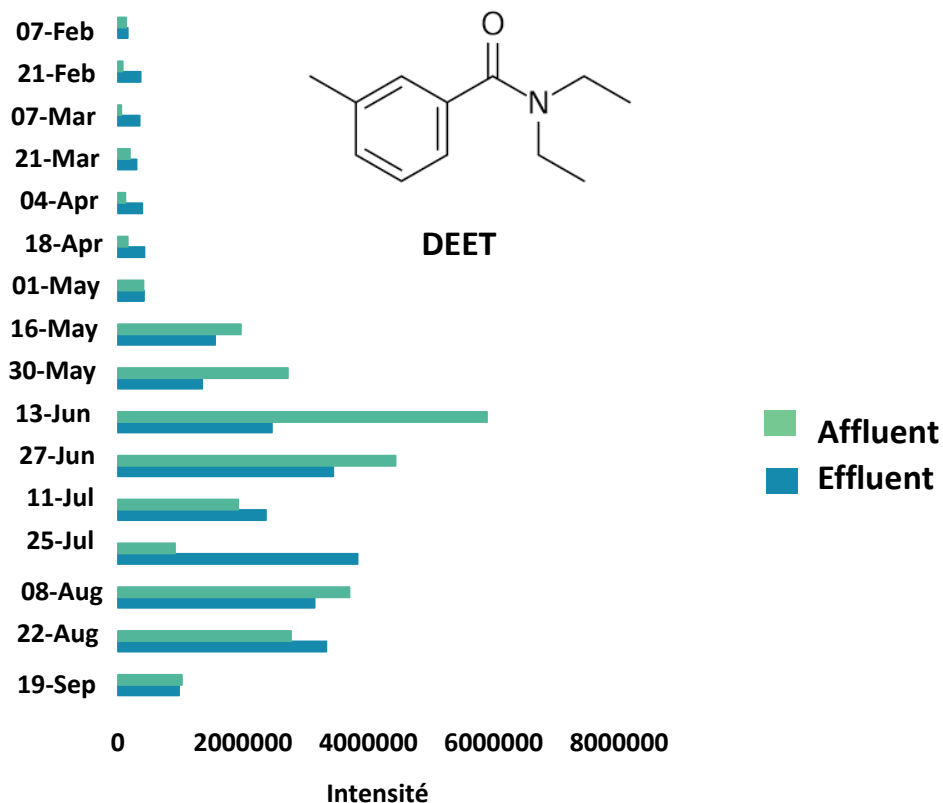


Figure 3.18 Profil temporel du DEET dans les affluents et effluents d’eaux usées de la région métropolitaine de Montréal

Nos données indiquent, en général, que le traitement physicochimique appliqué par la station ne permet pas de réduction significative de ce contaminant. Cette persistance suggère une certaine résistance du DEET aux procédés de coagulation-floculation, décantation ou filtration, typiques des traitements physicochimiques. La faible concentration hivernale observée de février à mars est cohérente avec l’absence d’utilisation du produit en période froide. L’ensemble des résultats souligne l’importance de considérer la saisonnalité et les caractéristiques physicochimiques des contaminants pour évaluer leur comportement dans les stations d’épuration et leur potentiel de rejet dans le milieu récepteur. Ces résultats mettent en évidence non seulement la variabilité temporelle des contaminants émergents, mais également la nécessité d’optimiser les procédés de traitement pour mieux prendre en charge les composés issus de l’usage saisonnier de produits de soins personnels.

3.7 Impact des traitements physico-chimiques sur le profil de contamination des eaux usées

Pour étudier l'impact des traitements physico-chimiques de la station d'épuration des eaux usées, nous avons combiné tous les données quantitatives (aires) pour tous les composés détectés avec chacun des méthodes d'extraction de d'analyses pour produire 6 graphiques d'analyse PCA non-supervisés (Figure 3.20). Les différents graphiques présentent les projections des échantillons selon les deux premières composantes principales (PC1 et PC2). Dans l'ensemble, aucune séparation évidente n'est observée entre les groupes "affluent" (points verts) et "effluent" (points rouges) sur l'ensemble des combinaisons de composantes principales. Les ellipses de confiance, représentant l'intervalle de dispersion de chaque groupe, montrent un chevauchement significatif, indiquant une forte similarité chimique entre les deux types d'échantillons dans l'espace multivariée définie par la PCA.

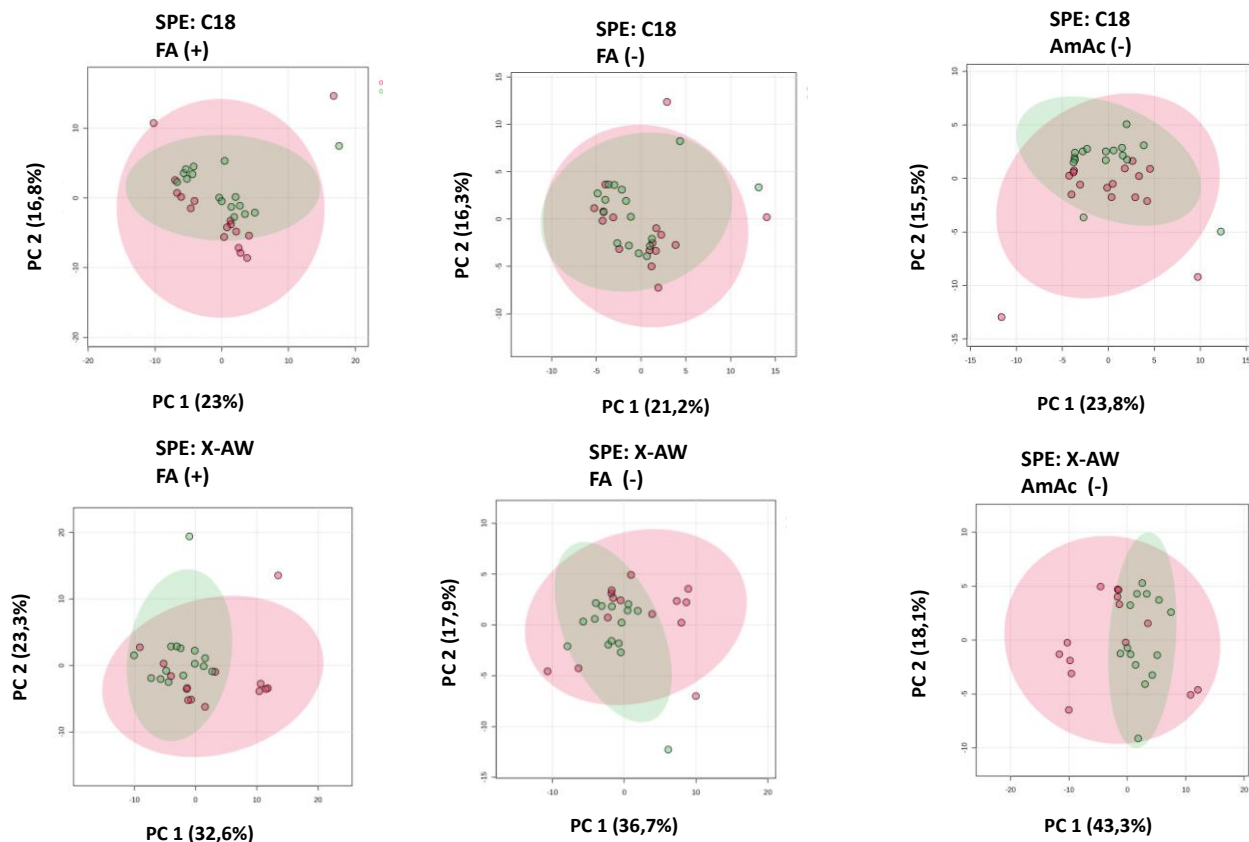


Figure 3.19 Analyse des composantes principales (PCA) des composés détectés par LC-HRMS/MS dans les eaux usées avant (affluent) et après traitement (effluent), selon la méthode de préparation des échantillons des eaux usées par extraction en phase solide

Cette absence de discrimination claire suggère que, sur la base des aires de pics globales issues de la LC-MS/MS, les différences entre effluents et effluents sont soit peu marquées, soit masquées par une variabilité intragroupe importante. Il est également possible que la majorité des composés détectés soient communs aux deux types d'échantillons, suggérant que le traitement des eaux usées n'a pas entraîné de modification majeure du profil global des composés détectés par LC-HRMS/MS. Cela peut refléter soit une efficacité limitée du traitement pour certains types de composés organiques, soit la présence persistante de métabolites ou sous-produits non éliminés. Une analyse plus ciblée des composés spécifiques serait nécessaire pour mieux évaluer les performances du traitement. En regardant les aires intégrées pour tous les composés détectés séparément, nous constatons qu'il n'y a aucun produit qui a une tendance de diminuer après le traitement physico-chimique. Ceci n'est pas si choquant car c'est un traitement initial qui ne détruit pas les composés organiques dans l'eau usée. Un traitement plus avancé ce fait aux usines de production d'eau potable. Le chapitre 4 abordera l'analyse des contaminants organiques détectés dans l'eau potable, avant et après traitement, dans six usines de production réparties dans la grande région de Montréal.

CHAPITRE 4

L'ANALYSE PAR LC-HRMS/MS NON-CIBLÉE D'ÉCHANTILLONS D'EAU POTABLE

Ce chapitre présente les résultats issus de l'analyse non ciblée de contaminants organiques dans des échantillons d'eau potable prélevés dans six usines de traitement desservant la grande région métropolitaine de Montréal, et ce, avant et après le traitement d'eau. Les prélèvements ont été effectués entre février et juin 2023, une fois par mois, et proviennent d'installations mettant en œuvre différents procédés de traitement de l'eau. À l'aide de ces échantillonnages variés, un but principal était d'évaluer s'il y a des différences marquées entre les usines et le mois de collecte. Cette diversité permet aussi de déterminer l'efficacité des traitements pour la réduction des contaminants.

Nous avons choisi dans le cas des eaux usées de se focaliser sur la préparation d'échantillons avec la même cartouche C18 que pour les eaux usées dans le chapitre 3, car cette méthode d'extraction nous donnait le plus de contaminants d'intérêts, incluant les médicaments, herbicides, et produits industriels. Les échantillons ont été analysés par LC-HRMS/MS suivant les mêmes trois méthodes (FA (+), FA (-), AmAc (-)). Les résultats ont permis de caractériser la diversité chimique des contaminants détectés dans les échantillons d'eau potable, en tenant compte des tendances temporelles, des différences entre sites de prélèvement, de l'efficacité des procédés de traitement, ainsi que de la présence possible de contaminations ponctuelles. Une comparaison avec les contaminants identifiés dans les eaux usées a également été intégrée afin d'évaluer la persistance ou l'élimination de certains composés au cours du traitement de l'eau potable. Dans ce chapitre, on se concentre sur une liste sélectionnée de contaminants d'intérêt retrouvés dans ces échantillons

4.1 Complémentarité des méthodes

Une comparaison des trois méthodes LC-HRMS/MS montre que la grande majorité des composés sélectionnés sont détectés en mode positif. Le diagramme de Venn (Figure 4.1) présente la distribution des composés sélectionnés comme contaminants potentiels parmi ceux détectés dans des échantillons d'eau potable, avec 28 des 34 composés identifiés à l'aide de cette méthode. Trois composés ont été détectés par l'ensemble des trois méthodes, et trois ont été partagés entre les deux méthodes en mode

négatif. Ces résultats montrent que l'application de conditions analytiques variées nous donnent accès à plus de contaminants, mais que si un choix devait être fait, le mode positif est celui à prioriser.

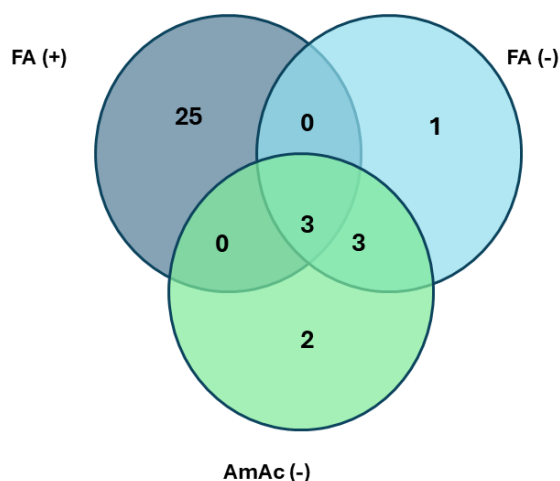


Figure 4.1 Répartition des contaminants selon trois méthodes analytiques

En comparaison, l'analyse d'échantillons d'eaux usées a permis la détection d'un nombre significativement plus élevé de contaminants potentiels, avec également un plus grand chevauchement entre les différentes méthodes analytiques pour ces mêmes catégories de contaminants que ceux identifiés dans les eaux potables. Cette différence s'explique en grande partie par la complexité chimique beaucoup plus importante des eaux usées, qui contiennent un large éventail de composés issus des activités domestiques, industrielles et pharmaceutiques. Elle peut également être attribuée à l'utilisation de deux cartouches SPE différentes pour l'extraction des eaux usées, ce qui favorise la détection de composés supplémentaires par rapport à une extraction réalisée uniquement avec une cartouche C18, comme c'est le cas pour les eaux potables.

4.2 Identification des contaminants détectés

Les 34 contaminants d'intérêt, qui ont été identifiés par l'analyse non-ciblée, sont présentés dans le Tableau 4.1, incluant majoritairement des médicaments et des composés industriels, ainsi que plusieurs métabolites de ces classes chimiques. Ces composés ont été détectés soit dans l'eau brute avant le traitement, soit dans l'eau traitée après le traitement, selon les sites et la période de prélèvement.

Douze médicaments ou leurs métabolites ont été détectés de différents usages, dont les antidépresseurs (venlafaxine, O-desmethylenlafaxine, dihydrobupropion), un antiépileptique (gabapentin), un antihistaminique (fexofenadine), un anti-psychotique (halopéridol), un anesthésique (lidocaïne), des antihypertenseurs (telmisartan, valsartan et l'acide métoprolol), un métabolite pour le traitement de TDAH (acide ritalinique), et un anti-fibrinolytique (acide tranexamique). La présence de ces substances suggère une contamination chronique pouvant provenir entre autres des effluents domestiques et hospitaliers. Dix-neuf composés détectés pourraient venir de divers produits industriels, incluant quatre pouvant être issu de la dégradation (ou le métabolisme) du BHT (butylated hydroxytoluene), un autre issu du métabolisme du TBHQ (t-butyl-hydroquinone) ou du BHA (butyl-hydroxyanisole), neuf herbicides (ou leurs métabolites), incluant ceux de l'atrazine, le métolachlore et l'acétochlore, un filtre UV (benzophenone), deux insecticides (DEET, etofenprox), un fongicide (tébuconazole) et un détergent (octyl-sulfate). Les trois composés restants sont des stimulants, la présence de la caféine ne nous surprend pas beaucoup, mais plus inquiétant est la présence de la cocaïne et son métabolite principal. De ces 34 composés, 21 entre eux ont été également détectés dans les échantillons d'eaux usées (chapitre 3). Il convient de noter qu'aucune hormone stéroïde n'a été détectée dans les échantillons d'eau potable, alors que nous en avons détecté un certain nombre dans les eaux usées, même en considérant l'utilisation uniquement de la cartouche SPE C18 pour l'analyse de l'eau potable.

Plusieurs substances ont été détectées exclusivement dans l'eau potable sans avoir été retrouvées dans les échantillons d'eaux usées. C'est notamment le cas de 13 composés: l'halopéridol, l'acide tranexamique, le détergent octyl sulfate, l'acétochlore ESA, trois métabolites de l'atrazine (l'atratone, l'atrazine désisopropylée (DIA), l'atrazine-2-hydroxy), l'etofenprox, le métolachlore et ses deux métabolites (ESA et OA), et le tebuconazole, ainsi que l'acide métoprolol (mais son précurseur métoprolol a été détecté dans les eaux usées). Cette détection exclusive dans l'eau potable pourrait s'expliquer par plusieurs facteurs tel que des concentrations trop faibles dans les eaux usées pour être détectées, des apports différenciés dans l'environnement (infiltration, ruissellement, pollution agricole), ou encore la formation ou la persistance accrue de certains composés dans les milieux naturels ou dans les réseaux de distribution. Il est également probable que certains de ces composés soient des métabolites ou produits de transformation formés en aval des stations d'épuration.

Tableau 4.1 Contaminants sélectionnés détectés par LC-HRMS/MS dans l'eau potable

#	Nom	Formule	Masse neutre exacte (Da)	RT (min)	LC-MS	Autres informations
1	3,5-Di-tert-butyl-2-hydroxybenzaldehyde (BHT-aldehyde)	C ₁₅ H ₂₂ O ₂	234,1620	11,0	FA(+), FA(-), AmAc(-)	Métabolite de BHT (butylated hydroxytoluene)
2	3,5-Di-tert-butyl-4-hydroxybenzoic acid (BHT-acid)	C ₁₅ H ₂₂ O ₃	250,1569	9,8	FA(+), FA(-)	Métabolite de BHT
	3,5-Di-tert-butyl-4-hydroxybenzoic acid (BHT-acid)	C ₁₅ H ₂₂ O ₃	250,1569	6,9	AmAc(-)	Métabolite du BHT
3	Acetochlor ESA	C ₁₄ H ₂₁ NO ₅ S	315,1140	5,7	FA(-)	Métabolite d'acetochlor (herbicide)
	Acetochlor ESA	C ₁₄ H ₂₁ NO ₅ S	315,1140	4,1	AmAc(-)	Métabolite d'acetochlor (herbicide)
4	Atralone	C ₉ H ₁₇ N ₅ O	211,1433	3,3	FA(+)	Métabolite de l'atrazine
5	Atrazine	C ₈ H ₁₄ ClN ₅	215,0938	6,7	FA(+)	Herbicide
6	Atrazine-desisopropyl	C ₉ H ₈ ClN ₅	173,0468	2,8	FA(+)	Métabolite de l'atrazine
7	Atrazine-2-hydroxy	C ₈ H ₁₅ N ₅ O	197,1300	3,0	FA(+)	Métabolite de l'atrazine
8	Atrazine-desethyl	C ₆ H ₁₀ ClN ₅	187,0625	3,8	FA(+)	Métabolite de l'atrazine
9	Benzophenone	C ₁₃ H ₁₀ O	182,0732	9,4	FA(+)	UV-filtre, additif soins personnels
10	Benzoylcegonine	C ₁₆ H ₁₉ NO ₄	289,1314	4,0	FA(+)	Métabolite de cocaïne
11	BHT+O	C ₁₅ H ₂₄ O ₂	236,1776	9,5	AmAc(-)	Métabolite du BHT
12	Caffeine	C ₈ H ₁₀ N ₄ O ₂	194,0804	3,5	FA(+)	Stimulant (café, thé, boissons énergisantes)
13	Cocaine	C ₁₇ H ₂₁ NO ₄	303,1471	5,2	FA(+)	Stimulant, drogue illicite
14	2,4-di-tert-butylphenol (DBP)	C ₁₄ H ₂₂ O	206,1671	6,4	AmAc(-)	Métabolite du BHT
15	diethyltoluamide (DEET)	C ₁₂ H ₁₇ NO	191,1310	7,3	FA(+)	répulsif anti-insect
16	Dihydrobupropion	C ₁₃ H ₂₀ ClNO	241,1233	5,1	FA(+)	Métabolite de bupropion (antidépresseur)
17	Etofenprox	C ₂₅ H ₂₈ O ₃	376,2038	4,0	FA(+)	Insecticide
18	Fexofenadine	C ₃₂ H ₃₉ NO ₄	501,2879	8,4	FA(+)	Antihistaminique
19	Gabapentin	C ₉ H ₁₇ NO ₂	171,1259	3,8	FA(+)	Antiépileptique, douleur neuropathique
20	Haloperidol	C ₂₁ H ₂₃ ClFNO ₂	375,1401	7,3	FA(+)	Antipsychotique typique
21	Lidocaïne	C ₁₄ H ₂₂ N ₂ O	234,1732	3,3	FA(+)	Anesthésique local
22	Metolachlor	C ₁₅ H ₂₂ ClNO ₂	283,1339	9,8	FA(+)	Herbicide
23	Metolachlor ESA	C ₁₅ H ₂₃ NO ₅ S	329,1297	5,8	FA(+), FA(-)	Métabolite de metolachlor (herbicide)

	Metolachlor ESA	$C_{15}H_{23}NO_5S$	329,1297	4,2	AmAc(-)	Métabolite de metolachlor (herbicide)
24	Metolachlor OA	$C_{15}H_{21}NO_4$	279,1471	6,7	FA(+)	Métabolite de metolachlor (herbicide)
25	Metoprolol acid	$C_{14}H_{21}NO_4$	267,1471	2,7	FA(+)	Métabolite Metoprolol
26	n-Octyl sulfate	$C_8H_{18}O_4S$	210,0926	4,0	AmAc(-)	Détergent
	n-Octyl sulfate	$C_8H_{18}O_4S$	210,0926	6,0	FA(-)	Détergent
27	O-Desmethylvenlafaxine	$C_{16}H_{25}NO_2$	263,1885	3,8	FA(+)	Métabolite venlafaxine (antidépresseur)
28	Ritalinic acid	$C_{13}H_{17}NO_2$	219,1259	3,6	FA(+)	Métabolite du méthylphénidate (TDAH)
29	TBHQ+SO3	$C_{10}H_{14}O_5S$	246,0562	3,9	AmAc(-)	Métabolite du TBHQ (ou BHA)
	TBHQ+SO3	$C_{10}H_{14}O_5S$	246,0562	6,0	FA(-)	Métabolite du TBHQ (ou BHA)
30	Tebuconazole	$C_{16}H_{22}ClN_3O$	307,1451	9,6	FA(+)	Fongicide
31	Telmisartan	$C_{33}H_{30}N_4O_2$	514,2369	8,7	FA(+)	Antihypertenseur
32	Tranexamic acid	$C_8H_{15}NO_2$	157,1103	2,7	FA(+)	Antifibrinolytique
33	Valsartan	$C_{24}H_{29}N_5O_3$	435,2270	9,3	FA(-)	Antihypertenseur
34	Venlafaxine	$C_{17}H_{27}NO_2$	277,2042	5,4	FA(+)	Antidépresseur

4.3 Études des variations de détections selon les usines et le mois de collecte

Dans le but d'évaluer la répartition et la fréquence des contaminants détectés dans les différentes usines, une carte thermique a été produite utilisant les aires normalisées pour chacun de ces 34 composés, pour les trois méthodes d'analyse combinées (Figure 4.2). Celle-ci permet de visualiser les tendances de présence des composés dans les échantillons d'eau brute et d'eau traitée, collectés sur plusieurs mois. Cette représentation met en évidence les différences de profils avec le traitement ainsi qu'entre les différents sites de production, ou selon la date d'échantillonnage. Plusieurs tableaux figurent en annexe B, présentant les composés détectés dans les échantillons d'eau potable brute et traitée, ainsi que les aires des pics normalisés.

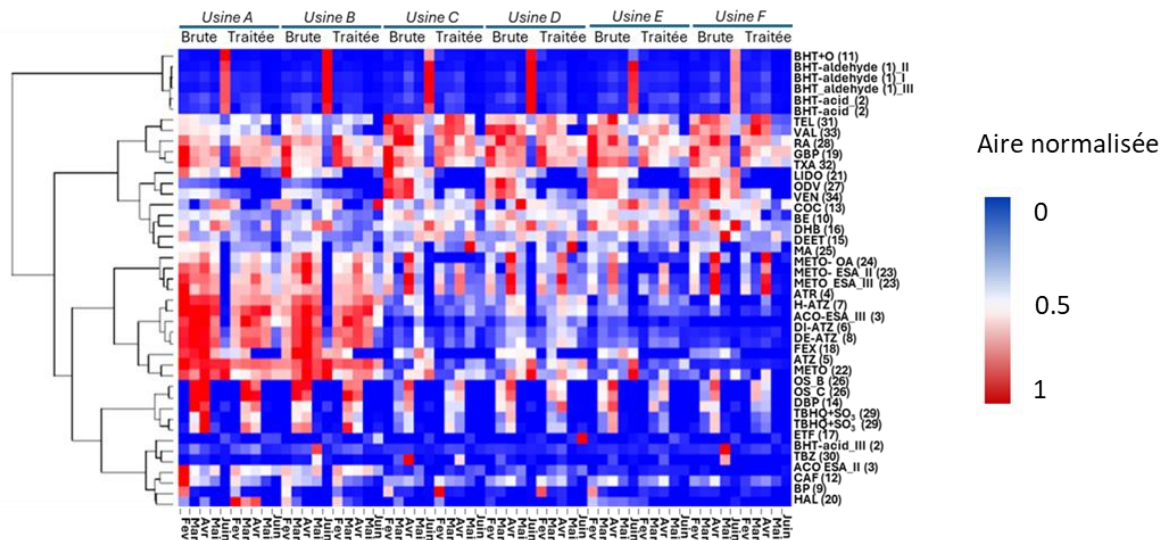


Figure 4.2 Carte thermique des contaminants détectés dans les eaux brutes et traitées de six usines de production d'eau potable, collecté mensuellement entre février et juin 2023, inclusivement. Les chiffres entre parenthèses correspondent aux contaminants dans le Tableau 4.1. Pour certains composés qui ont été détecté par plusieurs méthodes, cela est indiqué par I-III, où I correspond à la méthode FA (+), II à FA (-) et III à AmAc (-). Le générateur de cartes thermiques HG-CHM (MD Anderson Cancer Center) a été utilisé pour générer des représentations de cartes thermiques de ces données (Ryan *et al.*, 2019)

Cette carte thermique nous permet de voir certaines tendances dans les données quantitatives et les regroupements de certains composés qui semblent fluctuer de manière semblable. Dans les sous-sections suivantes, nous discutons des tendances et des familles de composés d'intérêt.

4.4 Atrazine et ses métabolites

La carte thermique (Figure 4.2) révèle un regroupement de l'atrazine (ATZ) avec ses métabolites : la DE-ATZ (desethyl-atrazine), la DI-ATZ (desisopropyl-atrazine), la H-ATZ (2-hydroxy-Atrazine), et l'ATR (atratone), suggérant une similarité dans leurs profils de distribution au sein des échantillons analysés. Cette observation s'explique par les voies de transformation connues de l'atrazine dans l'environnement. L'une des principales consiste des désalkylations (pour produire le DE-ATZ et le DI-ATZ) ou du remplacement du chlore par un groupement hydroxylé ou méthoxyle, menant à la formation de la H-ATZ ou l'ATR. La plupart de ces métabolites ont été étudié par notre groupe de recherche, incluant des études de fragmentation MS/MS pour confirmer leur structure (LeBlanc et Sleno, 2011) et plus récemment en collaboration pour l'étude de la dégradation de l'atrazine (Levesque-Vargas *et al.*, 2025). L'atratone, quant à elle, est une triazine utilisée comme herbicide et structurellement proche de l'atrazine. Toutefois, elle est également considérée comme un métabolite secondaire de cette dernière, résultant de la méthylation de l'OH-ATZ. Cette double origine rend son interprétation plus complexe dans les analyses environnementales, puisque sa détection peut refléter soit un emploi direct, soit une transformation de l'atrazine dans le milieu naturel. Dans le cadre de cette étude, l'ATR a été considérée comme un métabolite de l'atrazine, au même titre que le DE-ATZ, la DI-ATZ et le H-ATZ, car l'utilisation de l'atrazine est bien établie dans les régions agricoles au Canada (Canada, 2011). Sa contamination de nos eaux potables est aussi bien connue (Montiel-León *et al.*, 2019).

La tendance de la détection de l'ATZ et de ses métabolites dans les eaux brutes et traitées de six usines de traitement met en évidence des profils de contamination contrastés. Le graphique (Figure 4.3) illustre clairement ces variations, en montrant des différences marquées selon les sites et les étapes de traitement, reflétant à la fois l'origine de l'eau captée et l'efficacité variable des procédés de traitement appliqués. Les concentrations élevées observées dans les usines A et B, géographiquement proches et soumises à des traitements similaires, révèlent une contamination commune de leur source d'eau brute ainsi qu'une efficacité limitée des procédés pour éliminer l'atrazine et ses métabolites. À l'inverse, l'usine F présente des concentrations très faibles, voire négligeables, dans l'eau brute comme dans l'eau traitée. Cette situation reflète une source d'alimentation peu impactée par les activités agricoles. En générale, l'absence

de différence claire entre les concentrations avant et après traitement indique une efficacité limitée du procédé utilisé de traitement.

Une augmentation progressive des concentrations d'atrazine dans l'eau brute est également constatée au fil des mois dans les usines C, D et E, reflétant vraisemblablement une pression saisonnière liée à l'usage agricole de cet herbicide dans les bassins versants alimentant ces installations. Enfin, les profils de répartition des métabolites DE-ATZ, DI-ATZ, H-ATZ et ATR sont globalement similaires à celui de l'atrazine dans l'ensemble des usines, confirmant leur origine commune par dégradation et leur persistance dans les milieux aquatiques. Leur présence dans l'eau traitée atteste également de la difficulté à éliminer ces composés par les procédés conventionnels de traitement.

La méthode chromatographique a permis de séparer efficacement l'atrazine et ses principaux métabolites dans l'eau brute et traitée (Figure 4.4). Les composés sont bien résolus avec des pics distincts. Nous pouvons encore constater avec cette figure que les intensités de pics ne changent pas après le traitement de l'eau brute, et ce pour chacune de ces molécules. L'ATZ présente un temps de rétention de 6.7 minutes, ce qui correspond au pic le plus tardif parmi les composés analysés, traduisant une polarité plus faible. Les métabolites, plus polaires, sont élués plus tôt dans l'ordre suivant : DI-ATZ, H-ATZ, ATR et DE-ATZ. L'identification de l'atrazine et ses métabolites a été confirmée avec l'analyse des spectre MS/MS (Figure 4.5) conformément aux fragmentations spécifiques des groupement alkylés et chloré.

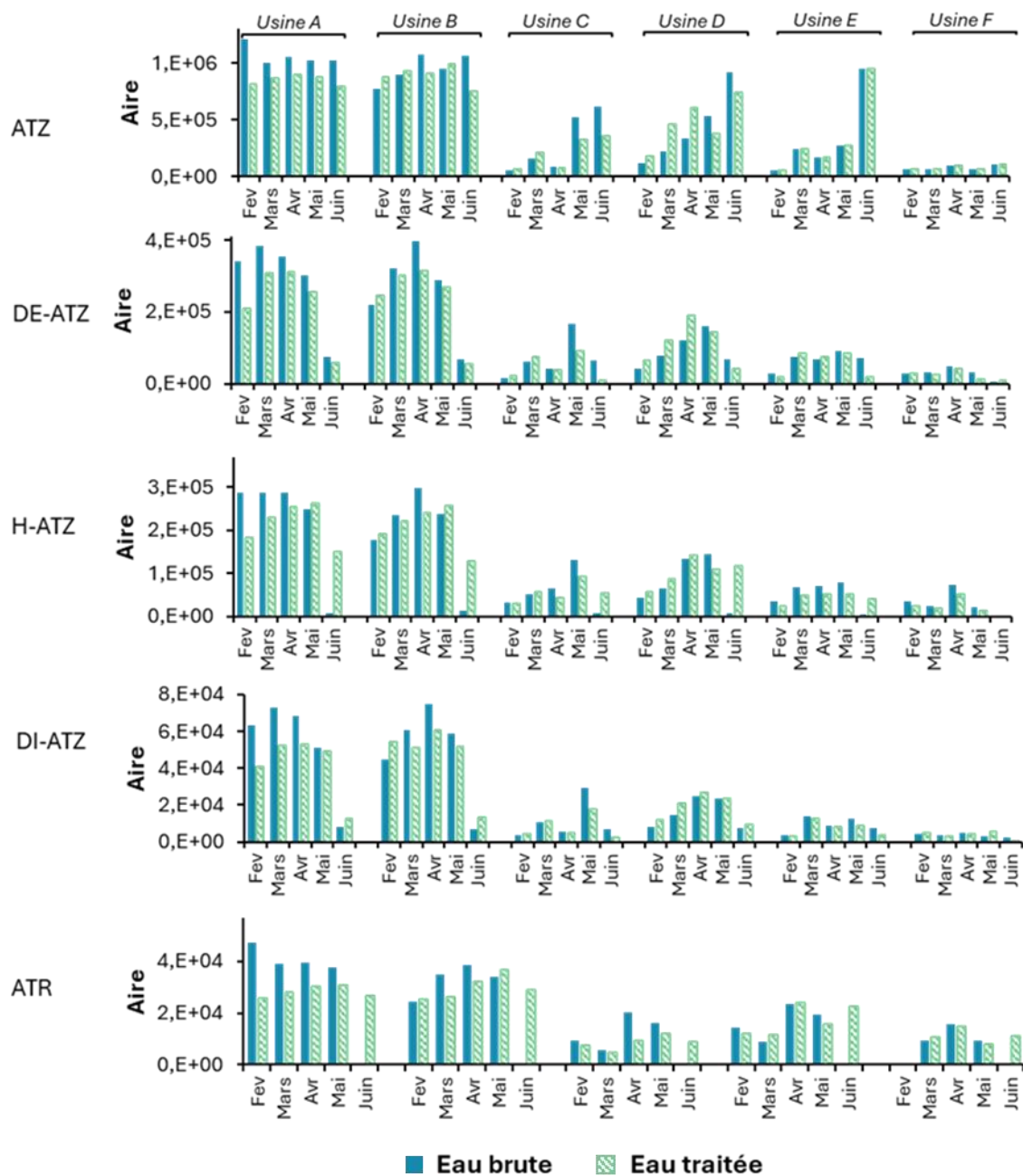


Figure 4.3 Distribution des aires pour l'atrazine (ATZ) et ses métabolites DE-ATZ, DI-ATZ, H-ATZ et ATR. La méthode analytique utilisée est FA (+)

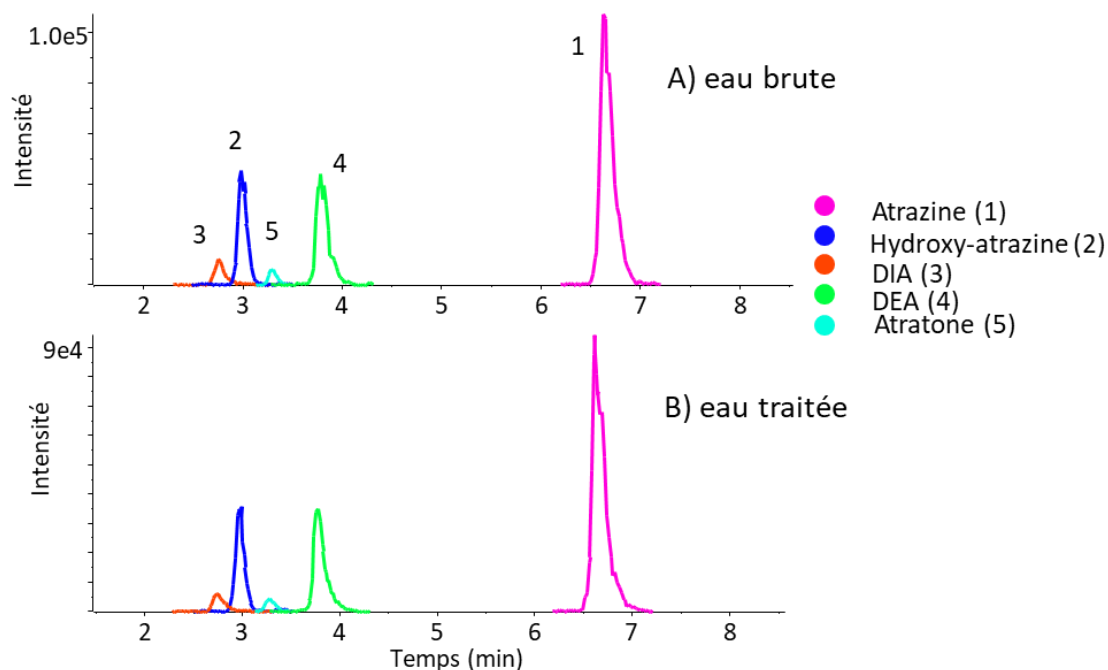


Figure 4.4 Chromatogramme représentatif de l'atrazine et ses métabolites dans l'eau potable brute (A) et traitée (B) provenant de l'usine A en mars 2022 suivant l'analyse avec la méthode LC-HRMS/MS FA (+)

Les spectres MS/MS de l'atrazine et ses métabolites issus de nos analyses d'eaux usées sont présentés à la Figure 4.5. Le spectre de l'atrazine révèle des fragments caractéristiques résultant de la perte de groupements fonctionnels spécifiques, notamment la perte de l'isopropyle ($-C_3H_6$), formant l'ion à m/z 174,0532. Ce fragment subit ensuite une perte du groupement éthyle ($-C_2H_4$), générant l'ion à m/z 146,0212, lequel se fragmente davantage par élimination de HCl, produisant un ion à m/z 103,9999. Ces pertes successives, en parfaite concordance avec les schémas de dissociation rapportés (LeBlanc 2011), confirment de manière fiable la présence de l'atrazine. Dans le cas de l'hydroxyatrazine (H-ATZ), l'analyse MS/MS révèle des pertes des groupements isopropyle ($-C_3H_6$) et éthyle ($-C_2H_4$), conduisant respectivement à m/z 156,0873 et 128,0805. La présence de ces ions confirme la conservation partielle de la structure de l'atrazine parentale après hydroxylation. Contrairement à l'atrazine, aucune perte de HCl n'est observée, en accord avec le remplacement du groupement chlore par une fonction hydroxyle ($-OH$). Les spectres MS/MS obtenus de la DI-ATZ et le DE-ATZ révèlent deux fragments majeurs caractéristiques, m/z 146 et 110, résultant de la perte du groupement éthyle ($-C_2H_4$), suivi de la perte d'un acide chlorhydrique (HCl) pour DI-ATZ alors ces fragments correspondent plutôt à une perte du groupement isopropyle ($-C_3H_6$) suivie de la perte de HCl pour DE-ATZ. Finalement, le spectre MS/MS de l'atratone présente une fragmentation

caractéristique débutant par la perte du groupement isopropyle ($-C_3H_6$), générant un fragment à m/z 170.1034 suivi d'une perte secondaire du groupement éthyle ($-C_2H_4$), conduisant à un ion à m/z 142.0727.

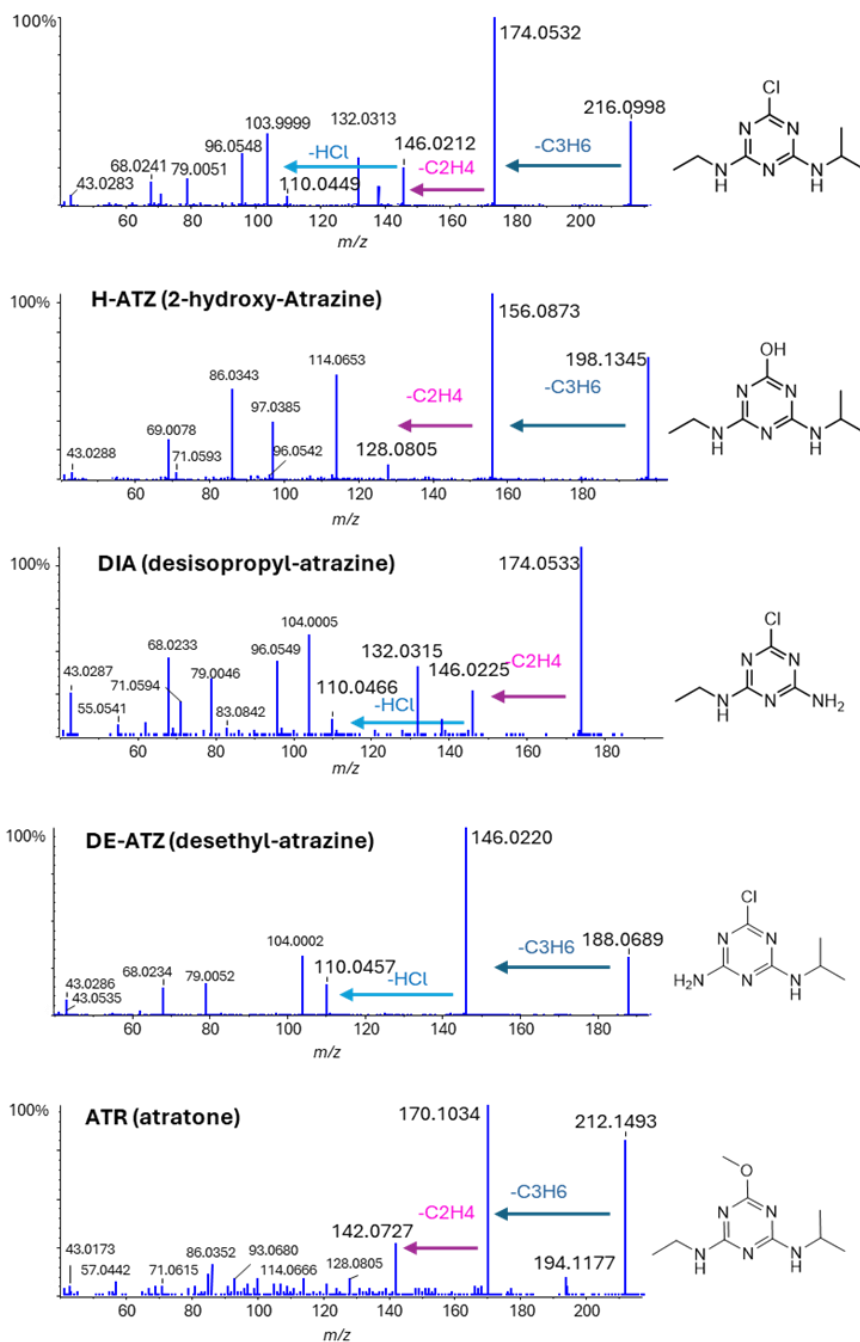


Figure 4.5 Spectres MS/MS de l'atrazine et ces quatre métabolites retrouvés dans les échantillons d'eau potable. Leur fragmentation confirme leurs structures différentes, avec la perte des groupement alkylé (éthyl et isopropyl) ainsi qu'une perte de la molécule HCl si le chlore est présent sur la molécule

4.5 Les chloroacétanilides

Une autre série de molécules qui se regroupaient dans la carte thermique de façon semblable à l'atrazine et ses métabolites inclut la métolachlore, la métolachlore-OA, la métolachlore-ESA et l'acétochlore ESA (Figure 4.2). Les herbicides de la famille des chloroacétanilides, tels que le métolachlore et l'acétochlore, sont largement utilisés en agriculture pour le contrôle des mauvaises herbes. Dans les sols, ces substances sont principalement dégradées par l'activité microbienne, mais également par photolyse (Zemolin et al., 2014). Ces processus conduisent chacun de ces deux composés parents à se dégrader en dérivés d'acide éthane sulfonique (ESA) et d'acide oxanilique (OA) (Figure 4.6). La transformation en métachlore ESA passe notamment par une réaction de déchloration, suivie de l'ajout d'un groupe sulfonique, ce qui confère aux métabolites une solubilité dans l'eau bien supérieure à celle des composés parentaux. En raison de cette solubilité accrue, les métabolites ESA et OA sont facilement entraînés par lessivage et se retrouvent fréquemment dans les eaux de surface ainsi que dans les nappes phréatiques. Une fois présents dans ces milieux aquatiques, leur persistance est importante, car leur biodégradation est très limitée, ce qui augmente leur potentiel de contamination à long terme (Postle *et al.*, 2004).

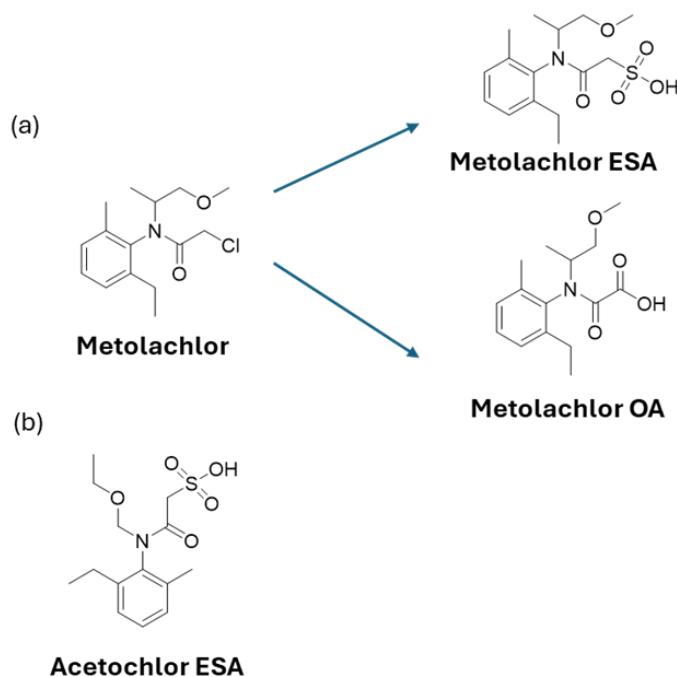


Figure 4.6 Les structures chimiques de la métolachlore et ses métabolites (ESA et OA) (a) ainsi que la structure de l'acétochlore ESA (b), retrouvés dans les eaux potables

Le graphique (Figure 4.7) illustre la distribution des aires pour le métachlore et ses métabolites et le métabolite de l'acétochlore. Le graphique met en évidence une présence plus marquée du métolachlore dans les usines A et B, avec des concentrations relativement élevées en amont comme en aval du traitement, suggérant une élimination peu efficace de ce contaminant dans ces deux sites. À l'inverse, les usines C, D, E et F présentent des concentrations plus faibles en eau brute, ce qui reflète une contamination environnementale moins importante. Cette observation est similaire à celle faite pour l'atrazine, suggérant une pression agricole plus faible dans les zones de captage desservies par ces usines. Parmi celles-ci, seule l'usine F montre une élimination efficace du métolachlore, en particulier durant les mois de mars, mai et juin, comme l'indiquent les réductions notables entre les eaux brutes et traitées. La performance supérieure de l'usine F peut être attribuée à l'utilisation de l'ozonation comme étape de traitement. En plus de son rôle bien établi en tant que désinfectant, l'ozone est un oxydant puissant capable de réagir avec de nombreux micropolluants organiques. L'ozone seul favorise principalement une oxydation partielle des composés récalcitrants, contribuant probablement à la réduction des concentrations de métolachlore observée dans les eaux traitées (Derco *et al.*, 2015).

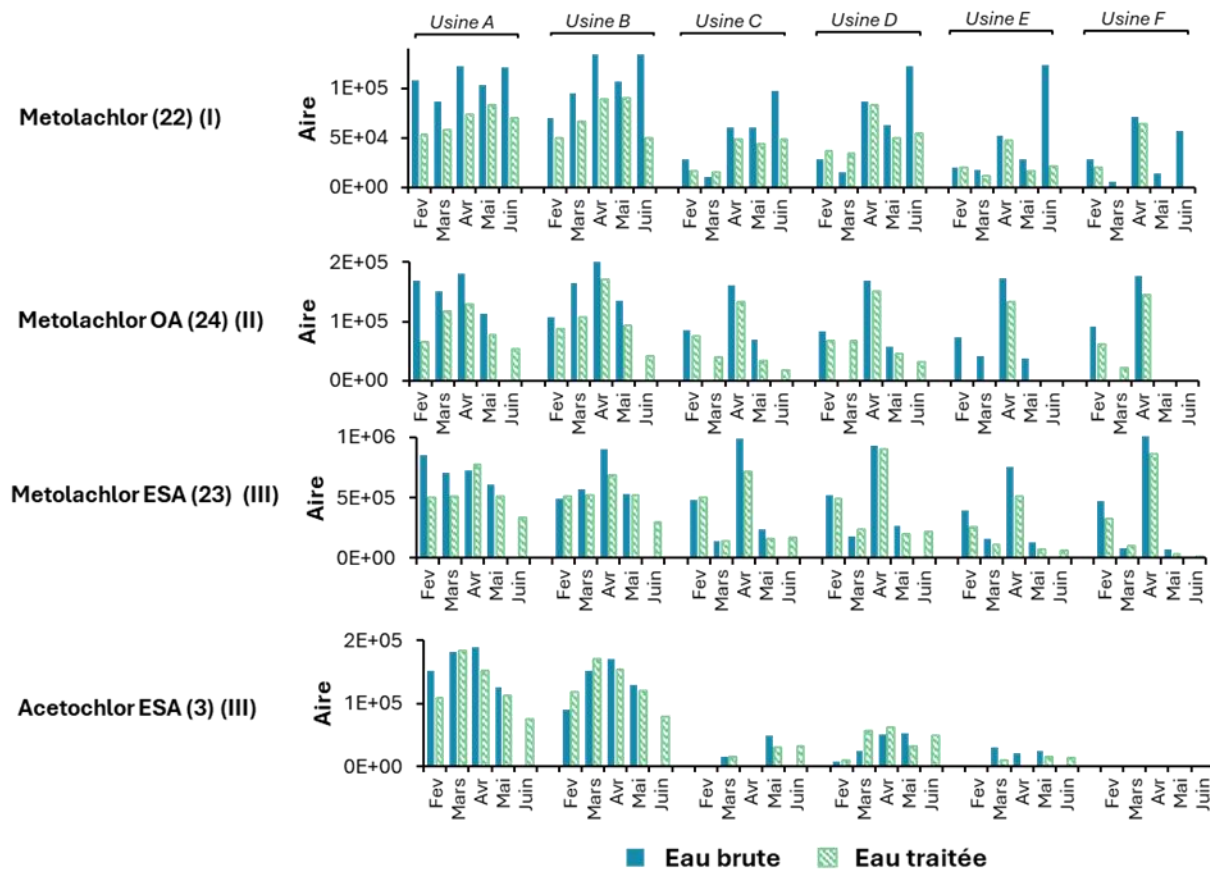


Figure 4.7 Distribution des aires de pics chromatographiques des ions extraits pour le métolachlore, ses deux métabolites et un métabolite de l'acétachlore. Les méthodes d'analyses sont indiquées après les noms de chaque composé (I: FA (+), II: FA (-), III: (AmAc (-)). Ces produits montrent une persistance même après le traitement de l'eau potable.

Les deux métabolites du métachlore, ESA et OA, présentent des profils de distribution très similaires. Ils sont détectés dans les eaux brutes et traitées sans réduction significative, avec des concentrations plus élevées dans les échantillons venant des usines A et B, sauf pour le mois d'avril qui est semblablement haute pour toutes les usines. Ce comportement est cohérent avec leur caractère hydrophile et leur persistance dans les milieux aquatiques. Le métolachlore OA n'est pas détecté dans l'eau traitée de l'usine E, à l'exception du mois d'avril. Cette absence pourrait être liée à l'utilisation d'une étape de pré-ozonation, laquelle contribuerait à la réduction des concentrations de ce composé lors du traitement de l'eau brute. L'acétochlore ESA a été majoritairement détecté dans les échantillons des usines A et B, avec des concentrations similaires entre l'eau brute et l'eau traitée. À l'inverse, les usines C, D et E présentent des

niveaux beaucoup plus faibles, traduisant une contamination environnementale réduite. Aucun acétochlore ESA n'a été détecté dans l'usine F, ce qui suggère une absence locale d'utilisation ou de transfert de cette substance.

4.6 Les antioxydants industriels

Un regroupement des métabolites de BHT peut être observé dans la carte thermique de la Figure 4.2, tandis qu'une autre tendance est observée pour le TBHQ+SO₃ et le DBP (2,4-di-t-butylphénol). Il est possible de remarquer que le composé parent, le BHT (butylhydroxytoluène), n'a pas été détecté dans les échantillons. Le BHT subit une dégradation par oxydation facile, ce qui explique son absence fréquente dans les matrices biologiques ou environnementales. Cette observation a été confirmée par notre équipe de laboratoire dans le cadre d'une étude de métabolisme in vitro publiée (Ousji et Sleno, 2020). Le BHT est rapidement oxydé, ce qui conduit à la formation de métabolites intermédiaires tels que le BHT hydroxylé (BHT+O), BHT-aldéhyde, le BHT-acide (Figure 4.8). Leur tendance est assez unique dans le fait qu'il y a des niveaux beaucoup plus hauts dans tous les échantillons collectés en juin des six usines, mais seulement pour les eaux brutes. Ça nous suggère que le traitement est efficace pour enlever ces contaminants.

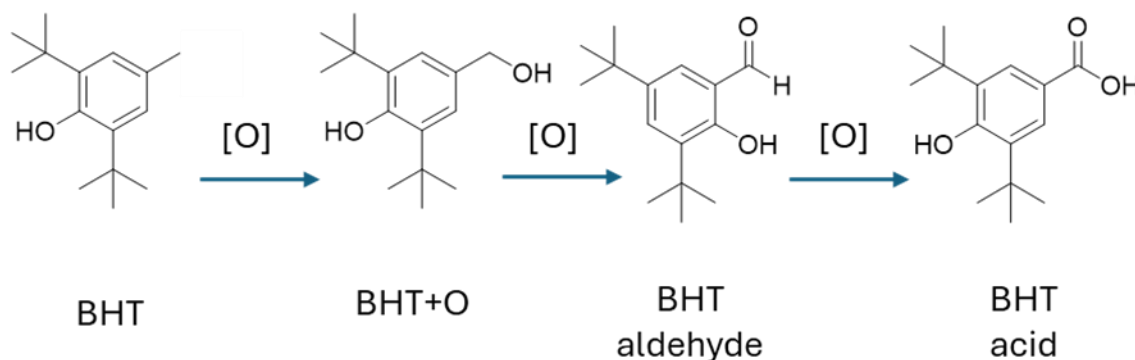


Figure 4.8 Les trois produits d'oxydation (ou métabolites oxydés) du BHT détectés tous avec des niveaux sélectivement plus hauts dans les échantillons d'eau brute collectés en juin 2023 des six usines

Quant aux composés DBP et TBHQ-SO₃, leur regroupement montre un profil de détection distinct à celui des métabolites du BHT. Le TBHQ-SO₃ est un métabolite majeur du BHA (butyl-hydroxy anisole) ou du TBHQ (t-butylhydroquinone), les deux étant utilisé souvent comme additif alimentaire pour réduire

l'oxydation des lipides dans la nourriture, comme le BHT (Xu *et al.*, 2021); (Gutiérrez-Del-Río *et al.*, 2021). De son côté, le DBP est un produit de transformation du BHT, formé via l'intermédiaire du BHT-acide (Ousji et Sleno, 2020), mais peut aussi être utilisé comme antioxydant dans la production des plastiques, comme le BHT et le TBHQ, ainsi comme précurseur pour la production de plusieurs autres antioxydants industriels.

4.7 Contaminants détectés avant et après traitement

La carte thermique (Figure 4.2) révèle un regroupement de médicaments incluant le valsartan, le telmisartan, ainsi que de l'acide ritalinique, la gabapentine et l'acide tranexamique (figure 4.9). Ces médicaments sont détectés dans plusieurs échantillons, aussi bien avant qu'après traitement, démontrant leur persistance dans le circuit de production d'eau potable. Le graphique de la figure 4.10 montre la distribution des aires du valsartan, du telmisartan, de l'acide ritalique, de la gabapentine et de l'acide tranéxamique. Concernant le valsartan et le telmisartan, une détection relativement faible est observée dans les usines A et B, avec des concentrations similaires avant et après traitement. À l'inverse, dans les usines C à F, leurs niveaux sont plus élevés, mais l'absence de variation notable entre les échantillons traités et non traités indique une efficacité réduite des systèmes en place pour leur élimination. De même, pour de l'acide ritalinique, la gabapentine et l'acide tranéxamique, les résultats montrent, dans l'ensemble des six usines, une persistance marquée après traitement, traduisant une incapacité généralisée à éliminer ces substances pharmaceutiques.

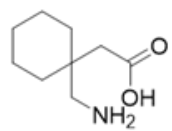
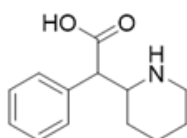
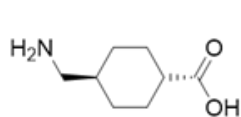
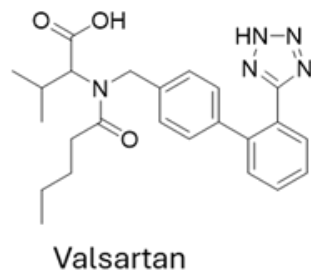
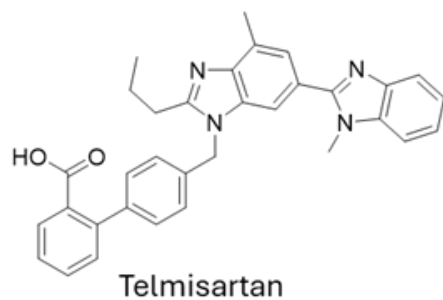


Figure 4.9 Structures de plusieurs médicaments qui persistent après le traitement d'eau potable et détectés dans la majorité des échantillons analysés

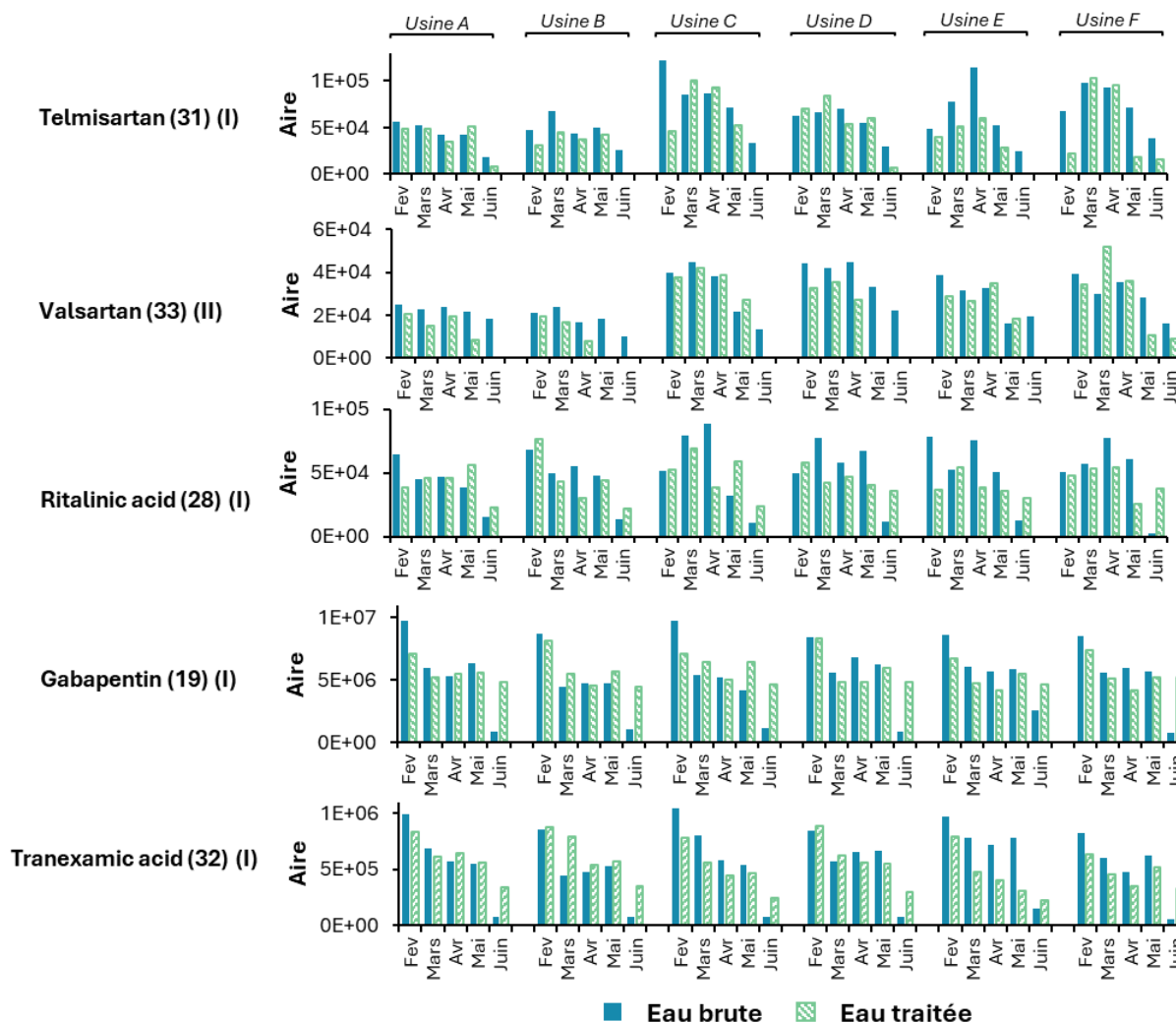


Figure 4.10 Distribution des aires de plusieurs médicaments ayant une tendance similaire dans les échantillons d'eau potable. Les méthodes d'analyses sont indiquées après les noms de chaque composé (I : FA(+), II: FA(-)).

Selon (Muambo *et al.*, 2024), le valsartan et le telmisartan figurent parmi les produits pharmaceutiques les plus fréquemment détectés dans l'eau traitée, avec des concentrations moyennes d'environ à 40 ng/L pour le telmisartan et 6 ng/L pour le valsartan, avec des fréquences de détection supérieures à 40 %. Leur étude a identifié d'ailleurs le telmisartan comme l'un des composés à risque écologique le plus élevé, nécessitant une attention prioritaire. De manière complémentaire, l'étude de (Castro *et al.*, 2019) confirme que le valsartan et le telmisartan sont peu éliminés par les procédés classiques, même ceux qui sont plus avancés (comme l'ozonation). Selon cet article, le valsartan peut également se transformer en

acide valsartan, un métabolite également détecté après traitement, suggérant une transformation chimique partielle plutôt qu'une élimination complète. Ces résultats soulignent l'importance de mieux adapter les traitements pour réduire la présence de ces composés et renforcer la surveillance dans les ressources destinées à la consommation humaine.

La gabapentine est un médicament antiépileptique largement utilisé, également prescrit contre les douleurs neuropathiques. En raison de son élimination partielle par l'organisme et de sa faible biodégradabilité, elle est régulièrement détectée dans les eaux usées municipales (Herrmann *et al.*, 2015). Sa résistance aux traitements conventionnels entraîne une persistance dans les effluents traités. Cette faible efficacité favorise le rejet de la gabapentine dans les eaux de surface, pouvant ainsi contaminer les ressources en eau utilisées pour la production d'eau potable. L'ozonation, bien qu'identifiée comme traitement avancé, présente une efficacité limitée à pH neutre, ce qui correspond aux conditions opérationnelles classiques (Bein *et al.*, 2023). De même, le traitement UV, souvent utilisé en désinfection, ne permet qu'une phototransformation partielle de la molécule, avec la formation de sous-produits peu biodégradables et potentiellement toxiques (Schulze *et al.*, 2015). Selon (Margot *et al.*, 2013), l'ozone est généralement plus performant que le charbon actif en poudre pour l'élimination des micropolluants, mais la gabapentine reste difficile à traiter sans conditions spécifiques, ce qui pose un risque de transfert vers les ressources en eau potable si des traitements plus adaptés ne sont pas mis en œuvre.

L'acide ritalinique est formé dans l'organisme après administration du médicament méthylphénidate (ritaline) prescrit pour le TDAH, troubles de déficit de l'attention avec ou sans hyperactivité, et est ensuite excrété dans l'urine. Il présente une persistance notable dans le milieu aquatique. Selon (Letzel *et al.*, 2010), les stations d'épuration classiques permettent un retrait limité, estimé à environ 13 % en conditions de laboratoire et 23 % en conditions réelles, ce qui implique que la majorité de la molécule traverse les traitements sans être dégradée. Des concentrations allant jusqu'à 170 ng/L ont été mesurées dans les effluents traités, confirmant une présence résiduelle significative. L'acide ritalinique est également détecté dans les eaux de surface, à des concentrations variant de 4 à 23 ng/L, ce qui souligne son faible taux d'élimination et son potentiel de dispersion dans l'environnement aquatique.

Actuellement, il n'existe pas de données publiées concernant la présence de l'acide tranexamique dans les eaux usées, les eaux de surface ou l'eau potable. Les informations disponibles se limitent principalement à des études toxicologiques et de biodégradabilité en laboratoire (Mota *et al.*, 2025), ce

qui souligne un manque important de données sur son impact environnemental potentiel et son éventuelle persistance dans les ressources en eau potable.

4.8 Contaminants non détectés (ou diminués) après le traitement d'eau potable

Finalement, nous constatons qu'un groupement distinct de produits pharmaceutiques et de leurs métabolites, incluant la lidocaïne (LIDO) (21), *O*-desmethylvenlafaxine (ODV) (27) et son précurseur la venlafaxine (VEN) (34), ainsi que la fexofénadine (FEX) (18) (Figure 4.11) diminuent tous de façon significative lors du traitement des six usines. Ce regroupement est illustré sur le graphique (Figure 4.12), permettant de mieux visualiser leur co-occurrence.

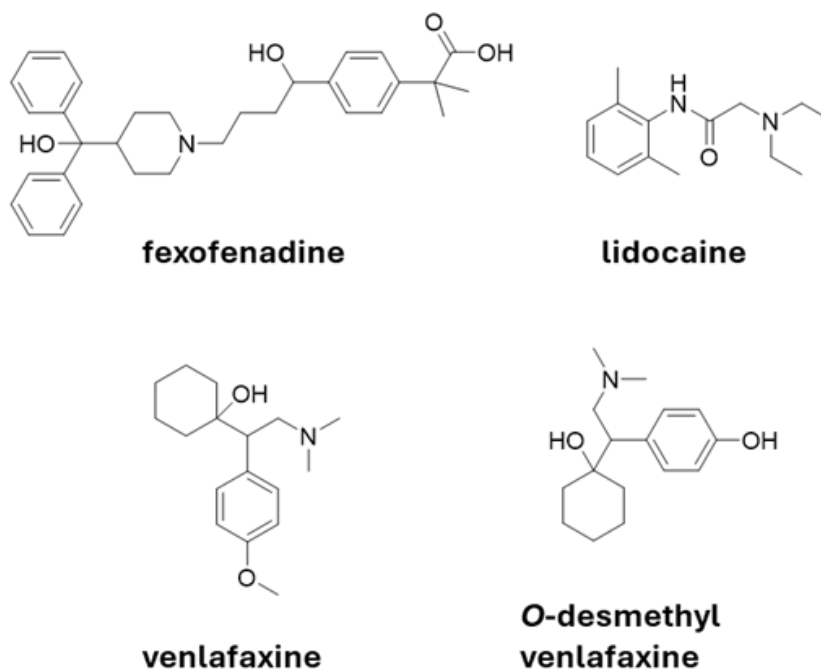


Figure 4.11 Structures chimiques de certains médicaments (ou leur métabolite) qui diminue après le traitement d'eau potable

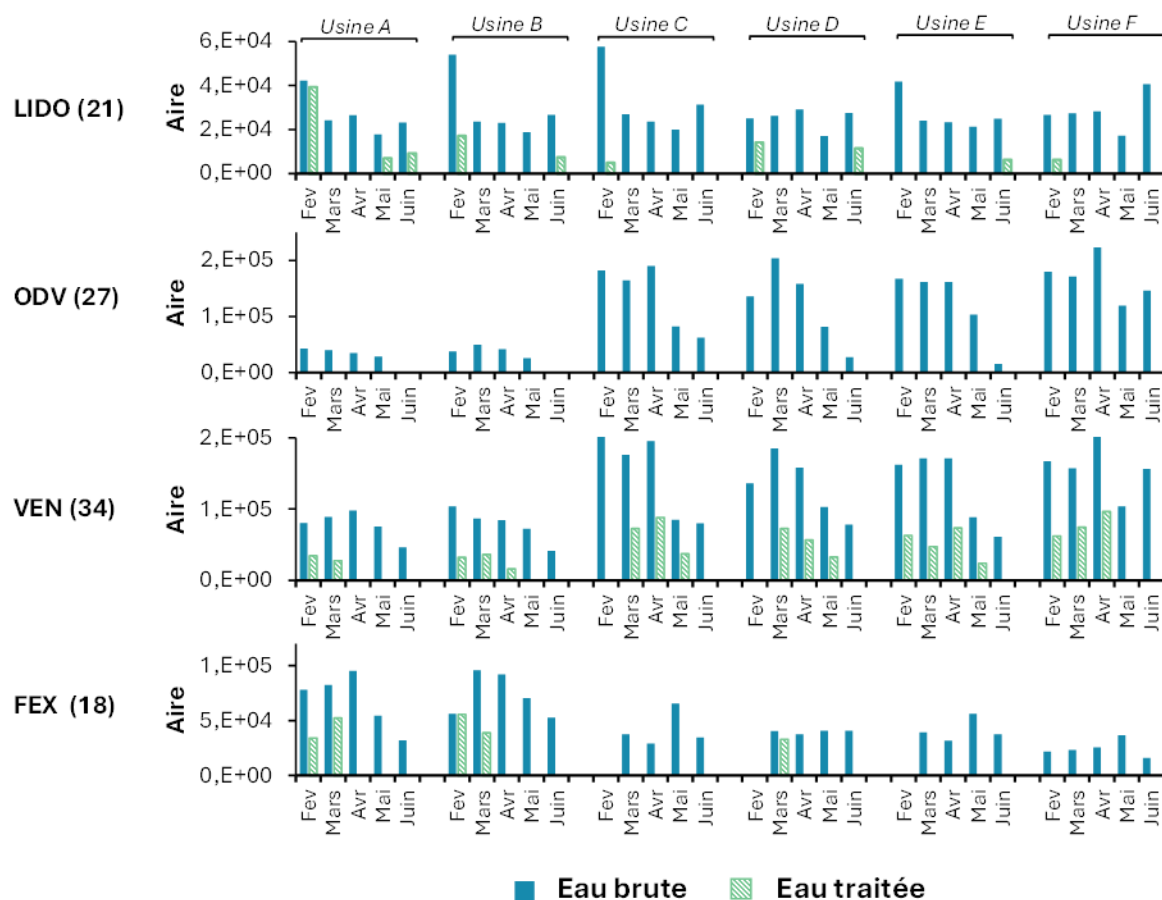


Figure 4.12 Distribution des aires de la lidocaïne (LIDO), le venlafaxine (VEN) et son métabolite déméthylé O-desméthylvenlafaxine (ODV), et la fexofénadine (FEX), montrant une diminution de leur niveau dans les échantillons d'eau potable après le traitement des six usines, et ce pour tous les échantillons

L'analyse des profils de distribution met en évidence une présence systématique de la lidocaïne dans les eaux brutes des six usines étudiées. Toutefois, cette molécule est quasiment absente des eaux traitées, à l'exception notable de l'usine A au mois de février, où les niveaux mesurés dans l'eau traitée sont comparables à ceux de l'eau brute, suggérant une inefficacité ponctuelle du traitement. Concernant l'O-desméthylvenlafaxine, il est clairement plus concentré dans les eaux brutes de usines C-F. Dans tous les cas, aucune détection n'est observée après traitement, ce qui indique une bonne efficacité des procédés appliqués vis-à-vis de ce métabolite. La venlafaxine, molécule mère, suit une tendance similaire à celle de son métabolite dans les eaux brutes : concentrations plus faibles dans les usines A et B, et plus élevées dans les autres. Cependant, à la différence de son métabolite, des traces persistent dans certaines eaux

traitées, bien que les concentrations restent plus faibles. Enfin, la fexofénadine est détectée dans les eaux brutes des six usines, et est quasiment absente des eaux traitées. Cette absence de détection dans les eaux traitées peut résulter d'une élimination complète des composés par les procédés appliqués, mais elle pourrait également s'expliquer par la formation de produits de transformation non détectés par les méthodes analytiques utilisées. Ce constat soulève ainsi une question pertinente quant au devenir réel de ces micropolluants et justifie la mise en place d'études complémentaires pour évaluer la présence potentielle de sous-produits et leurs impacts.

CONCLUSION

Cette étude s'inscrit dans un contexte où la présence croissante des contaminants d'intérêt émergents dans les milieux aquatiques urbains suscite une attention scientifique et réglementaire accrue. La région métropolitaine de Montréal, avec sa densité de population élevée et ses activités urbaines intenses, constitue un terrain d'étude privilégié pour comprendre la nature et l'étendue de cette pollution chimique complexe. À travers l'application d'une approche non ciblée reposant sur l'analyse par (LC-HRMS/MS, ce travail a permis d'explorer de manière exhaustive le profil des contaminants présents dans les eaux usées avant et après traitement, ainsi que dans l'eau potable produite par six usines.

Contrairement aux méthodes d'analyse ciblées traditionnelles, limitées à un nombre restreint de molécules parentales, l'approche non ciblée utilisée ici a révélé une diversité chimique plus large. Cette stratégie a permis d'identifier non seulement des produits pharmaceutiques, des hormones, des pesticides, des composés naturels et synthétiques, mais également leurs métabolites et produits de transformation, souvent méconnus, mais potentiellement aussi toxiques, et plus des certains cas, que les composés initiaux. Cette capacité à détecter un large éventail de substances conforte l'idée que la surveillance environnementale classique, centrée sur des cibles prédéfinies, peut passer à côté d'une part importante des polluants réellement présents dans les eaux.

L'originalité méthodologique de notre étude repose sur une stratégie multicritère combinant différentes techniques d'extraction sur phase solide, ainsi que trois conditions chromatographiques complémentaires. Cette combinaison a maximisé la couverture analytique en facilitant la détection de différents types de contaminants, selon leur nature chimique et leur comportement lors de l'analyse. Chaque condition expérimentale a apporté sa contribution unique, et leur association s'est avérée essentielle pour obtenir une fenêtre d'analyse étendue. Ce protocole innovant illustre l'importance d'adapter les méthodes analytiques aux caractéristiques complexes des matrices environnementales telles que les eaux usées, qui contiennent des milliers de composés variés et souvent en faible concentration.

Les résultats ont mis en évidence la présence de substances préoccupantes qui ne sont pas systématiquement surveillées au Québec ou au Canada, notamment dans les eaux usées et potables, par exemple l'amisulpride, la fexofénadine, le trazodone, la phenacétine, le trimethoprim, la sulfapyridine, ainsi que plusieurs métabolites tels que l'acide métoprolol, l'O-desméthylvenlafaxine, l'acide ritalinique,

ou encore des produits agrochimiques comme le tebuconazole et l'acétochlor. La persistance et la toxicité potentielle de ces composés soulignent l'importance de les intégrer dans les programmes de surveillance afin d'évaluer les risques réels pour l'environnement aquatique et la santé humaine.

Un aspect clé de cette étude réside dans la mise en lumière de l'importance des métabolites et produits de transformation. Souvent négligés dans les analyses ciblées, ces composés peuvent présenter des propriétés bioactives significatives et contribuer à la toxicité globale des eaux contaminées. L'identification conjointe des composés parentaux et de leurs métabolites permet ainsi une meilleure compréhension des processus de transformation chimique et biologique qui se déroulent dans les stations d'épuration et au sein des réseaux d'eau potable. Cette approche holistique renforce la pertinence des méthodes non ciblées pour appréhender la complexité du cycle de l'eau en milieu urbain.

Les résultats confirment également que, sans surprise, les eaux usées contiennent une plus grande diversité et concentration de contaminants comparativement à l'eau potable, témoignant de l'efficacité relative, mais perfectible des traitements appliqués. Si les usines de production d'eau potable parviennent généralement à réduire la charge de micropolluants, la présence détectable de certains contaminants émergents dans l'eau distribuée invite à repenser les technologies et stratégies de traitement afin d'améliorer la qualité finale de l'eau destinée à la consommation humaine.

Des travaux futurs devront être menés afin de compléter et consolider les résultats obtenus dans cette étude. Les identifications proposées restent, à ce stade, putatives et nécessitent une confirmation rigoureuse par comparaison avec des standards analytiques, notamment par la vérification des temps de rétention chromatographique et des spectres MS/MS obtenus dans des conditions instrumentales identiques. Cette étape de validation est essentielle pour renforcer la fiabilité des résultats et écarter les risques de fausses identifications. Le développement de bibliothèques spectrales locales pourrait également améliorer la confiance dans l'identification des composés détectés par approche non ciblée. Par ailleurs, la mise en place de quantifications précises, fondées sur des courbes d'étalonnage et l'utilisation d'étalons internes, permettra d'obtenir des données quantitatives robustes, indispensables pour évaluer de manière plus précise les niveaux d'exposition et les risques associés. L'élargissement de la période d'échantillonnage offrira également une meilleure caractérisation des tendances saisonnières et des événements ponctuels de contamination.

Dans la continuité de ce travail, des études complémentaires *in vitro*, simulant les étapes de traitement des eaux, pourraient offrir un éclairage précieux sur les mécanismes chimiques et biologiques responsables de la formation ou de la dégradation des contaminants et de leurs métabolites. Comprendre ces processus est fondamental pour optimiser les procédés de traitement et limiter la dissémination de substances potentiellement toxiques dans l'environnement. De plus, l'intégration systématique d'approches non ciblées dans les programmes de surveillance environnementale représente une opportunité majeure pour détecter précocement l'apparition de nouveaux contaminants, mieux caractériser leur devenir environnemental et adapter les stratégies de gestion en conséquence.

Ce mémoire contribue ainsi de manière significative au champ de la surveillance des micropolluants dans le cycle urbain de l'eau, en proposant une méthodologie analytique puissante et adaptée aux défis actuels de la chimie environnementale. Il constitue une base solide pour orienter les recherches futures, renforcer la prise en compte des contaminants d'intérêt émergents dans les politiques publiques et améliorer la protection des ressources en eau dans les zones urbaines densément peuplées.

En résumé, l'analyse non ciblée par LC-HRMS/MS s'impose comme un outil indispensable pour révéler la richesse et la complexité des contaminants émergents dans les eaux usées et l'eau potable, dont la présence et la variabilité dépendent étroitement des activités anthropiques, des habitudes de consommation, des saisons, ainsi que des procédés de traitement appliqués. Cette diversité chimique reflète l'interaction constante entre les modes de vie moderne, l'environnement urbain et les infrastructures de gestion de l'eau, mettant en évidence la nécessité d'approches de surveillance capables de s'adapter à cette dynamique évolutive. La confirmation analytique, la quantification précise et l'étude approfondie des mécanismes de transformation chimique constituent désormais les prochaines étapes essentielles pour approfondir notre compréhension et mieux maîtriser les risques liés aux micropolluants dans le cycle de l'eau.

ANNEXE A – DONNÉES SUPPLÉMENTAIRES DES EAUX USÉES POUR LA COMPARAISON DES MÉTHODES DE PRÉPARATION PAR SPE

Tableau A1-1. La Liste des composés détectés dans les échantillons d'effluents prélevés entre mai et juillet 2022 et analysés par LC-HRMS/MS avec une phase mobile acide formique 0.1% en mode ionisation positif

Composé	Formule chimique	M+H ⁺	RT (min)	C18		HLB		MCX		Strata-X-AW	
				Aire (moyenne)	RSD %	Aire (moyenne)	RSD %	Aire (moyenne)	RSD %	Aire (moyenne)	RSD %
Ambroxane	C ₁₆ H ₂₈ O	237,2213	12,8	131206	105	150235	66	3688	245	544526	28
Ambroxane	C ₁₆ H ₂₈ O	237,2213	10,5	116723	38	86595	9	84958	61	301854	34
Astragalin	C ₂₁ H ₂₀ O ₁₁	449,1078	4,8	40205	203	45622	206	47427	219	22638	205
camphor	C ₁₀ H ₁₆ O	153,1274	5,2	142262	31	157994	22	137657	35	12392	160
Curcumin	C ₂₁ H ₂₀ O ₆	369,1333	10,3	4436	157	1220	245	2964	245	0	0
Daidzein	C ₁₅ H ₁₀ O ₄	255,0652	6	409236	30	301379	20	408416	58	146345	37
Glucosylvitexin	C ₂₇ H ₃₀ O ₁₅	595,1658	3,9	35683	80	31739	79	37670	108	30506	93
Gramine	C ₁₁ H ₁₄ N ₂	175,1230	3	3131	245	12391	213	4222	94	7696	119
Hesperetin	C ₁₆ H ₁₄ O ₆	303,0863	7,6	226436	16	78581	56	207502	52	111283	15
Indirubin	C ₁₆ H ₁₀ N ₂ O ₂	263,0815	5,4	19951	82	29313	80	59949	105	8980	170
Methyl linoleate	C ₁₉ H ₃₄ O ₂	295,2632	12,9	1074299	75	1334318	73	98827	74	4652460	41
Narcissoside	C ₂₈ H ₃₂ O ₁₆	625,1763	4,6	4848	245	2827	245	4363	245	488	245
Pinocembrin	C ₁₅ H ₁₂ O ₄	257,0808	9,3	148889	214	46660	228	125803	217	109452	204
Schaftoside	C ₂₆ H ₂₈ O ₁₄	565,1552	3,9	283046	20	256080	30	413287	34	439915	22
Abacavir	C ₁₄ H ₁₈ N ₆ O	287,1615	3,2	76932	24	76209	30	0	0	32104	25
Abietic acid	C ₂₀ H ₃₀ O ₂	303,2319	12,2	310293	18	230351	27	282344	46	472785	27
Acetaminophen	C ₈ H ₉ NO ₂	152,0706	1,7	1687022	20	2803107	9	2772449	20	174926	31
Acetyl Phenylalanine	C ₁₁ H ₁₃ NO ₃	208,0968	4	15620	32	38524	41	36138	28	296017	23
Acetyl tyrosine	C ₁₁ H ₁₃ NO ₄	224,0917	2,1	11608	77	12041	94	28140	36	203826	84
Acetylserotonin	C ₁₂ H ₁₄ N ₂ O ₂	219,1128	3,6	45135	38	52008	35	12852	111	52098	25
Acetylsulfamethoxazole	C ₁₂ H ₁₃ N ₃ O ₄ S	296,0700	5,5	37055	29	84618	22	105864	22	136863	37
Aconitine	C ₃₄ H ₄₇ NO ₁₁	646,3222	8,4	89230	76	86539	69	77651	77	160352	81
Ala-Phe	C ₁₂ H ₁₆ N ₂ O ₃	237,1234	2,1	510642	17	335234	34	33331	49	79387	134

Alpha-Linolenic acid	C ₁₈ H ₃₀ O ₂	279,2319	11,1	1444284	36	1532222	31	1107606	55	1798261	35
Alpha-Linolenic acid	C ₁₈ H ₃₀ O ₂	279,2319	12,1	3947628	50	3074648	51	3664078	68	6523239	57
Amino caproic acid	C ₆ H ₁₃ NO ₂	132,1019	2,5	5879	62	9481	46	13943	34	80757	97
Amino methylphenyl propionic acid	C ₁₀ H ₁₃ NO ₂	180,1019	2,9	266675	7	268082	13	290573	21	6547	62
Amino octadecendiol	C ₁₈ H ₃₇ NO ₂	300,2897	11,1	1895348	16	1735418	14	20982	20	257193	36
Aminobenzoic acid	C ₇ H ₇ NO ₂	138,0550	1,9	23104	30	28270	21	52547	60	133794	14
Aminohippuric acid	C ₉ H ₁₀ N ₂ O ₃	195,0764	2	0	0	0	0	0	0	81547	46
Amphetamine	C ₉ H ₁₃ N	136,1121	2	16276	100	21980	131	3692	37	8079	96
Androstanedione	C ₁₉ H ₂₈ O ₂	289,2162	10,7	81418	27	78932	30	77835	32	10414	83
Androstatriendione	C ₁₉ H ₂₂ O ₂	283,1693	7	399532	49	405609	54	398224	76	24743	49
Androstenedione	C ₁₉ H ₂₆ O ₃	303,1955	7,3	124497	29	129923	41	126335	34	3310	165
Androstene	C ₁₉ H ₂₈ O	273,2213	9,8	316524	39	302717	21	298627	45	42064	55
Androstene	C ₁₉ H ₂₈ O	273,2213	8,1	24363	141	28707	88	22429	153	46384	96
Anisaldehyde	C ₈ H ₈ O ₂	137,0597	2	52640	20	64072	14	63331	9	3855	84
Anisaldehyde	C ₈ H ₈ O ₂	137,0597	3,7	31812	56	53179	47	53394	24	43423	37
Asn-Phe	C ₁₃ H ₁₇ N ₃ O ₄	280,1292	2	13116	26	32228	50	5587	67	111021	30
Atenolo	C ₁₄ H ₂₂ N ₂ O ₃	267,1703	2	226726	12	232004	11	0	0	40268	17
Atorvastatin	C ₃₃ H ₃₅ FN ₂ O ₅	559,2603	10,9	23214	158	21293	182	24600	166	63531	178
Atrazine	C ₆ H ₁₄ ClN ₅	216,1011	6,9	65240	44	69457	37	5398	45	8716	145
Avobenzene	C ₂₀ H ₂₂ O ₃	311,1642	12,6	39987	44	21037	28	136382	58	77687	28
Benzenedicarboxylic acid	C ₈ H ₆ O ₄	167,0339	13,2	23004	18	17231	38	19753	40	21183	56
Benzophenone	C ₁₃ H ₁₀ O	183,0804	9,7	21099	23	105301	70	21159	38	47841	60
Benzoylecgonine	C ₁₆ H ₁₉ NO ₄	290,1387	4,2	1165616	21	1228692	13	0	0	92218	24
Benzoylnorecgonine	C ₁₅ H ₁₇ NO ₄	276,1230	4,1	43575	29	44741	15	543	245	28300	18
Benzyl butyl phthalate	C ₁₉ H ₂₀ O ₄	313,1434	12	151272	16	86115	13	141038	22	254190	39
Benzyl methylpiperidinone	C ₁₃ H ₁₇ NO	204,1383	7,6	128	245	101352	205	11053	61	0	0
Berberine hydrochloride	C ₂₀ H ₁₇ NO ₄	336,1230	8,1	84308	29	177129	22	12283	49	108130	155
Biocytin	C ₁₆ H ₂₈ N ₄ O ₄ S	373,1904	2,5	11125	125	12210	79	0	0	0	0
Biotin	C ₁₀ H ₁₆ N ₂ O ₃ S	245,0954	3,5	0	0	4608	178	21548	88	43180	106
Bis(ethylhexyl) adipate	C ₂₂ H ₄₂ O ₄	371,3156	13	46140	12	43811	23	47351	20	91582	35
Bisoprolol	C ₁₈ H ₃₁ NO ₄	326,2326	5,5	73225	13	93034	14	19904	105	31725	26

Boldenone	C ₁₉ H ₂₆ O ₂	287,2006	8,7	148478	66	156207	77	127506	49	27764	93
Boldione	C ₁₉ H ₂₄ O ₂	285,1849	9,4	652614	50	623290	55	538966	79	95821	56
boswellic acid	C ₃₀ H ₄₆ O ₄	471,3469	3,9	29315	82	24652	115	18679	55	36391	86
BPS	C ₁₂ H ₁₀ O ₄ S	251,0373	5,3	85081	104	141860	25	223514	25	40802	58
Butoxyethoxy acetic acid	C ₈ H ₁₆ O ₄	177,1121	4,5	99874	46	354528	136	469234	130	1758732	122
butyl hydroxybenzaldehyde	C ₁₅ H ₂₂ O ₂	235,1693	11,3	371467	27	727106	159	167919	16	345382	40
butyl hydroxybenzoic acid	C ₁₅ H ₂₂ O ₃	251,1642	10	170656	111	379264	123	150543	129	293926	125
Butyrylcarnitine	C ₁₁ H ₂₁ NO ₄	232,1543	1,9	220235	27	61402	43	74588	20	12528	27
Caffeine	C ₈ H ₁₀ N ₄ O ₂	195,0877	3,5	5096883	15	5258386	17	4889774	20	581976	40
camphor	C ₁₀ H ₁₆ O	153,1274	4,4	21342	147	22359	139	17400	132	0	0
Capsaicin	C ₁₈ H ₂₇ NO ₃	306,2064	9,5	54448	46	44332	29	51396	52	7613	111
Carbamazepine	C ₁₅ H ₁₂ N ₂ O	237,1022	7,2	225292	22	221269	20	243478	16	30830	35
Carbamazepine	C ₁₅ H ₁₂ N ₂ O	237,1022	5,1	65923	23	63562	29	82379	25	0	0
Carbamazepine+O	C ₁₅ H ₁₂ N ₂ O ₂	253,0972	4,6	99345	22	100860	15	129494	17	39367	25
Carbendazim	C ₉ H ₉ N ₃ O ₂	192,0768	2,6	70755	16	68760	14	23353	26	43660	28
Carboline propionic acid	C ₁₄ H ₁₂ N ₂ O ₂	241,0972	4,7	21206	34	22150	69	0	0	98946	57
CarboxyEthyl HydroxyChroman	C ₁₅ H ₂₀ O ₄	265,1434	7,2	235246	39	213984	38	237998	31	348218	52
Cardamonin	C ₁₆ H ₁₄ O ₄	271,0965	7,7	113510	203	94266	206	97909	205	38732	166
Cathinone	C ₉ H ₁₁ NO	150,0913	7,3	0	0	0	0	0	0	1790859	42
Cetirizine	C ₂₁ H ₂₅ ClN ₂ O ₃	389,1627	8,4	227248	23	185001	33	0	0	161657	26
Cholestenone	C ₂₇ H ₄₄ O	385,3465	13,7	275549	29	568765	11	926654	30	110734	44
Chrysin	C ₁₅ H ₁₀ O ₄	255,0652	9	18444	205	2400	245	15135	221	21186	208
Cinnamic acid	C ₉ H ₈ O ₂	149,0597	5,5	239564	45	239096	46	247814	48	32430	34
Ciprofloxacin	C ₁₇ H ₁₈ FN ₃ O ₃	332,1405	4,4	14735	63	24324	28	4411	81	58444	32
Citalopram	C ₂₀ H ₂₁ FN ₂ O	325,1711	7,1	180282	24	124348	30	6225	119	36560	48
Cocaine	C ₁₇ H ₂₁ NO ₄	304,1543	5,4	849495	12	760704	29	6857	116	127778	25
Codeine	C ₁₈ H ₂₁ NO ₃	300,1594	3,2	19361	59	21775	64	0	0	1941	245
Coumaric acid	C ₉ H ₈ O ₃	165,0546	3,7	1089	162	8667	92	40002	66	45834	43
Coumarin	C ₉ H ₆ O ₂	147,0441	3,8	211	245	15787	50	57607	49	79510	50
Coumarin	C ₉ H ₆ O ₂	147,0441	5,7	35269	43	71881	18	55922	57	11254	52
Curdione	C ₁₅ H ₂₄ O ₂	237,1849	11,4	58658	21	61276	43	46531	33	68192	33

D-Desthiobiotin	C ₁₀ H ₁₈ N ₂ O ₃	215,1390	3,9	10891	107	8729	141	32575	43	51109	21
Deacetylsalannin	C ₃₂ H ₄₂ O ₈	555,2953	4,1	42245	20	37744	11	35584	14	2519	245
DEET	C ₁₂ H ₁₇ NO	192,1383	7,5	4439656	64	6064307	53	4336442	85	874499	69
Desacetyldiltiazem	C ₂₀ H ₂₄ N ₂ O ₃ S	373,1580	6,4	100755	21	80160	22	6207	81	32339	30
Desalkylflurazepam	C ₁₅ H ₁₀ ClFN ₂ O	289,0538	8,1	26378	137	25468	140	1757	156	2741	228
Dextrorphan glucuronide	C ₂₃ H ₃₁ NO ₇	434,2173	3,2	24230	76	20446	78	1203	245	30562	84
Dibenzylamine	C ₁₄ H ₁₅ N	198,1277	4,6	28882	57	27615	42	8307	47	32480	67
Diclofenac	C ₁₄ H ₁₁ Cl ₂ NO ₂	296,0240	10,4	81359	25	64557	38	73748	32	145936	44
Diclofenac-C6HCl+NAC	C ₂₁ H ₂₁ Cl ₂ N ₃ O ₆ S	514,0606	2,6	125341	23	279402	52	241473	22	2038416	44
Dicyclohexylamine	C ₁₂ H ₂₃ N	182,1903	4,6	105619	54	211591	64	683	51	50956	56
Diethyl phthalate	C ₁₂ H ₁₄ O ₄	223,0965	8,7	101029	25	296959	66	97284	47	85638	37
Diethylene glycol monoethyl ether	C ₆ H ₁₄ O ₃	135,1016	1,9	63581	79	80676	73	45040	62	154804	42
Dihomo-,gamma,-linolenic acid methyl ester	C ₂₁ H ₃₆ O ₂	321,2788	12	52259	76	42020	68	150789	169	25141	68
Dihydro hydroxycarbamazepine	C ₁₅ H ₁₄ N ₂ O ₂	255,1128	5,1	28898	46	28746	38	36553	19	11962	81
Dihydrocervone	C ₁₀ H ₁₆ O	153,1274	7,4	81441	23	86972	17	91507	38	135036	14
Dihydroxy dihydrocarbamazepine	C ₁₅ H ₁₄ N ₂ O ₃	271,1077	4,6	51358	19	53891	22	63078	19	15867	101
Dihydroxy methoxyflavanone	C ₁₆ H ₁₄ O ₅	287,0914	9,3	48481	107	6671	139	36946	105	21730	59
Dihydroxy octadecenoic acid	C ₁₈ H ₃₄ O ₄	315,2560	9,5	158673	64	202506	58	224446	55	336105	49
Dihydroxyacetophenone	C ₈ H ₈ O ₃	153,0546	2,3	3170	180	9810	124	246877	66	175949	90
Dihydroxycoumarin	C ₉ H ₆ O ₄	179,0339	3,7	1413	90	23928	87	79687	82	362316	71
Diltiazem	C ₂₂ H ₂₆ N ₂ O ₄ S	415,1686	7,7	173231	18	124551	31	5924	80	0	0
dimethyl octyl phthalate	C ₂₈ H ₄₆ O ₄	447,3469	13,5	347283	19	311151	13	370808	29	143730	47
dimethyl octyl phthalate	C ₂₈ H ₄₆ O ₄	447,3469	13,5	347283	19	311151	13	370808	29	143730	47
Dimethylbenzoic acid	C ₉ H ₁₀ O ₂	151,0754	7,1	80169	19	142592	38	132765	30	506725	44
Dimethylguanosine	C ₁₂ H ₁₇ N ₅ O ₅	312,1303	1,9	254260	82	230476	64	6451	112	26674	52
Dimethylguanosine	C ₁₂ H ₁₇ N ₅ O ₅	312,1303	1,9	256718	81	231855	63	6954	98	27840	47
Dimethyluric acid	C ₇ H ₈ N ₄ O ₃	197,0669	2,1	5876	68	35927	170	372262	83	301170	115
Diocetyl phthalate	C ₂₄ H ₃₈ O ₄	391,2843	13,2	1620043	7	1209556	35	1326924	21	1404148	30

Diphenhydramine	C ₁₇ H ₂₁ NO	256,1696	6,9	78120	39	85930	62	1287	245	28354	96
Docosahexaenoic acid	C ₂₂ H ₃₂ O ₂	329,2475	12,4	205263	24	78364	32	205136	46	351726	36
Docosapentaenoic acid	C ₂₂ H ₃₄ O ₂	331,2632	12,5	137096	30	116021	28	132254	44	372753	28
Dodecadienol	C ₁₂ H ₂₂ O	183,1743	10,7	189915	43	233741	39	183553	62	395376	25
Dodecalactone	C ₁₂ H ₂₂ O ₂	199,1693	12,5	138388	57	150237	53	254385	65	582596	48
Eicosapentaenoic acid methyl ester	C ₂₁ H ₃₂ O ₂	317,2475	12,8	15298	143	10656	159	4394	40	31992	131
Eicosatetraenoic acid	C ₂₀ H ₃₂ O ₂	305,2475	12,4	248850	14	131225	11	223437	55	512786	19
Eicosatrienoic acid	C ₂₀ H ₃₄ O ₂	307,2632	12,5	84845	30	61858	28	123408	59	302256	25
Eicosenoic acid	C ₂₀ H ₃₈ O ₂	311,2945	12,8	128172	42	192535	44	514958	61	1110091	39
Enterolactone	C ₁₈ H ₁₈ O ₄	299,1278	7,6	365150	27	248475	25	331627	46	64858	22
Epoxy octadecenoic acid	C ₁₈ H ₃₂ O ₃	297,2424	9,9	636427	69	357932	58	519072	51	829252	46
Epoxy octadecenoic acid	C ₁₈ H ₃₂ O ₃	297,2424	8,8	205244	49	228500	37	239738	51	320892	55
Erucamide	C ₂₂ H ₄₃ NO	338,3417	12,9	12009151	9	8072346	50	31300417	30	3530725	62
Ethoxybenzoic acid	C ₉ H ₁₀ O ₃	167,0703	9,6	278109	16	260675	12	289217	26	502390	46
Fenofibric acid	C ₁₇ H ₁₅ ClO ₄	319,0732	10,2	84264	25	75942	32	84730	31	154186	49
Ferulic acid	C ₁₀ H ₁₀ O ₄	195,0652	4,3	0	0	60425	63	167162	48	205204	29
Fexofenadine	C ₃₂ H ₃₉ NO ₄	502,2952	8,7	159018	31	149821	31	0	0	84630	27
Flecainide	C ₁₇ H ₂₀ F ₆ N ₂ O ₃	415,1451	7	102799	12	89623	20	11265	25	9925	118
Fludrocortisone-acetate	C ₂₃ H ₃₁ FO ₆	423,2177	3,3	108451	16	96020	21	100361	19	23209	68
Formylbenzonitrile	C ₈ H ₅ NO	132,0444	2,3	39077	88	41337	105	25074	96	12538	53
Gabapentin	C ₉ H ₁₇ NO ₂	172,1332	2,4	188049	16	91432	44	7135	30	21082	23
Genistein	C ₁₅ H ₁₀ O ₅	271,0601	7,1	204396	30	52368	51	168608	57	117552	27
Gliclazide	C ₁₅ H ₂₁ N ₃ O ₃ S	324,1376	9,2	39233	14	33108	27	616	155	106072	36
Gly-Phe	C ₁₁ H ₁₄ N ₂ O ₃	223,1077	2,1	23890	28	51610	48	16423	22	109139	32
Glycetein	C ₃ H ₈ O ₃	93,0546	6,3	106420	43	72354	29	120589	34	59821	50
Glycocholic acid	C ₂₆ H ₄₃ NO ₆	466,3163	7,9	407917	53	422334	52	459363	53	676879	51
Harmane	C ₁₂ H ₁₀ N ₂	183,0917	4,6	102719	21	95376	37	27490	39	90632	58
Helvolic acid	C ₃₃ H ₄₄ O ₈	569,3109	4,2	36834	62	33966	58	52313	49	112937	70
Helvolic acid	C ₃₃ H ₄₄ O ₈	569,3109	4,7	402911	12	408491	15	374261	17	34977	30
Heptapropylene glycol	C ₂₁ H ₄₄ O ₈	425,3109	6,8	1493296	18	1513093	15	1625699	15	198098	42
Hexadecanoic acid	C ₁₆ H ₃₂ O ₂	257,2475	12,8	51465	101	60101	59	19003	62	338624	22
Hexadecenoic acid	C ₁₆ H ₃₀ O ₂	255,2319	12,1	2433279	36	2349349	33	2172318	61	4649886	43
Hexadecenoic acid	C ₁₆ H ₃₀ O ₂	255,2319	10,5	203397	51	192919	31	131060	74	529338	26

Hexaethylene glycol	C ₁₂ H ₂₆ O ₇	283,1751	2,3	1186952	21	1105888	42	0	0	2880335	52
Hexaethylene glycol	C ₁₂ H ₂₆ O ₇	283,1751	2,7	9315845	5	9636092	6	7656754	14	373351	24
Hexapropylene glycol	C ₁₈ H ₃₈ O ₇	367,2690	6	1986262	19	1912141	17	2327905	13	560205	45
Hexapropylene glycol	C ₁₈ H ₃₈ O ₇	367,2690	13,6	398575	21	451329	56	1015939	51	43929	55
Hippurate	C ₉ H ₉ NO ₃	180,0655	2,9	8789	39	48047	90	37177	42	860473	110
Hydroxy bcholanic acid	C ₂₄ H ₃₈ O ₄	391,2843	8,7	274553	47	290308	53	309943	55	454222	53
Hydroxy dihydro quinolinone	C ₉ H ₉ NO ₂	164,0706	4	68081	33	67575	35	71646	23	20345	75
Hydroxy--methoxybenzoic acid	C ₈ H ₈ O ₄	169,0495	2,9	4258	8	6091	46	94182	74	60728	51
Hydroxy--methoxyflavone	C ₁₆ H ₁₂ O ₄	269,0808	7,4	32174	191	27240	166	36901	144	30786	143
Hydroxybenzoic acid	C ₇ H ₆ O ₃	139,0390	2,2	3654	55	5083	34	21950	65	7886	59
Hydroxybupropion	C ₁₃ H ₁₈ ClNO ₂	256,1099	4,3	70602	22	61910	28	10607	69	10361	35
Hydroxyhippuric acid	C ₉ H ₉ NO ₄	196,0604	3,6	4235	45	21379	59	24276	56	106033	70
Hydroxynonenal	C ₉ H ₁₆ O ₂	157,1223	4,7	10111	70	21015	81	46361	62	49585	53
Hydroxyquinoline	C ₉ H ₇ NO	146,0600	2,6	63693	62	64114	65	10037	61	23130	56
Hydroxyvalsartan	C ₂₄ H ₂₉ N ₅ O ₄	452,2292	7,4	60544	9	55740	16	47645	28	136798	37
Hydroxyvitamin	C ₂₈ H ₄₄ O ₂	413,3414	12,7	97567	38	63056	42	138719	65	29575	63
Ile-Leu	C ₁₂ H ₂₄ N ₂ O ₃	245,1860	2,5	733926	59	560702	58	94224	73	564506	81
Ile-Phe	C ₁₅ H ₂₂ N ₂ O ₃	279,1703	3,6	410033	67	331950	83	6284	157	1152444	75
Ile-Pro	C ₁₁ H ₂₀ N ₂ O ₃	229,1547	2	415677	58	146247	63	60884	41	123826	38
Ile-Pro-Ile	C ₁₇ H ₃₁ N ₃ O ₄	342,2387	3,7	110571	52	161464	58	30005	32	58795	76
Ile-Trp	C ₁₇ H ₂₃ N ₃ O ₃	318,1812	4,2	33504	58	49128	34	0	0	65744	58
Ile-Tyr	C ₁₅ H ₂₂ N ₂ O ₄	295,1652	2	158557	45	162104	54	19838	60	275438	58
Inden amine dihydro methyl	C ₁₀ H ₁₃ N	148,1121	2,3	93577	32	116864	25	998	206	26323	25
Indigo dye	C ₁₆ H ₁₀ N ₂ O ₂	263,0815	9,5	93712	21	4920	46	8966	72	148	245
Indole carboxylic acid	C ₉ H ₇ NO ₂	162,0550	4,5	1309	245	29220	82	63467	18	53514	50
Indole ethanamine methyl	C ₁₁ H ₁₄ N ₂	175,1230	3,8	26150	36	21254	54	18366	62	92621	47
Indole propanoic acid	C ₁₁ H ₁₁ NO ₂	190,0863	6,1	5020	213	94611	85	129233	99	163460	72
Indoleacetic acid	C ₁₀ H ₉ NO ₂	176,0706	5	2473	112	87582	59	230884	56	441143	18
Indoleacrylic acid	C ₁₁ H ₉ NO ₂	188,0706	2,1	222596	41	383609	53	25476	65	249674	21
Indoleacrylic acid	C ₁₁ H ₉ NO ₂	188,0706	6	1126	141	48891	74	58603	68	90610	108

Indoleacrylic acid	C ₁₁ H ₉ NO ₂	188,0706	4	29033	14	48751	29	31718	30	117570	37
Indoxyl	C ₈ H ₇ NO	134,0600	3,9	185873	28	196716	35	164494	54	19748	43
Irbesartan	C ₂₅ H ₂₈ N ₆ O	429,2397	8,3	1290255	21	1250615	21	16593	140	2425261	43
Isatin	C ₈ H ₅ NO ₂	148,0393	3,5	147074	46	200687	46	102115	63	101615	32
Isobenzofuranone	C ₈ H ₆ O ₂	135,0441	3,1	1481	54	3655	81	26712	46	259056	65
Isobenzofuranone	C ₈ H ₆ O ₂	135,0441	4,4	33416	77	229375	132	80001	82	24950	64
Isopentenyladenine	C ₁₀ H ₁₃ N ₅	204,1244	3,6	76724	67	76520	64	7506	85	21021	90
Isovitexin	C ₂₁ H ₂₀ O ₁₀	433,1129	4,4	95911	18	83930	23	150140	40	91062	18
Isoxanthohumol	C ₂₁ H ₂₂ O ₅	355,1540	8,5	368096	24	138667	40	355982	20	49733	41
Jasmine lactone	C ₁₀ H ₁₆ O ₂	169,1223	5,9	33652	55	24530	32	49881	41	88679	39
Kaempferol	C ₁₅ H ₁₀ O ₆	287,0550	4,8	33319	236	27770	228	33695	197	79488	69
Ketamine	C ₁₃ H ₁₆ ClNO	238,0993	4,3	96759	16	99456	26	10177	28	34335	39
Ketocholesterol	C ₂₇ H ₄₄ O ₂	401,3414	12,7	379964	25	332288	12	655614	51	140305	14
Ketodeoxycholic acid	C ₂₄ H ₃₈ O ₄	391,2843	9,9	4438117	59	4342155	59	4523705	55	6760122	55
Ketodeoxycholic acid	C ₂₄ H ₃₈ O ₄	391,2843	9,4	889936	51	880156	53	928655	52	1468490	49
Kynurenic acid	C ₁₀ H ₇ NO ₃	190,0499	2,8	13009	52	330196	45	69832	20	1184024	14
Labetalol	C ₁₉ H ₂₄ N ₂ O ₃	329,1860	5,8	56568	15	43163	33	0	0	40215	79
Lauric acid diethanolamide	C ₁₆ H ₃₃ NO ₃	288,2533	9,5	5805767	30	4540272	44	5737147	40	404349	44
Levetiracetam	C ₈ H ₁₄ N ₂ O ₂	171,1128	2,2	84642	22	81256	27	66097	23	0	0
Lidocaine	C ₁₄ H ₂₂ N ₂ O	235,1805	3,6	155278	19	158497	17	6220	79	22244	29
Losartan	C ₂₂ H ₂₃ ClN ₆ O	423,1695	8,3	94561	33	88479	33	0	0	176039	62
Lumichrome	C ₁₂ H ₁₀ N ₄ O ₂	243,0877	5,4	201585	25	180403	22	333832	31	189400	42
Lupenone	C ₃₀ H ₄₈ O	425,3778	13,7	123738	45	100185	42	306743	55	7091	30
Lupenone	C ₃₀ H ₄₈ O	425,3778	12,8	262662	45	138749	32	99291	62	14939	32
Maltol	C ₆ H ₆ O ₃	127,0390	2,2	26775	38	86786	54	93100	48	69874	72
Met-Leu	C ₁₁ H ₂₂ N ₂ O ₃ S	263,1424	2,5	547226	27	515238	27	243803	46	222826	31
Methamphetamine	C ₁₀ H ₁₅ N	150,1277	3	35474	68	84057	25	0	0	19511	35
Methocarbamol	C ₁₁ H ₁₅ NO ₅	242,1023	4,7	186912	32	178581	41	225316	34	26517	47
Methoxybenzoic acid	C ₈ H ₈ O ₃	153,0546	5,2	0	0	39600	82	90358	26	154321	29
Methoxycinnamic acid	C ₁₀ H ₁₀ O ₃	179,0703	12,5	17864	71	2437	36	19785	68	6841	22
Methyl ,gamma,-linolenate	C ₁₉ H ₃₂ O ₂	293,2475	12,8	379083	82	448595	72	50833	76	1901018	40
Methyl hexadecanoate	C ₁₇ H ₃₄ O ₂	271,2632	13	309464	64	310926	38	56182	38	1427847	33

Methyl linoleate	C ₁₉ H ₃₄ O ₂	295,2632	12,9	1073794	75	1334318	73	98827	74	4652460	41
Methyl myristoleate	C ₁₅ H ₂₈ O ₂	241,2162	12,5	52492	47	58422	48	94939	67	272352	46
methyl octyl phthalate	C ₂₆ H ₄₂ O ₄	419,3156	13,3	1901615	13	1863447	22	12872996	13	3135503	43
Methyl palmitoleate	C ₁₇ H ₃₂ O ₂	269,2475	12,8	845156	107	980758	64	66464	77	3466014	28
Methyl palmitoleate	C ₁₇ H ₃₂ O ₂	269,2475	11,8	23604	131	13969	201	41393	74	148485	49
Methyl tetradecanoate	C ₁₅ H ₃₀ O ₂	243,2319	12,7	61708	59	57409	53	12963	86	563248	25
Methylbenzoic acid	C ₈ H ₈ O ₂	137,0597	5,8	72196	49	2280936	78	3116954	47	7444936	48
Methylcoumarin	C ₁₀ H ₈ O ₂	161,0597	5,3	11159	43	28107	67	26307	70	45066	54
Methylglutaryl carnitine	C ₁₃ H ₂₃ NO ₆	290,1598	2,5	344621	41	286323	16	9412	77	2111	245
Methylthio guanine	C ₆ H ₇ N ₅ S	182,0495	2	44519	75	45700	70	3372	70	15470	134
Metoprolol	C ₁₅ H ₂₅ NO ₃	268,1907	4,4	132641	11	158181	16	0	0	60110	34
Metoprolol acid	C ₁₄ H ₂₁ NO ₄	268,1543	2,9	433644	16	200734	38	24813	32	196031	10
Minoxidil	C ₉ H ₁₅ N ₅ O	210,1349	3,9	82798	21	84422	22	369	245	17341	17
Mono-ethylhexyl phthalate	C ₁₆ H ₂₂ O ₄	279,1591	13,2	194019	18	131960	40	157919	16	151189	54
Mono-ethylhexyl phthalate	C ₁₆ H ₂₂ O ₄	279,1591	11,8	1193321	27	1100783	24	1205264	36	2917694	35
Mono-ethylhexyl phthalate	C ₁₆ H ₂₂ O ₄	279,1591	10,8	53087	23	60253	15	57648	29	139710	34
Monoolein	C ₂₁ H ₄₀ O ₄	357,2999	12,3	789627	78	124814	167	558044	91	24405	31
Muscone	C ₁₆ H ₃₀ O	239,2369	12,4	48006	26	56013	26	123484	48	395696	10
Mycophenolic acid	C ₁₇ H ₂₀ O ₆	321,1333	8,5	505068	23	464230	21	528061	25	996687	39
Myristoleic acid	C ₁₄ H ₂₆ O ₂	227,2006	11,6	308654	37	358416	38	227438	48	445167	29
Myristoleic acid	C ₁₄ H ₂₆ O ₂	227,2006	12,5	126207	54	135224	52	234527	68	538035	48
Myristoleic acid	C ₁₄ H ₂₆ O ₂	227,2006	9,6	143440	35	309705	107	133731	48	206630	24
Myristoyl phosphoethanolamine	C ₁₉ H ₄₀ NO ₇ P	426,2615	9,5	19379	78	932	245	4968	166	44227	69
N-Lauroylsarcosine	C ₁₅ H ₂₉ NO ₃	272,2220	10,5	3436594	15	3741201	13	3256725	18	6479179	31
Nadolol	C ₁₇ H ₂₇ NO ₄	310,2013	3,3	58382	12	66315	11	1818	160	5458	110
Naphthalenamine	C ₁₀ H ₉ N	144,0808	2,7	163636	51	146778	51	236	245	63832	42
Naproxen	C ₁₄ H ₁₄ O ₃	231,1016	8,6	349774	21	302460	30	367818	27	646445	40
Naringenin	C ₁₅ H ₁₂ O ₅	273,0758	7,1	147451	105	69263	128	150382	113	74911	130
Neoabietic acid	C ₂₀ H ₃₀ O ₂	303,2319	12,2	310293	18	230351	27	282344	46	472785	27
Nobiletin	C ₂₁ H ₂₂ O ₈	403,1388	9,4	173672	16	112696	14	168639	17	60953	29
Nonapropylene glycol	C ₂₇ H ₅₆ O ₁₀	541,3946	8,3	602834	23	600592	16	645019	17	46390	45

Norharmine	C ₁₁ H ₈ N ₂	169,0760	4,2	48110	23	51050	45	643	245	24282	66
Norleucine methyl ester	C ₇ H ₁₅ NO ₂	146,1176	1,7	29958	96	21504	139	1520	245	4415	162
Nutriacholic acid	C ₂₄ H ₃₈ O ₄	391,2843	7,2	76241	42	82877	36	85140	36	96290	41
O-Desmethylvenlafaxine	C ₁₆ H ₂₅ NO ₂	264,1958	3,9	582752	18	631187	25	0	0	79285	35
O-phosphoryl-ethanolamine	C ₂ H ₈ NO ₄ P	142,0264	12,7	2113	97	6902	38	302	115	32108	31
octadecadienoic acid	C ₁₈ H ₃₂ O ₂	281,2475	12,3	3637841	48	2934267	53	3833496	71	8516832	53
octadecadienoic acid	C ₁₈ H ₃₂ O ₂	281,2475	11,2	942347	44	965756	45	741103	50	1076977	45
octadecadienoic acid	C ₁₈ H ₃₂ O ₂	281,2475	11,8	1962661	46	1711347	42	1582656	57	3155355	41
Octadecadienol	C ₁₈ H ₃₄ O	267,2682	12,4	189243	50	151739	50	197148	64	305551	44
Octadecenoic acid	C ₁₈ H ₃₄ O ₂	283,2632	13,4	0	0	5341	159	46781	62	8187	245
Octadecenoic acid methyl ester	C ₁₉ H ₃₆ O ₂	297,2788	13,1	2043040	83	2675740	67	365966	66	13382793	32
Octapropylene glycol	C ₂₄ H ₅₀ O ₉	483,3528	7,6	1004571	18	1017732	14	1080272	16	86578	43
Octapropylene glycol	C ₂₄ H ₅₀ O ₉	483,3528	13,2	396645	66	236367	61	644185	50	5491	145
Octenoyl-carnitine	C ₁₅ H ₂₇ NO ₄	286,2013	5,5	2561052	23	2938865	18	22520	36	15806	37
Oleamide	C ₁₈ H ₃₅ NO	282,2791	12,2	335398	16	368134	207	112340	18	620785	73
Oleic acid methyl ester	C ₁₉ H ₃₆ O ₂	297,2788	13,1	2043040	83	2675740	67	365966	66	13382793	32
Oleic acid methyl ester	C ₁₉ H ₃₆ O ₂	297,2788	12,3	120964	119	81704	75	51580	38	1131678	40
Oleyl alcohol	C ₁₈ H ₃₆ O	269,2839	12,7	280327	58	237187	60	349810	73	65641	19
Oxybenzone	C ₁₄ H ₁₂ O ₃	229,0859	10,7	124194	49	15523	76	113154	46	39526	41
Palmitelaidic acid	C ₁₆ H ₃₀ O ₂	255,2319	12,2	2433279	36	2349349	33	2172318	61	4649886	43
Palmitoylglycerol	C ₁₉ H ₃₈ O ₄	331,2843	12	274795	66	67198	103	205669	61	56220	29
Pantethine	C ₂₂ H ₄₂ N ₄ O ₈ S ₂	555,2517	4	10218	141	13875	88	5839	81	10079	59
Pentaethylene glycol	C ₁₀ H ₂₂ O ₆	239,1489	2,2	8339119	8	8114526	12	6433014	14	531322	52
Pentaethylene glycol	C ₁₀ H ₂₂ O ₆	239,1489	1,8	348960	40	434590	63	0	0	3109072	45
Pentapropylene glycol	C ₁₅ H ₃₂ O ₆	309,2272	5,1	1893278	20	1627969	23	2460712	21	476188	36
Perillic acid	C ₁₀ H ₁₄ O ₂	167,1067	5,4	15390	101	45727	67	44554	77	117458	53
Perindopril	C ₁₉ H ₃₂ N ₂ O ₅	369,2384	6,4	66348	21	70981	20	0	0	163873	34
Phe-Leu	C ₁₅ H ₂₂ N ₂ O ₃	279,1703	3,7	498986	50	529011	74	11777	81	1248725	62
Phe-Met	C ₁₄ H ₂₀ N ₂ O ₃ S	297,1267	3,1	46699	43	37756	66	374	245	97810	61
Phe-Phe	C ₁₈ H ₂₀ N ₂ O ₃	313,1547	4,4	126287	48	121434	56	5314	38	296993	48
Phe-Pro	C ₁₄ H ₁₈ N ₂ O ₃	263,1390	3,3	274542	54	211331	72	26817	32	132734	36
Phe-Tyr	C ₁₈ H ₂₀ N ₂ O ₄	329,1496	2,9	94531	42	86817	55	9148	150	292948	78

Phe-Val	C ₁₄ H ₂₀ N ₂ O ₃	265,1547	2,4	342335	52	351784	62	22880	40	537984	55
Phenyl butyrolactone	C ₁₀ H ₁₀ O ₂	163,0754	7	108061	48	310633	109	118446	32	49417	68
Phenylacetamide	C ₈ H ₉ NO	136,0757	3	14007	42	18434	28	17765	61	10918	62
Phenylacetyl-L-glutamine	C ₁₃ H ₁₆ N ₂ O ₄	265,1183	2,9	73788	107	326776	101	104151	85	2321429	82
Phenylalanine	C ₉ H ₁₁ NO ₂	166,0863	4	15852	33	21106	66	22914	17	86936	26
Phenylalanine	C ₉ H ₁₁ NO ₂	166,0863	3,4	6247	120	13303	89	10555	39	152367	43
Piperine	C ₁₇ H ₁₉ NO ₃	286,1438	10,1	1739026	29	849479	29	1608549	37	333794	20
Pregabalin	C ₈ H ₁₇ NO ₂	160,1332	2	66403	20	32165	45	10966	36	13384	23
Pregnanetriolone	C ₂₁ H ₃₂ O ₅	365,2323	7,1	118231	35	113860	35	105406	28	0	0
Pristanic acid	C ₁₉ H ₃₈ O ₂	299,2945	13,2	72942	107	149742	16	30959	44	604754	16
propylene glycol butyl ether	C ₁₀ H ₂₂ O ₃	191,1642	6	295469	58	542419	49	238456	66	27900	43
Protoporphyrin IX	C ₃₄ H ₃₄ N ₄ O ₄	563,2653	12,7	1793	245	787	245	0	0	57431	106
Pseudoephedrine	C ₁₀ H ₁₅ NO	166,1226	2,3	76740	29	97131	26	2345	144	23606	25
PyroGlu-Phe	C ₁₄ H ₁₆ N ₂ O ₄	277,1183	3,8	8416	155	18758	92	6176	117	66163	58
Quetiapine	C ₂₁ H ₂₅ N ₃ O ₂ S	384,1740	6,7	108194	17	83239	26	0	0	13700	40
Quetiapine metabolite 2O -2H	C ₂₁ H ₂₃ N ₃ O ₄ S	414,1482	5,6	281071	15	238542	26	10091	39	512034	29
Quinaldic acid	C ₁₀ H ₇ NO ₂	174,0550	3,1	6051	67	22015	34	29189	26	79332	42
Quinoline- 8-diol	C ₉ H ₇ NO ₂	162,0550	3,6	86667	33	89613	30	93659	21	29067	95
Ranitidine	C ₁₃ H ₂₂ N ₄ O ₃ S	315,1485	2,6	68392	28	59589	34	0	0	17489	49
Riboflavin	C ₁₇ H ₂₀ N ₄ O ₆	377,1456	4	811307	39	854534	39	610403	45	42737	59
Ritalinic acid	C ₁₃ H ₁₇ NO ₂	220,1332	3,8	223426	23	222940	22	6766	70	32138	33
Salicylic acid	C ₇ H ₆ O ₃	139,0390	4,5	2508	119	22649	53	22988	48	85443	35
Sclareolide	C ₁₆ H ₂₆ O ₂	251,2006	11,7	145333	39	158953	29	122707	39	204777	38
Scopoletin	C ₁₀ H ₈ O ₄	193,0495	4,6	59921	40	73947	53	84270	50	63917	75
Scutellarein tetramethyl ether	C ₁₉ H ₁₈ O ₆	343,1176	9,7	51728	22	30000	36	51844	25	7952	110
Sitagliptin	C ₁₆ H ₁₅ F ₆ N ₅ O	408,1254	4,9	631138	16	486165	17	4052	63	111094	40
Solanidine	C ₂₇ H ₄₃ NO	398,3417	9,4	64241	56	112956	55	4457	137	7653	62
Sotalol	C ₁₂ H ₂₀ N ₂ O ₃ S	273,1267	2,1	74443	18	72106	12	5864	79	18936	38
Stearidonic acid	C ₁₈ H ₂₈ O ₂	277,2162	11,9	81398	29	71394	46	45595	54	56044	80
Stearoyl ethanolamide	C ₂₀ H ₄₁ NO ₂	328,3210	12,2	241154	133	292688	72	275552	72	105033	116
Stearoyl glycerol	C ₂₁ H ₄₂ O ₄	359,3156	12,5	252672	63	185080	65	243696	55	227808	8

Sulfamethoxazole	C ₁₀ H ₁₁ N ₃ O ₃ S	254,0594	5,2	2688	76	38696	59	27885	29	25627	59
Swertisin	C ₂₂ H ₂₂ O ₁₀	447,1286	4,8	28723	23	30646	22	33991	18	18917	35
Syringic acid	C ₉ H ₁₀ O ₅	199,0601	3,3	13315	63	8476	68	73603	68	95798	48
Telmisartan	C ₃₃ H ₃₀ N ₄ O ₂	515,2442	9,2	342022	19	287848	24	1520	161	817797	43
Terephthalic acid	C ₈ H ₆ O ₄	167,0339	11,4	54622	29	56995	26	67109	42	123790	48
Testosterone propionate	C ₂₂ H ₃₂ O ₃	345,2424	11	73506	38	79026	40	79953	48	97632	51
Tetradecylamine	C ₁₄ H ₃₁ N	214,2529	9,6	76972	57	981673	120	34936	70	595395	51
Tetraethylene glycol	C ₈ H ₁₈ O ₅	195,1227	1,6	4742622	15	3937068	36	2224231	24	458805	43
Tetraethylene glycol monomethyl ether	C ₉ H ₂₀ O ₅	209,1384	2,5	538757	60	606599	51	456124	53	24773	46
Tetrahydrocannabinol	C ₂₁ H ₃₀ O ₂	315,2319	12,5	70754	174	3464	161	39837	24	31190	23
Tetramethyl carboxyethyl hydroxychroman	C ₁₆ H ₂₂ O ₄	279,1591	7,8	51947	51	54465	95	34685	95	41579	85
THC-COOH	C ₂₁ H ₂₈ O ₄	345,2060	11,5	112428	34	76521	28	97623	14	163995	47
Theobromine	C ₇ H ₈ N ₄ O ₂	181,0720	2,2	1462144	19	1392019	25	1303344	19	67636	38
Theophylline	C ₇ H ₈ N ₄ O ₂	181,0720	2,5	1188887	18	1138028	27	1132830	20	160641	21
threo-Dihydrobupropion	C ₁₃ H ₂₀ ClNO	242,1306	5,3	330801	14	353574	29	4918	69	75797	16
Tigogenin	C ₂₇ H ₄₄ O ₃	417,3363	12,6	97871	51	70389	32	208077	52	76300	41
Tocopheryl acetate	C ₃₁ H ₅₂ O ₃	473,3989	13,8	28756	28	82316	26	109617	33	6716	26
Tri(chloropropyl) phosphate	C ₉ H ₁₈ Cl ₃ O ₄ P	327,0081	9,4	1599507	80	1571310	82	1541743	70	284796	54
Tri(propylene glycol) butyl ether	C ₁₃ H ₂₈ O ₄	249,2060	7,2	707724	45	1055191	17	521731	68	104051	37
Tri(propylene glycol) methyl ether	C ₁₀ H ₂₂ O ₄	207,1591	4	493049	56	647570	32	424067	65	124749	36
Tributyl phosphate	C ₁₂ H ₂₇ O ₄ P	267,1720	10,7	142474	36	186161	29	98259	50	124449	39
Tributylamine	C ₁₂ H ₂₇ N	186,2216	5,7	100828	20	90780	12	79442	24	146123	57
Triethyl citrate	C ₁₂ H ₂₀ O ₇	277,1282	6,3	931173	30	975598	23	834488	39	0	0
Triethyl citrate	C ₁₂ H ₂₀ O ₇	277,1282	6,3	946942	28	975598	23	834488	39	257055	63
Triethylene glycol monobutyl ether	C ₁₀ H ₂₂ O ₄	207,1591	4,7	916968	78	1218571	70	832444	60	31897	53
Triethylene glycol monomethyl ether	C ₇ H ₁₆ O ₄	165,1121	1,9	281905	71	299968	77	163941	61	8154	33
Trimethoprim	C ₁₄ H ₁₈ N ₄ O ₃	291,1452	3,6	81443	12	77188	14	0	0	18870	34

Trimethyluric acid	C ₈ H ₁₀ N ₄ O ₃	211,0826	2,8	0	0	39842	101	105379	63	104564	61
Triphenylphosphate	C ₁₈ H ₁₅ O ₄ P	327,0781	11,6	85048	26	47389	29	80321	36	82682	50
Tris(butoxyethyl) phosphate	C ₁₈ H ₃₉ O ₇ P	399,2506	11,4	14804614	31	15181782	32	15209497	35	3407143	50
Trp-Glu	C ₁₆ H ₁₉ N ₃ O ₅	334,1398	2,1	6348	44	9653	26	3757	20	60210	18
Trp-Met	C ₁₆ H ₂₁ N ₃ O ₃ S	336,1376	3,9	16489	38	17780	60	4650	95	29256	59
Trp-Phe	C ₂₀ H ₂₁ N ₃ O ₃	352,1656	5,2	52089	33	42334	46	4552	245	97977	31
Trp-Tyr	C ₂₀ H ₂₁ N ₃ O ₄	368,1605	3,7	28330	20	21740	49	0	0	38156	22
Tryptamine	C ₁₀ H ₁₂ N ₂	161,1073	2,7	28094	50	25177	51	0	0	8510	70
Tryptophan	C ₁₁ H ₁₂ N ₂ O ₂	205,0972	2,1	176242	42	331845	46	29496	29	290279	26
Tryptophanol	C ₁₀ H ₁₁ NO	162,0913	5	28952	42	34212	58	30416	54	2330	111
Tyr-Leu	C ₁₅ H ₂₂ N ₂ O ₄	295,1652	2,5	233842	50	228164	57	16881	61	302302	50
Tyr-Met	C ₁₄ H ₂₀ N ₂ O ₄ S	313,1217	2	42622	61	56669	58	2739	83	75598	54
Tyr-Phe	C ₁₈ H ₂₀ N ₂ O ₄	329,1496	3,4	73847	40	73360	51	612	245	130284	55
Tyr-Pro	C ₁₄ H ₁₈ N ₂ O ₄	279,1339	1,8	42397	50	31505	66	6813	58	40913	75
Tyr-Tyr	C ₁₈ H ₂₀ N ₂ O ₅	345,1445	1,9	29970	63	33387	64	5144	64	71653	36
Undecanedicarboxylic acid	C ₁₃ H ₂₄ O ₄	245,1747	8,3	43113	57	62975	54	88618	51	139319	41
Urobilin	C ₃₃ H ₄₂ N ₄ O ₆	591,3177	7,1	2224398	32	2072247	40	132144	33	3966954	29
Vaccenic acid	C ₁₈ H ₃₄ O ₂	283,2632	12,5	6253262	51	6511982	52	10995607	64	23327459	48
Vaccenic acid	C ₁₈ H ₃₄ O ₂	283,2632	12,5	6253262	51	6511982	52	10995607	64	23327459	48
Val-Gly-Arg	C ₁₃ H ₂₆ N ₆ O ₄	331,2088	5,1	81002	22	70895	27	122060	24	22681	66
Val-Leu	C ₁₁ H ₂₂ N ₂ O ₃	231,1703	1,9	429555	74	324566	64	58685	51	345785	48
Val-Phe	C ₁₄ H ₂₀ N ₂ O ₃	265,1547	2,9	250667	56	223944	72	15887	22	246769	57
Valsartan	C ₂₄ H ₂₉ N ₅ O ₃	436,2343	9,5	1155951	15	1129134	15	1129933	23	2680289	36
Venlafaxine	C ₁₇ H ₂₇ NO ₂	278,2115	5,6	593729	15	692646	16	0	0	75724	30
Xanthohumol	C ₂₁ H ₂₂ O ₅	355,1540	11,2	42684	46	5077	41	21293	52	17055	50
Xanthurenic acid	C ₁₀ H ₇ NO ₄	206,0448	2,1	6410	55	29404	87	30515	38	293935	27

Tableau A1-2. La Liste des composés détectés dans les échantillons d'effluents prélevés entre mai et juillet 2022 et analysés par LC-MS/MS avec une phase mobile acide formique 0.1% et mode d'ionisation négatif

Composé	Formule chimique	M-H	RT (min)	C18		HLB		MCX		Strata-X-AW	
				Aire (moyenne)	RSD %	Aire (moyenne)	RSD %	Aire (moyenne)	RSD %	Aire (moyenne)	RSD %
Astragalin	C ₂₁ H ₂₀ O ₁₁	447,0933	4,8	116161	234	106175	245	76887	227	24238	182
Bufalin	C ₂₄ H ₃₄ O ₄	385,2384	9,4	212025	65	253505	62	162165	67	125153	56
Chenodeoxycholic acid	C ₂₄ H ₄₀ O ₄	391,2854	9,3	2854165	52	2793188	52	1593166	51	1195417	49
Chenodeoxycholic acid	C ₂₄ H ₄₀ O ₄	391,2854	8,9	509473	49	480451	50	301026	57	206264	42
Cholanoic acid	C ₂₄ H ₄₀ O ₅	407,2803	8,7	5026692	51	5966300	51	4265844	52	3338042	51
Diosmetin	C ₁₆ H ₁₂ O ₆	299,0561	7,4	82228	31	59984	50	77742	49	46795	51
Ginkgolic Acid	C ₂₂ H ₃₄ O ₃	345,2435	12,8	8347	61	2787	84	15549	32	17499	29
Glycetein	C ₁₆ H ₁₂ O ₅	283,0612	6,3	51967	39	39428	54	41412	45	11721	56
Glycoursodeoxycholic acid	C ₂₆ H ₄₃ NO ₅	448,3068	9	827650	52	984527	53	649312	51	585703	50
Glycoursodeoxycholic acid	C ₂₆ H ₄₃ NO ₅	448,3068	8,5	195178	51	228476	47	150781	52	124687	41
Hesperetin	C ₁₆ H ₁₄ O ₆	301,0718	7,6	640386	33	305101	49	421074	52	108338	32
Isoschaftoside	C ₂₆ H ₂₈ O ₁₄	563,1406	3,9	457103	33	459395	43	482663	41	204330	32
Isoscopoletin	C ₁₀ H ₈ O ₄	191,0350	4,7	44591	64	87506	63	77687	50	37462	53
Linoleic acid	C ₁₈ H ₃₂ O ₂	279,2330	12,3	7059705	50	7229579	58	6923985	74	9053671	53
Pinocembrin	C ₁₅ H ₁₂ O ₄	255,0663	9,3	495246	191	166325	202	338270	202	165044	202
Schaftoside	C ₂₆ H ₂₈ O ₁₄	563,1406	4,1	95068	171	95974	178	18067	33	94688	133
Theophylline	C ₇ H ₈ N ₄ O ₂	179,0574	2,3	283195	41	281963	20	309811	27	14220	60
1Ketodeoxycholic acid	C ₂₄ H ₃₈ O ₄	389,2697	10,6	960856	52	1238906	50	690291	55	535138	56
2-Hydroxyhippuric acid	C ₉ H ₉ NO ₄	194,0459	3,6	5900	87	168629	68	164579	54	317490	78
Abscisic acid	C ₁₅ H ₂₀ O ₄	263,1289	5,8	123194	16	170913	16	139968	32	113102	23
Acetamidophenol	C ₈ H ₉ NO ₂	150,0560	2,7	38614	78	54394	19	48886	60	18435	15
Acetaminophen	C ₈ H ₉ NO ₂	150,0560	1,7	304166	35	685857	28	595342	17	4985	31
Acetaminophen sulfate	C ₈ H ₉ NO ₅ S	230,0129	3	15030	105	88073	68	13939	58	71993	55
Acetyl norleucine	C ₈ H ₁₅ NO ₃	172,0979	3,1	13697	19	4177	70	40114	35	165889	50
Acetyl tyrosine	C ₁₁ H ₁₃ NO ₄	222,0772	2,1	14058	37	11038	33	60212	32	204970	60
Acetyl-Phenylalanine	C ₁₁ H ₁₃ NO ₃	206,0823	4	44230	27	183332	49	113571	26	480376	13
Acetylsalicylic acid	C ₉ H ₈ O ₄	179,0350	4	11707	74	77628	83	68210	87	117868	95
Acetylsalicylic acid	C ₉ H ₈ O ₄	179,0350	5,3	9930	68	80891	72	43075	73	536691	27
Aempferol-3-O-rutinoside	C ₂₇ H ₃₀ O ₁₅	593,1512	4,5	26276	191	26731	179	30403	173	13823	28
Afzelin	C ₂₁ H ₂₀ O ₁₀	431,0984	5,5	21646	124	22537	98	19376	134	2168	245
Allopregnanolone sulfate	C ₂₁ H ₃₄ O ₅ S	397,2054	7,8	413609	99	373960	42	320724	66	307968	71
Allopregnanolone sulfate	C ₂₁ H ₃₄ O ₅ S	397,2054	7,8	413609	99	373960	42	320724	66	307968	71
Andosterone sulfate	C ₁₉ H ₃₀ O ₅ S	369,1741	6,6	334118	32	406798	27	261026	28	288888	34

Andosterone sulfate	C ₁₉ H ₃₀ O ₅ S	369,1741	7,9	1153667	35	1232658	17	836872	33	1033354	16
Androstenedione sulfate	C ₁₉ H ₂₈ O ₅ S	367,1585	7,6	2670297	32	2469679	23	1787287	16	1671157	12
Asiatic acid	C ₃₀ H ₄₈ O ₅	487,3429	9	94389	27	89492	17	59932	23	19196	21
Azelaic acid	C ₉ H ₁₆ O ₄	187,0976	4,6	313365	41	316227	49	947116	33	323607	22
Benzenedicarboxylic acid	C ₈ H ₆ O ₄	165,0193	2,8	73521	134	68673	73	1996936	71	191912	65
Benzoic acid	C ₇ H ₆ O ₂	121,0295	4,4	14832	41	27386	74	211851	120	348395	94
Benzoic acid	C ₇ H ₆ O ₂	121,0295	5,7	23157	73	41607	76	29643	67	16559	92
Bergaptol	C ₁₁ H ₆ O ₄	201,0193	6,2	22098	157	27200	34	36236	63	8479	71
BHQ	C ₁₄ H ₂₂ O ₂	221,1547	10,9	353526	45	476491	29	342514	41	327643	26
BHQ	C ₁₄ H ₂₂ O ₂	221,1547	8,6	39307	46	89286	118	32530	27	129615	27
Biocytin	C ₁₆ H ₂₈ N ₄ O ₄ S	371,1758	2,5	8952	74	7742	78	0	0	0	0
BPS	C ₁₂ H ₁₀ O ₄ S	249,0227	5,4	411183	105	681793	44	680000	16	48029	25
Butoxyacetic acid	C ₆ H ₁₂ O ₃	131,0714	3,6	0	0	916	245	30185	128	110905	129
Butoxycarbonyl histidine	C ₁₁ H ₁₇ N ₃ O ₄	254,1146	2	65025	39	47414	28	3495	87	3530	71
Butoxyethoxy-acetic acid	C ₈ H ₁₆ O ₄	175,0976	4,4	95651	72	334407	115	438156	133	508440	125
Butyl-hydroxybenzoic acid	C ₁₅ H ₂₂ O ₃	249,1496	11,6	78261	51	89208	30	101045	42	273622	32
Butyl-hydroxybenzoic acid	C ₁₅ H ₂₂ O ₄	249,1496	10	112924	122	247706	139	56433	126	45592	79
Butylphenol	C ₁₄ H ₂₂ O	205,1598	11,5	62479	54	72770	40	57385	59	53563	31
Caffeic acid	C ₉ H ₈ O ₄	179,0350	2,8	6761	36	21783	73	51306	53	22334	40
Caffeoyl methyltyramine	C ₁₈ H ₁₉ NO ₄	312,1241	6,3	115049	34	111810	45	70978	54	5729	27
Caffeoyl methyltyramine	C ₁₈ H ₁₉ NO ₄	312,1241	6,3	115049	34	111810	45	72013	50	900	245
Cannabicyclohexanol	C ₂₂ H ₃₄ O ₂	329,2486	12,6	57178	44	46391	18	76937	56	116824	19
Cardamomin	C ₁₆ H ₁₄ O ₄	269,0819	7,7	139815	172	119737	176	92861	203	41010	138
Cholanoic acid	C ₂₄ H ₄₀ O ₂	360,30	8,7	5026692	51	5966300	51	4264893	52	3338042	51
Cholesterol sulfate	C ₂₇ H ₄₆ O ₄ S	465,3044	7,9	510008	53	658216	53	468230	51	362440	50
Cholesterol sulfate	C ₂₇ H ₄₆ O ₄ S	465,3044	12,6	3514178	42	1597804	38	1681920	36	1252251	51
Cryptochlorogenic acid	C ₁₆ H ₁₈ O ₉	353,0878	2,7	14381	40	19281	61	67915	47	28703	39
Cryptochlorogenic acid	C ₁₆ H ₁₈ O ₉	353,0878	2,7	12133	68	19281	61	67915	47	28703	39
Cyclohexanedicarboxylic acid	C ₈ H ₁₂ O ₄	171,0663	3,6	45537	50	60698	78	45706	29	48681	49
Cyclohexanesulfamic acid	C ₆ H ₁₃ NO ₃ S	178,0543	1,8	17592	35	177834	61	28243	34	2087554	19
Daidzein	C ₁₅ H ₁₀ O ₄	253,0506	6	756609	30	559438	44	505504	57	58116	26
DBP+2O	C ₁₄ H ₂₂ O ₃	237,1491	8,4	107041	36	129299	34	93276	23	70834	27
Dehydroarachidonic acid	C ₂₀ H ₃₀ O ₂	301,2173	12,2	512722	41	460166	50	390541	54	393195	42
Dehydroepiandrosterone sulfate	C ₁₉ H ₂₈ O ₅ S	367,1585	7,4	2670297	32	2469679	23	1674125	28	1565321	29

Dehydroepiandrosterone sulfate	C ₁₉ H ₂₈ O ₅ S	367,1585	7,5	2670297	32	2469679	23	1581156	34	1411326	30
Deoxycholic acid	C ₂₄ H ₄₀ O ₄	391,2854	9	509473	49	480451	50	301026	57	178715	53
Deoxycholic acid	C ₂₄ H ₄₀ O ₄	391,2854	9,4	2854165	52	2793188	52	1593166	51	1195417	49
Deoxycholic acid	C ₂₄ H ₄₀ O ₄	391,2854	10,2	8007062	54	10683074	52	6017347	52	4924216	49
Dichlorosalicylic acid	C ₇ H ₄ Cl ₂ O ₃	204,9465	6,6	38816	32	33444	36	54793	25	37364	45
Dihydrodaidzein	C ₁₅ H ₁₂ O ₄	255,0663	6,1	277963	29	247794	25	281183	45	303581	45
Dihydroisoferulic acid	C ₁₀ H ₁₂ O ₄	195,0663	3,9	55326	56	174602	86	398798	65	270233	39
Dihydroxy-cholestenic acid	C ₂₇ H ₄₄ O ₄	431,3167	12,3	8840	49	6511	51	7516	56	35147	46
Dihydroxy-octadecenoic acid	C ₁₈ H ₃₄ O ₄	313,2384	9,6	1463369	49	1757664	49	1216702	55	823626	48
Dihydroxybenzaldehyde	C ₇ H ₆ O ₃	137,0244	2,3	6136	57	26532	46	208942	46	18316	42
Dihydroxycoumarin	C ₉ H ₆ O ₄	177,0193	3,1	8430	160	7881	24	54690	27	5207	86
Dimethoxy-hydroxycinnamic acid	C ₁₁ H ₁₂ O ₅	223,0612	4,6	12233	50	51690	56	69343	46	41027	50
Dimethylbenzoic acid	C ₉ H ₁₀ O ₂	149,0608	7,1	86	245	19594	151	7484	42	37002	31
Dimethyluric acid	C ₇ H ₈ N ₄ O ₃	171,0663	2,1	25900	82	137534	149	1500028	79	346496	86
Dipalmitoleoyl-glycero-phosphoethanolamine	C ₃₇ H ₇₄ NO ₈ P	690,5079	13,2	91655	150	13920	73	52022	166	0	0
Dodecanedioic acid	C ₁₂ H ₂₂ O ₄	229,1445	7,5	146182	26	312292	55	411324	29	397044	30
Dodecanedioic acid	C ₁₂ H ₂₂ O ₄	229,1445	6,9	145226	27	154897	30	138317	33	128758	40
Dodecyl sulfate	C ₁₂ H ₂₆ SO ₄	265,1401	8,9	28265539	37	27798279	43	18568273	43	18221454	30
Dodecylbenzenesulfonic acid	C ₁₈ H ₃₀ O ₃ S	325,1843	10,8	281194605	15	256212674	26	289817650	14	280123062	13
Eicosatrienoic acid	C ₂₀ H ₃₄ O ₂	305,2486	12,5	142671	28	107934	36	134911	56	189580	20
Eicosenoic acid	C ₂₀ H ₃₈ O ₂	309,2799	12,8	195578	45	342169	44	755457	58	1040164	43
Ellagic acid	C ₁₄ H ₆ O ₈	300,9990	4,3	6088	29	3388	139	19007	103	4046	62
Epoxy-octadecenoic acid	C ₁₈ H ₃₂ O ₃	295,2279	11,7	1935401	45	2481044	48	1425791	51	695525	40
Erucic acid	C ₂₂ H ₄₂ O ₂	337,3112	13,1	57638	79	80975	34	217709	37	324565	20
ethylhexyl phthalate	C ₁₆ H ₂₂ O ₄	277,1445	10,8	393137	54	448955	40	273780	30	320475	32
Fatty acid C20:4	C ₂₀ H ₃₂ O ₂	303,2330	12,4	497983	30	369820	40	400929	62	478297	36
Ferulic acid	C ₁₀ H ₁₀ O ₄	193,0506	4,3	12063	44	272724	75	632237	48	328480	35
Fexofenadine	C ₃₂ H ₃₉ NO ₄	500,2806	8,8	47722	47	38472	23	719	245	10979	47
Furancarboxylic acid, tetrahydro-methylene-octyl	C ₁₄ H ₂₂ O ₄	253,1445	7,9	240962	52	545177	71	408952	42	482625	33
Furosemide	C ₁₂ H ₁₁ ClN ₂ O ₅ S	329,0004	7,3	179509	50	117685	36	149906	40	128572	44
Genistein	C ₁₅ H ₁₀ O ₅	269,0455	7,1	556046	32	157735	72	344520	57	118527	25
Glycocholic acid	C ₂₆ H ₄₃ NO ₆	464,3018	6,7	80874	49	87736	49	68685	61	51389	56

Glycocholic acid	C ₂₆ H ₄₃ NO ₆	464,3018	6	33129	57	43336	50	30645	51	19479	40
Glycocholic acid	C ₂₆ H ₄₃ NO ₆	464,3018	7,6	1782665	52	1430561	113	1246468	78	731001	107
Glycoursodeoxycholic acid	C ₂₆ H ₄₃ NO ₅	448,3068	7,9	139246	47	172350	50	122984	34	96559	39
Guaiacol	C ₇ H ₈ O ₂	123,0452	4,4	2675	69	23750	32	46668	23	26558	22
Heptadecanoic acid	C ₁₇ H ₃₄ O ₂	269,2486	12,5	70095	33	107629	44	151616	45	256141	9
hesperidin	C ₂₈ H ₃₄ O ₁₅	609,1825	5,5	41206	82	44869	78	22909	78	4894	17
Hexadecenoic acid	C ₁₆ H ₃₀ O ₂	253,2173	12,1	2093462	46	2397750	49	1708268	69	2235001	55
Hippurate	C ₉ H ₉ NO ₃	178,0510	2,9	26202	68	282963	111	150661	61	1592704	87
Homovanillic acid sulfate	C ₉ H ₁₀ O ₇ S	261,0074	2,1	0	0	50919	28	828	124	611882	8
Homovanillic acid sulfate	C ₉ H ₁₀ O ₇ S	261,0074	2	0	0	50919	28	341	161	611882	8
Hydrochlorothiazide	C ₇ H ₈ ClN ₃ O ₄ S ₂	295,9572	2,9	54735	65	95237	34	110631	13	3134	35
Hydroferulic acid	C ₁₀ H ₁₂ O ₄	195,0663	3,9	55326	56	174602	86	398798	65	270233	39
Hydroperoxy-eicosapentaenoic acid	C ₂₀ H ₃₀ O ₄	333,2071	8,3	193899	58	208626	56	150789	47	96584	43
Hydroxy-cholenoic acid	C ₂₄ H ₃₈ O ₃	373,2748	12	619960	51	739089	49	484300	54	412902	55
Hydroxy-eicosatetraenoic acid	C ₂₀ H ₃₂ O ₃	319,2279	11,3	337020	18	225364	55	170492	62	168580	17
Hydroxy-eicosatetraenoic acid	C ₂₀ H ₃₂ O ₃	319,2279	11,3	337020	18	225364	55	170492	62	168580	17
Hydroxy-methylbenzoic acid	C ₈ H ₈ O ₃	151,0401	2,3	12080	129	45936	65	763212	69	120913	62
Hydroxy-methylbenzoic acid	C ₈ H ₈ O ₃	151,0401	6	4150	46	121212	48	103388	42	91040	44
Hydroxy-methylbenzoic acid	C ₈ H ₈ O ₃	151,0401	3,1	28261	110	30294	67	80178	50	264023	48
hydroxyallopregnanolone sulfate	C ₂₁ H ₃₄ O ₆ S	413,2003	6	99579	27	70232	8	61180	40	69276	50
hydroxyallopregnanolone sulfate	C ₂₁ H ₃₄ O ₆ S	413,2003	6,7	390474	28	389166	14	288925	7	292863	27
Hydroxybenzaldehyde	C ₇ H ₆ O ₂	121,0295	2,7	10117	178	6126	155	343517	68	53466	71
Hydroxybenzoic acid propyl ester	C ₁₀ H ₁₂ O ₃	179,0714	7,3	231170	22	197806	37	168938	20	11192	12
Hydroxycinnamic acid	C ₉ H ₈ O ₃	163,0401	4,5	8274	106	85948	54	127184	44	129924	31
Hydroxycinnamic acid	C ₉ H ₈ O ₃	163,0401	3,7	3871	69	93281	88	375208	65	153453	63
Hydroxycoumarin	C ₉ H ₆ O ₃	161,0244	4,3	82516	50	110538	46	105827	45	6980	44
Hydroxydodecanoic acid	C ₁₂ H ₂₄ O ₃	215,1653	9,3	771873	43	901778	42	726115	52	614440	37
Hydroxydodecanoic acid	C ₈ H ₁₆ O ₃	159,1027	5	41891	48	268886	48	308205	55	244389	34
Hydroxyhexadecanoic acid	C ₁₆ H ₃₂ O ₃	271,2279	10,5	812999	17	826603	33	383356	45	620075	19

Hydroxyhexadecanoic acid	C ₁₆ H ₃₂ O ₃	271,2279	11,8	44614	83	33447	50	187795	39	224553	23
Hydroxyindole acetic acid	C ₁₀ H ₉ NO ₃	190,0510	3,6	9186	36	38552	78	153149	43	248444	31
Hydroxyindole acetic acid	C ₁₀ H ₉ NO ₃	190,0510	2,7	909	166	5716	58	21561	74	36801	13
Hydroxyisocaproic acid	C ₆ H ₁₂ O ₃	131,0714	2,5	20105	97	5077	47	78496	50	91252	41
Hydroxyisophthalic acid	C ₈ H ₆ O ₅	181,0142	2,9	719	177	8530	103	19314	36	108757	46
Hydroxymyristic acid	C ₁₄ H ₂₈ O ₃	243,1966	9,6	248244	37	350860	47	185962	64	174051	38
Hydroxyoctanoic acid	C ₈ H ₁₆ O ₃	159,1027	6,1	0	0	0	0	0	0	0	0
Hydroxyphenyl-propionic acid	C ₉ H ₁₀ O ₃	165,0557	7,3	5023	129	63919	122	41188	29	62481	26
Hydroxyphenyl-propionic acid	C ₉ H ₁₀ O ₃	165,0557	4,2	13746	64	67466	63	90773	51	56515	40
Hydroxyphenyl-propionic acid	C ₉ H ₁₀ O ₃	165,0557	7,7	6618	155	48040	117	17325	92	50354	28
Hydroxyquinoline-carboxylic acid	C ₁₀ H ₇ NO ₃	188,0353	2,8	14206	37	420032	43	52421	38	414106	15
Hydroxyquinoline-carboxylic acid	C ₁₀ H ₇ NO ₃	188,0353	2,3	127	245	9271	62	1296	82	6960	29
Hyperoside	C ₂₁ H ₂₀ O ₁₂	463,0882	4,5	11574	142	5384	245	51926	199	15862	122
ibuprofen-carboxy	C ₁₃ H ₁₆ O ₄	235,0976	6,4	42792	135	132056	200	571159	91	965345	62
Ibuprofen+O	C ₁₃ H ₁₈ O ₃	221,1183	5,6	331256	27	260396	21	261678	32	190313	21
Ibuprofen+O	C ₁₃ H ₁₈ O ₃	221,1183	7,8	489827	40	485221	26	567059	25	304087	33
Indole carboxaldehyde	C ₉ H ₇ NO	144,0455	4,7	80749	48	86185	44	104016	41	8135	20
Indole carboxylic acid	C ₉ H ₇ NO ₂	160,0404	4,5	450	245	101701	74	219367	13	70283	27
Indole lactic acid	C ₁₁ H ₁₁ NO ₃	204,0666	4,2	1186	157	27491	48	57842	54	45997	55
Indole-carboxylic acid	C ₉ H ₇ NO ₂	160,0404	2,1	22281	152	46849	187	3457	35	8300	79
Indoleacetic acid	C ₁₀ H ₉ NO ₂	174,0560	5	0	0	30410	71	75421	59	60914	28
Indoleacrylic acid	C ₁₁ H ₉ NO ₂	186,0560	6	18745	86	264427	48	275837	69	184762	77
Indoxyl sulfate	C ₈ H ₇ NO ₄ S	212,0023	2,4	76494	65	10074343	55	711285	66	7339238	42
Isopropylmalic acid	C ₇ H ₁₂ O ₅	175,0612	1,9	1263	161	3833	18	17836	56	10834	74
Isoxanthohumol	C ₂₁ H ₂₂ O ₅	353,1394	8,5	322304	41	132176	53	209516	22	16457	45
Kaempferol	C ₁₅ H ₁₀ O ₆	285,0405	7,2	36152	112	1530	245	25817	155	2856	245
Kaempferol-3-gentiobioside	C ₂₇ H ₃₀ O ₁₆	609,1461	4,2	43694	186	41662	182	51359	190	19735	110
Lauroylsarcosine	C ₁₅ H ₂₉ NO ₃	270,2075	10,6	3642083	40	4088284	28	2430933	22	2339041	17
Leucine	C ₆ H ₁₃ NO ₂	130,0873	2,5	2434	44	1344	63	26747	38	49561	71
Linoleic acid	C ₁₈ H ₃₂ O ₂	279,2330	12,4	7059705	50	7229579	58	6923985	74	9053671	53
Lithocholic acid	C ₂₄ H ₄₀ O ₃	375,2905	11,6	350466	52	476908	46	285936	49	233414	44
Methyl-nitrophenol	C ₇ H ₇ NO ₃	152,0353	6,3	14658	116	37795	112	33125	114	4295	92
Methylcatechol	C ₇ H ₈ O ₂	123,0452	3,3	1847	245	1871	95	10750	181	7662	26

Monobutyl phthalate	C ₁₂ H ₁₄ O ₄	221,0819	7,7	496637	38	537743	40	420321	28	413641	31
Muricholic acid	C ₂₄ H ₄₀ O ₅	407,2803	7,2	1001607	50	1169111	53	802334	49	494251	48
Muricholic acid	C ₂₄ H ₄₀ O ₅	407,2803	6,5	289661	48	353202	51	248145	45	118743	46
Mycophenolic acid	C ₁₇ H ₂₀ O ₆	319,1187	8,6	945872	39	871153	17	708234	25	574181	22
Myristic acid	C ₁₄ H ₂₈ O ₂	227,2017	11,9	132042	46	163390	49	152815	67	196637	42
n-Octyl sulfate	C ₈ H ₁₈ O ₄ S	209,0853	6,4	3504224	50	2912591	59	2220852	30	1597521	59
n-Octyl sulfate	C ₈ H ₁₈ O ₄ S	209,0853	5,7	6468648	38	6824334	21	4826415	28	5239367	33
Naphthalenedicarboxylic acid	C ₁₂ H ₈ O ₄	215,0350	5,7	6798	58	15628	72	14858	51	45097	99
Naproxen	C ₁₄ H ₁₄ O ₃	229,0870	8,6	48589	54	42089	26	39780	29	30827	30
Narcissoside	C ₂₈ H ₃₂ O ₁₆	623,1618	4,6	11084	245	12863	230	12652	230	8373	65
Naringenin	C ₁₅ H ₁₂ O ₅	271,0612	7,1	580845	105	321847	130	499305	129	137951	149
Nervonic acid	C ₂₄ H ₄₆ O ₂	365,3425	13,3	24854	136	29890	58	98338	32	177511	26
Nitrophenol	C ₆ H ₅ NO ₃	138,0197	4,7	31022	79	225050	87	260549	72	37133	100
Nutriacholic acid	C ₂₄ H ₃₈ O ₄	389,2697	9,9	167111	54	226763	49	123256	50	98948	54
O-Desmethylnaproxen	C ₁₃ H ₁₂ O ₃	215,0714	6,2	45781	12	75234	29	84313	38	54605	44
Oleanolic acid	C ₃₀ H ₄₈ O ₃	455,3531	12,2	69007	55	51849	35	78248	35	51432	23
Oleic acid	C ₁₈ H ₃₄ O ₂	281,2486	12,5	8504395	54	11125608	50	12553427	62	16936994	49
Oleoside methyl ester	C ₁₇ H ₂₄ O ₁₁	403,1246	3,2	52359	158	70797	114	17425	169	176387	86
Oleoside methyl ester	C ₁₇ H ₂₄ O ₁₁	403,1246	3,2	52359	158	70797	114	17425	169	176387	86
Oleoyle-glycero-phosphoethanolamine	C ₂₃ H ₄₆ NO ₇ P	478,2939	11,1	87717	69	6000	63	12975	88	37994	26
Oleoyle-hydroxy-glycero-phospho-(1'-rac-glycerol)	C ₂₄ H ₄₆ O ₉ P	508,2807	11	21305	96	1481	245	21415	102	28233	86
Oxocholic acid	C ₂₄ H ₃₈ O ₅	405,2646	8,3	754591	50	881203	51	580028	54	432334	51
Oxocholic acid	C ₂₄ H ₃₈ O ₅	405,2646	8,8	142911	35	164477	35	109711	36	89760	26
Oxybenzone-CH2	C ₁₃ H ₁₀ O ₃	178.047740	8,5	152686	54	60394	56	113409	44	28177	37
Palmitoyl-hydroxy-glycero-phosphoethanolamine	C ₂₁ H ₄₄ NO ₇ P	452,2783	10,8	452455	119	15410	84	18066	70	73288	45
Peltatoside	C ₂₆ H ₂₈ O ₁₆	595,1305	4,1	5541	184	9298	102	18147	173	10297	75
Phenylacetaldehyde	C ₈ H ₈ O	119,0502	3,7	0	0	18823	94	82662	60	36821	61
Phenylacetic acid	C ₈ H ₈ O ₂	135,0452	5,8	5629	54	790648	92	997311	70	1333227	54
Phenylacetyl-L-glutamine	C ₁₃ H ₁₆ N ₂ O ₄	263,1037	2,9	125099	124	541274	81	105216	96	1252061	84
Phenyllactic acid	C ₉ H ₁₀ O ₃	165,0557	3,5	8923	47	37811	53	121132	45	338147	58
Phenylpropanoic acid	C ₉ H ₁₀ O ₂	149,0608	5,8	10448	235	88806	64	99123	99	92518	83
Picric acid	C ₆ H ₃ N ₃ O ₇	227,9898	5,7	1091	130	556	245	3761	113	90258	96
Picric acid	C ₆ H ₃ N ₃ O ₇	227,9898	5,6	1459	93	1627	166	8874	82	211771	78
Pinolenic acid	C ₁₈ H ₃₀ O ₂	277,2173	12,1	2009621	48	2011989	55	1600385	73	1925954	56

Protocatechuic acid	C ₇ H ₆ O ₄	153,0193	2,6	2291	83	67380	53	65625	20	102847	36
Purine	C ₅ H ₄ N ₄	119,0363	13,8	17528	96	14207	52	6765	49	10159	44
Quinolinediol	C ₉ H ₇ NO ₂	160,0404	3,6	122528	57	124647	27	118163	21	5762	73
Quinololinol	C ₉ H ₇ NO	144,0455	2,8	26934	80	74025	51	11918	40	65935	28
Raltegravir	C ₂₀ H ₂₁ FN ₆ O ₅	443,1485	8	11093	108	2041	157	20945	39	19137	33
Rhein	C ₁₅ H ₈ O ₆	283,0248	6,3	4985	68	27907	88	14019	67	64936	85
Riboflavin	C ₁₇ H ₂₀ N ₄ O ₆	375,1310	4	323427	55	310238	34	172713	38	7826	117
Rosuvastatin	C ₂₂ H ₂₈ FN ₃ O ₆ S	480,1610	8,7	374443	39	377026	20	288815	19	260554	23
S-Methyl-3-thioacetaminophen	C ₉ H ₁₁ NO ₂ S	196,0438	3,5	50218	37	52416	22	49705	18	3575	90
Salicylic Acid	C ₇ H ₆ O ₃	137,0244	4,5	15997	30	595384	57	469443	58	984106	47
Salicylic Acid	C ₇ H ₆ O ₃	137,0244	2,7	2999	48	3174	65	57351	65	11458	90
Sebacic acid	C ₁₀ H ₁₈ O ₄	201,1132	5,7	78905	42	101804	62	275688	51	202210	54
Stearic acid	C ₁₈ H ₃₆ O ₂	283,2643	12,7	479794	79	1274942	55	2849213	41	5175241	4
Suberic acid	C ₈ H ₁₄ O ₄	173,0819	3,5	43156	46	44859	59	128183	12	39134	36
Sulfonylbisphenol	C ₁₂ H ₁₀ O ₄ S	249,0227	5,8	50997	61	51908	37	81407	25	33648	46
Syringic acid	C ₉ H ₁₀ O ₅	197,0455	3,8	272979	235	290209	235	266925	222	6831	196
Syringic acid	C ₉ H ₁₀ O ₅	197,0455	3,3	3607	100	13427	104	102059	69	44255	43
Taurocholic acid	C ₂₆ H ₄₅ NO ₇ S	514,2844	6,9	1055206	62	1325124	54	757615	54	759778	47
Taurodeoxycholic acid	C ₂₆ H ₄₅ NO ₆ S	498,2895	7,8	340708	59	350581	59	167900	72	244623	58
Taurodeoxycholic acid	C ₂₆ H ₄₅ NO ₆ S	498,2895	7,1	36469	40	32546	82	15560	74	24166	28
TBHQ+SO3	C ₁₀ H ₁₄ O ₅ S	245,0489	3,2	123783	44	297800	26	42292	36	259795	6
TBHQ+SO3	C ₁₀ H ₁₄ O ₅ S	245,0489	3,8	286126	33	419955	24	89658	35	259089	31
Telmisartan	C ₃₃ H ₃₀ N ₄ O ₂	513,2296	9,2	116416	30	103645	17	0	0	61248	22
Terephthalic acid	C ₈ H ₆ O ₄	165,0193	3,2	33160	119	29481	49	840667	56	225326	81
Tetradecanedioic acid	C ₁₄ H ₂₆ O ₄	257,1758	8,8	476387	42	572029	51	438920	40	433814	24
Theophylline	C ₇ H ₈ N ₄ O ₂	179,0574	2,3	283195	41	281963	20	309811	27	14220	60
Toluenesulfonic acid	C ₇ H ₈ O ₃ S	171,0121	2,1	4287	41	166563	58	3100	67	448029	19
Toluenesulfonic acid	C ₇ H ₈ O ₃ S	171,0121	2	4287	41	166563	58	5026	43	448029	19
Traumatic acid	C ₁₂ H ₂₀ O ₄	227,1289	8,4	314271	33	1159333	37	1263997	31	1137597	24
Traumatic acid	C ₁₂ H ₂₀ O ₄	227,1289	6,7	173670	49	292275	80	517640	79	337686	35
Trihydroxycholestanic acid	C ₂₇ H ₄₆ O ₅	449,3272	10,3	123379	36	160607	42	87749	52	66416	32
Trihydroxycholestanic acid	C ₂₇ H ₄₆ O ₅	449,3272	13	528791	96	5986	185	5015	127	28934	229
Trimethyl-carboxyethyl-hydroxychroman	C ₁₅ H ₂₀ O ₄	263,1289	7,2	364605	46	315938	27	244195	33	210366	32
Trimethyluric acid	C ₈ H ₁₀ N ₄ O ₃	209,0680	2,8	17075	61	101841	89	340409	64	103450	34
Tryptophan	C ₁₁ H ₁₂ N ₂ O ₂	203,0826	2,1	147433	46	291472	60	19780	32	51297	34

Undecanedicarboxylic acid	$C_{13}H_{24}O_4$	243,1602	8,3	906158	53	1775926	47	1725081	47	1477245	44
Undecanedioic acid	$C_{11}H_{20}O_4$	215,1289	6,6	91690	28	198897	82	616494	44	637029	36
Valsartan	$C_{24}H_{29}N_5O_3$	434,2198	9,5	1027962	42	1083212	24	587966	32	633970	21
Vanillic acid	$C_8H_8O_4$	167,0350	2,9	391	157	7991	64	91159	75	16720	49
Vitexin	$C_{21}H_{20}O_{10}$	431,0984	4,4	149971	22	151519	37	146047	44	56299	31
Vitexin -O-glucoside	$C_{27}H_{30}O_{15}$	593,1512	3,9	40013	70	43298	71	37631	86	12697	63
Xanthene carboxylic acid	$C_{14}H_{10}O_3$	225,0557	8	256462	59	247013	62	203175	35	170254	39
Xanthurenic acid	$C_{10}H_7NO_4$	204,0302	2,2	3355	56	32674	73	28817	40	100763	19
Xanthurenic acid	$C_{10}H_7NO_4$	204,0302	4,2	1583	245	13595	110	21025	155	1541	104

Tableau A1-3. La Liste des composés détectés dans les échantillons d'effluents prélevés entre mai et juillet 2022 et analysés par LC-HRMS/MS avec une phase mobile d'acétate d'ammonium 0.1% et mode d'ionisation négatif

Composé	Formule chimique	M-H	RT (min)	C18		HLB		MCX		Strata-X-AW	
				Aire (moyenne)	RSD %	Aire (moyenne)	RSD %	Aire (moyenne)	RSD %	Aire (moyenne)	RSD %
Abscisic acid	C ₁₅ H ₂₀ O ₄	263,1282	2,8	61950	15	63833	22	65200	29	71383	16
Acacetin	C ₁₆ H ₁₂ O ₅	283,0605	9,4	24228	76	3958	184	19303	113	18650	80
Acetaminophen	C ₈ H ₉ NO ₂	150,0554	1,7	652000	16	1195167	15	1302333	17	58050	86
Acetaminophen sulfate	C ₈ H ₉ NO ₅ S	230,0122	2	24360	92	73450	54	19617	55	43202	48
Acetylsalicylic acid	C ₉ H ₈ O ₄	179,0343	1,8	13465	136	105567	61	91883	128	108550	83
Afzelin	C ₂₁ H ₂₀ O ₁₀	431,0977	5,4	7178	206	6228	170	6785	175	2358	130
Allopregnanolone sulfate	C ₂₁ H ₃₄ O ₅ S	397,2048	6,4	108167	33	103717	35	109133	32	122917	39
Alpha-Linolenic acid	C ₁₈ H ₃₀ O ₂	277,2166	10,7	13882333	55	10624333	47	13554683	75	16104500	64
Androstanolone sulfate	C ₁₉ H ₃₀ O ₅ S	369,1735	6,3	409167	17	435000	15	422667	17	431833	15
Arachidic acid	C ₂₀ H ₄₀ O ₂	311,2949	12,6	219317	139	792333	30	2680000	50	4023333	23
Asiatic acid	C ₃₀ H ₄₈ O ₅	487,3422	7,7	34000	13	36033	12	37067	12	17400	29
Astragalin	C ₂₁ H ₂₀ O ₁₁	447,0926	4,7	45042	243	23833	224	23658	214	12133	245
Benzoyl hydroxy methoxy benzenesulfonic acid	C ₁₄ H ₁₂ O ₆ S	307,0275	3,9	37017	18	46150	13	47800	17	39633	14
Benzoyllecgonine	C ₁₆ H ₁₉ NO ₄	288,1235	4	37650	22	41383	22	1392	108	4032	88
Bergaptol	C ₁₁ H ₆ O ₄	201,0187	4,8	22367	98	16700	47	20783	33	11900	58
Betulinic acid	C ₃₀ H ₄₈ O ₃	455,3524	12	122383	46	111067	48	181267	37	125050	36
Betulonicacid	C ₃₀ H ₄₆ O ₃	453,3368	5,3	53617	134	54333	136	77267	54	85467	109
BHQ	C ₁₄ H ₂₂ O ₂	221,1540	7,7	86083	81	116950	55	123783	50	115267	40
BHT	C ₁₅ H ₂₄ O	219,1748	13,6	43183	77	20900	38	49500	34	21450	73
BHT+O	C ₁₅ H ₂₄ O ₂	235,1697	9,8	29217	57	33050	84	20400	41	9122	35
BHT-aldehyde	C ₁₅ H ₂₂ O ₂	233,1540	11,3	382000	16	1087333	173	129900	33	168833	20
BPS	C ₁₂ H ₁₀ O ₄ S	249,0220	5,3	221783	82	419333	11	551667	14	70750	29
Bufalin	C ₂₄ H ₃₄ O ₄	385,2378	6,9	83817	54	86867	43	97353	49	97567	49
Butoxyethoxy acetic acid	C ₈ H ₁₆ O ₄	175,0969	1,6	54817	39	244783	119	325667	127	705833	103
Capric acid	C ₁₀ H ₂₀ O ₂	171,1384	6,5	1416667	49	2048500	45	531283	52	1604333	45
Carboxy tetrahydrocannabinol	C ₂₁ H ₂₈ O ₄	343,1908	9,1	54383	22	37033	11	45000	16	47433	16
Cholesterol sulfate	C ₂₇ H ₄₆ O ₄ S	465,3037	11,2	1698833	40	727500	33	1253333	46	1123167	40
Cholic acid	C ₂₄ H ₄₀ O ₅	407,2796	6,5	2463250	60	2709050	52	3012600	52	2696833	54

Chrysanthemic acid	C ₁₀ H ₁₆ O ₂	167,1071	4,4	44867	52	64367	36	33017	24	51700	45
Chrysin	C ₁₅ H ₁₀ O ₄	253,0500	8,9	27433	198	7353	217	20782	197	16565	201
Cinnamic acid	C ₉ H ₈ O ₂	147,0445	1,9	643	245	38298	95	8928	185	52328	126
Citronellic acid	C ₁₀ H ₁₈ O ₂	169,1227	5,5	140200	51	186983	44	75050	43	156183	48
Cortisol 21-sulfate	C ₂₁ H ₃₀ O ₉ S	457,1531	5	25533	79	24150	70	18133	22	18133	25
CP 47,497 C8-homolog	C ₂₄ H ₃₄ O ₂	353,2479	11,9	107983	62	78283	36	187467	60	260667	42
Daidzein	C ₁₅ H ₁₀ O ₄	253,0500	5,9	556500	41	369833	32	460167	65	82983	40
Daidzein 4'-sulfate	C ₁₅ H ₁₂ O ₅ S	303,0326	3,8	23167	19	21217	16	30333	20	26650	16
DBP2	C ₁₄ H ₂₂ O	205,1591	11,5	683833	19	537333	33	1916667	34	531833	11
Dehydroepiandrosterone sulfate	C ₁₉ H ₂₈ O ₅ S	367,1578	6,1	649167	22	633667	19	652833	24	693000	19
Deoxycholic acid	C ₂₄ H ₄₀ O ₄	391,2847	7,7	8024633	58	9247200	53	9373110	55	8604500	55
Di-tert-butyl-4-hydroxybenzoic acid	C ₁₅ H ₂₄ O ₃	251,1646	7,1	101800	17	90383	8	112967	21	253167	18
Dibromo -hydroxybenzonitrile	C ₇ H ₃ Br ₂ NO	273,8502	2,9	303	245	10493	82	16508	84	11719	98
Dichlorosalicylic acid	C ₇ H ₄ Cl ₂ O ₃	204,9458	3,9	54383	19	38783	29	79383	10	67233	14
Diclofenac	C ₁₄ H ₁₁ Cl ₂ NO ₂	294,0087	6,2	49817	19	38150	20	46433	17	52550	15
Dihydroxy methylcoumarin	C ₁₀ H ₈ O ₄	191,0343	5,5	17983	44	17933	29	20933	26	2920	50
Dihydroxy octadecenoic acid	C ₁₈ H ₃₄ O ₄	313,2378	7	797900	63	1049600	54	841438	66	760450	66
Dihydroxyacetophenone	C ₈ H ₈ O ₃	151,0394	2,8	5990	70	0	0	22583	46	11808	37
Dimethoxy trihydroxyflavone	C ₁₇ H ₁₄ O ₇	329,0660	7,3	51150	55	9827	31	15213	52	10893	43
Dimethoxy-4-hydroxycinnamic acid	C ₁₁ H ₁₅ O ₅	226,0840	2	20618	64	24350	33	15617	38	23460	30
Dimethyl carboxyethyl hydroxychroman	C ₁₄ H ₁₈ O ₄	249,1126	3,4	53327	45	45250	38	64983	13	74750	17
Dimethyl carboxyethyl hydroxychroman	C ₁₄ H ₁₈ O ₄	249,1126	3,1	60167	16	50433	16	64983	13	72900	16
Dimethyl eicosadienoic acid	C ₂₂ H ₄₀ O ₂	335,2949	12,5	41467	41	49017	25	194133	55	233833	36
Dipalmitoleoyl glycerophosphoethanolamine	C ₃₇ H ₇₀ NO ₈ P	686,4760	13,7	590767	163	125583	17	413700	138	4003	193
Dodecanedioic acid	C ₁₂ H ₂₂ O ₄	229,1439	2,9	113583	37	106667	32	253667	23	273333	17
Dodecanoic acid	C ₁₂ H ₂₄ O ₂	229,1439	8,5	6321000	51	6907667	45	4404500	67	5768333	53
Dodecenoic acid	C ₁₂ H ₂₂ O ₂	229,1439	7,5	402667	45	433167	41	367167	45	361833	39
Dodecyl sulfate	C ₁₂ H ₂₅ SO ₄	264,1394	7	7596333	48	7519500	43	6784667	61	7732500	49
Dodecyl sulfate	C ₁₂ H ₂₅ SO ₄	264,1394	7,5	6061667	20	6231667	18	5050000	32	6433333	19

Dodecylbenzenesulfonic acid	C ₁₈ H ₃₀ O ₃ S	326.1916	13,6	3833	245	17273	107	29350	193	36167	245
Eicosatrienoic acid	C ₂₀ H ₃₄ O ₂	305,2479	11,7	331500	45	233667	23	419583	63	574000	34
Eicosenoic acid	C ₂₀ H ₃₈ O ₂	309,2792	12,3	1174167	66	1556333	47	5294000	62	6425000	53
Epoxy octadecenoic acid	C ₁₈ H ₃₂ O ₃	295,2272	9,4	2456333	59	2461500	49	2127383	59	939133	54
Erucic acid	C ₂₂ H ₄₂ O ₂	337,3105	12,7	208617	71	296333	37	1395000	47	1582500	28
Ethyl 3-hydroxybenzoate	C ₉ H ₁₀ O ₃	165,0551	6	36667	34	38417	34	37805	37	2332	84
Fatty acid C20:4	C ₂₀ H ₃₂ O ₂	303,2323	11,3	800667	40	541500	22	869150	63	971667	47
Furancarboxylic acid, tetrahydro methylene octyl	C ₁₂ H ₂₀ O ₃	211,1333	3,9	19717	6	22333	25	22200	21	29333	46
Furosemide	C ₁₂ H ₁₁ ClN ₂ O ₅ S	328,9998	4	31567	24	20083	46	37450	22	38617	24
Genistein	C ₁₅ H ₁₀ O ₅	269,0449	7	367500	35	91967	36	229343	60	112800	37
Ginkgolic Acid C15:1	C ₂₁ H ₃₂ O ₃	331,2272	10,2	12727	42	5845	59	22375	47	22617	23
Glycocholic acid	C ₂₆ H ₄₃ NO ₆	464,3011	5	32967	25	41233	15	30717	46	51667	35
Glycoursodeoxycholic acid	C ₂₆ H ₄₃ NO ₅	448,3062	6,7	217687	53	234637	49	256475	51	288110	52
Glycyrrhetic acid	C ₃₀ H ₄₆ O ₄	469,3317	3,3	3585	82	2613	102	2707	41	1235	99
Glycyrrhetic acid	C ₃₀ H ₄₆ O ₄	469,3317	11,9	137333	10	5125	29	7045	40	2753	85
Hederagenin	C ₃₀ H ₄₈ O ₄	471,3473	10,6	193167	22	183667	17	181150	32	74017	30
Heptadecanoic acid	C ₁₇ H ₃₄ O ₂	269,2479	11,6	1338000	26	1416667	23	3309833	47	4858333	27
Hesperetin	C ₁₆ H ₁₄ O ₆	301,0711	7,3	355000	23	150733	24	294877	45	89750	32
Hesperidin	C ₂₈ H ₃₄ O ₁₅	609,1818	5,5	18242	77	17275	75	12477	84	1417	84
Hexadecanedioic acid	C ₁₆ H ₃₀ O ₄	285,2065	4,9	13820	39	26150	94	17525	42	11060	68
Hexadecenoic acid	C ₁₆ H ₃₀ O ₂	253,2166	10,7	29778333	57	27030000	36	29262000	67	37906667	59
Hydrochlorothiazide	C ₇ H ₈ ClN ₃ O ₄ S ₂	295,9565	2,9	12495	44	28267	17	34233	17	1211	33
Hydroperoxy eicosapentaenoic acid	C ₂₀ H ₃₀ O ₄	333,2065	5,7	62983	18	66250	18	67233	18	62483	18
Hydroperoxy eicosapentaenoic acid	C ₂₀ H ₃₀ O ₄	333,2065	6,8	101400	17	120383	18	89800	31	21817	23
Hydroxy choleonic acid	C ₂₄ H ₃₈ O ₄	389,2691	10,3	1381250	61	1260100	55	1305167	58	1036083	68
Hydroxy eicosadienoic acid	C ₂₀ H ₃₆ O ₃	323,2585	9,5	12142	35	10285	71	10052	37	12312	61
Hydroxy methoxyacetophenone	C ₉ H ₁₀ O ₃	165,0551	4,2	37617	48	47883	31	44950	38	5247	33
Hydroxy methoxybenzaldehyde	C ₈ H ₈ O ₃	151,0394	3,7	3663	110	41957	41	38457	39	19217	15
Hydroxy-3-methylbenzoic acid	C ₈ H ₈ O ₃	151,0394	1,7	6010	27	51483	35	41650	39	55300	51
Hydroxyarachidonic acid	C ₂₀ H ₃₂ O ₃	319,2272	8,8	35367	54	29517	60	59950	109	22412	54

Hydroxybenzaldehyde	C ₇ H ₆ O ₂	121,0288	3	18650	43	310333	49	432733	47	81583	15
Hydroxybenzoic acid propyl ester	C ₁₀ H ₁₂ O ₃	179,0707	4,2	321167	24	280500	20	331333	29	28683	22
Hydroxycapric acid	C ₁₀ H ₂₀ O ₃	187,1333	4,2	546667	41	632833	39	745483	47	741333	41
Hydroxycinnamic acid	C ₉ H ₈ O ₃	163,0394	7,8	74267	13	43917	16	74000	10	7692	20
Hydroxycoumarin	C ₉ H ₆ O ₃	161,0238	4,3	82700	33	113600	26	125850	39	8108	34
Hydroxydodecanoic acid	C ₁₂ H ₂₄ O ₃	215,1646	4,9	79717	48	88700	40	88483	54	90350	36
Hydroxyhexadecanoic acid	C ₁₆ H ₃₂ O ₃	271,2272	9	169700	78	118250	52	411000	48	361500	21
Hydroxyhexadecanoic acid	C ₁₆ H ₃₂ O ₃	271,2272	7,9	750667	34	765000	33	648733	51	1109833	30
Hydroxyindole	C ₈ H ₇ NO	132,0448	3,9	6177	51	6792	43	6610	45	0	0
Hydroxymyristic acid	C ₁₄ H ₂₈ O ₃	243,1959	7,6	170567	51	180333	44	264833	20	264000	22
Hydroxymyristic acid	C ₁₄ H ₂₈ O ₃	243,1959	6,7	297817	60	324167	50	315333	57	332017	50
Hydroxyoctadecanoic acid	C ₁₈ H ₃₆ O ₃	299,2585	9,3	5618333	47	5058333	34	4305000	71	5020000	46
Hydroxyoctanoic acid	C ₈ H ₁₆ O ₃	159,1020	1,9	22960	54	97750	49	175150	48	203383	38
Hydroxyphenethyl alcohol	C ₈ H ₁₀ O ₂	137,0601	2,3	58680	48	70482	43	70100	49	1405	85
Hydroxyphenyl propionic acid	C ₉ H ₁₀ O ₃	165,0551	1,8	1069	78	2888	71	22983	86	6767	43
Hydroxyphenyl propionic acid	C ₉ H ₁₀ O ₃	165,0551	2,8	7078	65	29100	58	30100	19	36133	20
Hydroxyvalsartan	C ₂₄ H ₂₉ N ₅ O ₄	450,2140	3	13633	16	13950	19	9735	20	14617	25
Hyodeoxycholic acid	C ₂₄ H ₄₀ O ₄	391,2847	6,7	366783	55	394450	49	421645	51	389100	42
Ibuprofen	C ₁₃ H ₁₈ O ₂	205,1227	5,7	349333	12	365333	14	325833	13	348500	15
Ibuprofen+O	C ₁₃ H ₁₈ O ₃	221,1177	4,2	135833	24	106367	33	126650	22	138167	18
Indole-3-carboxylic acid	C ₉ H ₇ NO ₂	160,0397	2	7317	245	20773	212	65533	15	16843	132
Indole-3-propanoic acid	C ₁₁ H ₁₁ NO ₂	188,0710	2,4	7700	130	66117	80	81133	88	112067	74
Indole-3-pyruvate	C ₁₁ H ₉ NO ₃	202,0503	6,3	1449	96	2153	60	11207	29	0	0
Indole-6-carboxaldehyde	C ₉ H ₇ NO	144,0448	4,7	141700	51	177600	36	229567	40	134267	16
Indoleacetic acid	C ₁₀ H ₉ NO ₂	174,0554	1,8	0	0	0	0	39767	83	0	0
Indoleacrylic acid	C ₁₁ H ₉ NO ₂	186,0554	2,9	16217	20	51728	57	66883	50	63567	50
Indoxyl sulfate	C ₈ H ₇ NO ₄ S	212,0016	1,7	66033	60	3217500	42	464150	44	1640500	46
Isopentenyladenine	C ₁₀ H ₁₃ N ₅	202,1092	5	20933	19	22150	17	0	0	2078	33
Isorhynchophylline	C ₂₂ H ₂₈ N ₂ O ₄	383,1970	2	219983	83	184850	73	228667	86	251167	81
Isoschaftoside	C ₂₆ H ₂₈ O ₁₄	563,1400	3,6	99000	37	89667	40	112550	42	83267	37
Kaempferol-3-O-rutinoside	C ₂₇ H ₃₀ O ₁₅	509,1505	4,4	8033	245	7467	224	8000	224	1592	245

Kaurenoic acid	C ₂₀ H ₃₀ O ₂	301,2166	11,6	40433	59	87317	35	69467	38	45217	31
Ketodeoxycholic acid	C ₂₄ H ₃₈ O ₄	389,2691	7,9	639862	67	675698	60	697217	59	611995	65
Linoleic acid	C ₁₈ H ₃₂ O ₂	279,2323	11,5	47974167	60	39023333	48	58062000	72	73236667	59
Lithocholic acid	C ₂₄ H ₄₀ O ₃	375,2898	9,6	2335500	60	2372333	53	2512487	60	1844067	66
Lumichrome	C ₁₂ H ₁₀ N ₄ O ₂	199,0632	5,4	69350	17	65617	17	108483	15	45400	11
Maslinic acid	C ₃₀ H ₄₈ O ₄	471,3473	12,8	26817	41	1178	155	138	224	0	0
Methyl 3-hydroxybenzoate	C ₈ H ₈ O ₃	151,0394	4,7	192083	47	216217	45	189525	48	25283	34
Methyl nitrophenol	C ₇ H ₇ NO ₃	152,0347	6	17740	91	54223	121	58865	118	6942	104
Methyl thioacetaminophen	C ₉ H ₁₁ NO ₂ S	196,0431	3,5	57450	19	35000	28	45500	28	1697	53
Methyl-6-nonenoic acid	C ₁₀ H ₁₈ O ₂	169,1227	4,8	107750	29	135167	21	39517	52	110633	22
Methyladenine	C ₆ H ₇ N ₅	148,0622	1,7	38967	23	35567	24	1378	54	2247	16
Methylbenzoic acid	C ₈ H ₈ O ₂	135,0445	2	0	0	0	0	5742433	57	4633	245
Methyldodecenoic acid	C ₁₃ H ₂₄ O ₂	211,1697	8	85783	45	98733	31	92167	105	125417	105
Methyldodecenoic acid	C ₁₃ H ₂₄ O ₂	211,1697	8,3	208667	21	240333	21	172700	50	196333	47
Methylphenylacetic acid	C ₉ H ₁₀ O ₂	149,0601	2,2	3158	59	57350	83	407167	102	238517	60
Mono-2-ethylhexyl phthalate	C ₁₆ H ₂₂ O ₄	277,1439	6,1	244167	14	246333	9	262833	16	336500	13
Monobutyl phthalate	C ₁₂ H ₁₄ O ₄	221,0813	2,9	88883	29	97350	26	126483	39	175500	17
Muricholic acid	C ₂₄ H ₄₀ O ₅	407,2796	5,1	377333	53	408283	48	426867	49	344125	53
Mycophenolic acid	C ₁₇ H ₂₀ O ₆	319,1180	5,4	261833	14	212667	14	216500	14	283333	12
Myristic acid	C ₁₄ H ₂₈ O ₂	227,2010	10	7390000	50	6843333	38	10295500	67	13046667	46
Myristoyl hydroxy glycerophosphoethanolamine	C ₁₉ H ₄₀ NO ₇ P	424,2463	9,8	15397	79	0	0	1070	164	17220	96
N-Lauroylsarcosine	C ₁₅ H ₂₉ NO ₃	270,2068	7	2311667	20	2553333	17	2511667	21	2906667	17
n-Octyl sulfate	C ₈ H ₁₈ O ₄ S	209,0846	4,4	2391667	14	2451667	11	2255000	12	2051667	13
n-Octyl sulfate	C ₈ H ₁₈ O ₄ S	209,0846	5	412333	57	422333	57	379000	55	339500	58
Naproxen	C ₁₄ H ₁₄ O ₃	229,0864	4,7	47000	16	38883	14	44817	16	40767	17
Narcissoside	C ₂₈ H ₃₂ O ₁₆	623,1611	4,6	6278	193	4032	212	5652	152	1106	208
Naringenin	C ₁₅ H ₁₂ O ₅	271,0605	6,8	438167	134	249717	145	473217	141	205200	169
Nitrophenol	C ₆ H ₅ NO ₃	138,0190	4,3	16145	58	301583	88	360667	85	46517	74
Nitrophenol	C ₆ H ₅ NO ₃	138,0190	2,3	3348	37	25880	105	46400	107	36950	99
Nonadecanoic acid	C ₁₉ H ₃₈ O ₂	297,2792	12,3	68317	78	111517	34	400633	54	655167	26
Nonanoic acid	C ₉ H ₁₈ O ₂	157,1227	5,3	142767	26	654000	154	138000	30	549500	21
Norharmane	C ₁₁ H ₈ N ₂	167,0608	7,2	19817	32	27750	22	1531	61	9535	19
Nutriacholic acid	C ₂₄ H ₃₈ O ₄	389,2691	7,4	1424417	64	1564533	58	1693333	59	1583733	59
O-Desmethylvenlafaxine	C ₁₆ H ₂₅ NO ₂	262,1806	6	42150	17	45517	18	0	0	1797	52

o-Phenylphenol	C ₁₂ H ₁₀ O	169,0652	4,6	55850	18	50783	17	60983	13	63950	16
Octadecenoic acid	C ₁₈ H ₃₄ O ₂	281,2479	11,7	68905000	65	70018333	48	122741667	62	152150000	52
Oleic acid	C ₁₈ H ₃₄ O ₂	281,2479	14	31467	67	47767	37	74517	93	168700	68
Oleoyl glycerophosphoethanolamine	C ₂₃ H ₄₆ NO ₇ P	478,2933	11,1	141850	77	21635	95	26017	63	85383	60
Oleoyl-hydroxy glycerophospho glycerol	C ₃₉ H ₇₂ O ₁₀ P	730,4784	9,2	67517	30	61450	43	86033	26	36002	51
Oxocholic acid	C ₂₄ H ₃₈ O ₅	405,2640	6,1	305373	56	320617	49	339558	51	316627	54
Oxostearic acid	C ₁₈ H ₃₄ O ₃	297,2429	10	2669500	69	2262167	48	2344333	69	2897833	50
Oxybenzone-CH2	C ₁₃ H ₁₀ O ₃	213,0551	8,3	125400	48	57233	30	130117	45	38550	43
Palmitoyl hydroxy glycerophospho glycerol	C ₃₇ H ₇₂ O ₁₀ P	706,4784	8,9	29067	91	0	0	12752	40	22400	27
Palmitoyl hydroxy glycerophosphoethanolamine	C ₂₁ H ₄₄ NO ₇ P	452,2776	10,8	750033	145	92650	140	30950	62	163300	57
Pantethine	C ₂₂ H ₄₂ N ₄ O ₈ S ₂	553,2365	4	3075	157	4510	92	2985	73	1883	63
Pentadecanoic acid	C ₁₅ H ₃₀ O ₂	241,2166	10,7	1197667	34	1132833	31	2391333	57	3091667	41
Phenylbutyric acid	C ₁₀ H ₁₂ O ₂	163,0758	3,4	20117	36	43933	10	34683	18	45600	15
Phytosphingosine 1-phosphate	C ₁₈ H ₃₈ NO ₇ P	410,2307	12,9	10738	54	1897	29	1316	93	0	0
Picric acid	C ₆ H ₃ N ₃ O ₇	227,9892	3,6	3820	67	3520	51	14372	43	395000	4
Pinocembrin	C ₁₅ H ₁₂ O ₄	255,0656	9	404033	212	164823	198	378445	198	230940	212
Pinolenic acid	C ₁₈ H ₃₀ O ₂	277,2166	10,7	13882333	55	10624333	47	13554683	75	16104500	64
Pregnandiolone sulfate	C ₂₁ H ₃₂ O ₆ S	411,1840	7,3	100717	18	101483	16	104150	17	107517	17
Quinoline-2,8-diol	C ₉ H ₇ NO ₂	160,0397	3,7	48067	24	40683	26	47483	19	3848	48
Ricinoleic acid	C ₁₈ H ₃₄ O ₃	297,2429	8,9	1676667	38	1844167	36	1557950	58	1385000	46
Rosuvastatin	C ₂₂ H ₂₈ FN ₃ O ₆ S	480,1603	6,1	169667	19	169833	18	181667	16	218167	16
Scopoletin	C ₁₀ H ₈ O ₄	191,0343	4,5	35200	46	32900	48	34262	57	1592	150
Secoisolariciresinol	C ₂₀ H ₂₆ O ₆	361,1650	5,5	146000	16	115017	20	109783	18	5255	81
Stearic acid	C ₁₈ H ₃₆ O ₂	283,2636	12,4	6603333	28	12323333	28	41133333	49	70633333	22
Stearidonic acid	C ₁₈ H ₂₈ O ₂	275,2010	10,1	243900	42	218050	36	190467	56	181667	45
Stearoyl hydroxy glycerophosphoethanolamine	C ₂₃ H ₄₈ NO ₇ P	480,3089	11,5	33228	129	27447	76	16008	52	13135	28
Steviol	C ₂₀ H ₃₀ O ₃	317,2116	9	350167	30	398000	18	448000	18	56300	16
Sucralose	C ₁₂ H ₁₉ Cl ₃ O ₈	395,0066	3	255333	21	240667	20	196500	19	6227	33
Sulfasalazine	C ₁₈ H ₁₄ N ₄ O ₅ S	397,0606	5,1	23717	30	9955	27	7237	30	34183	29
Syringaldehyde	C ₉ H ₁₀ O ₄	181,0500	11,9	17405	75	31947	46	40570	44	6637	26
Syringic acid	C ₉ H ₁₀ O ₅	197,0449	3,8	271023	237	250808	217	287898	210	10195	195
Taurocholic acid	C ₂₆ H ₄₅ NO ₇ S	514,2837	6	235405	53	262955	47	216903	50	260357	50

Taurodeoxycholic acid	C ₂₆ H ₄₅ NO ₆ S	498,2888	6,7	185192	59	212458	51	139120	62	218240	55
TBHQ+SO ₃	C ₁₀ H ₁₄ O ₅ S	245,0483	3,3	41933	27	52717	14	46067	16	42733	13
Telmisartan	C ₃₃ H ₃₀ N ₄ O ₂	513,2289	7,7	74617	15	67950	12	0	0	65300	12
Tetradecanedioic acid	C ₁₄ H ₂₆ O ₄	257,1752	4,6	82183	68	124800	46	166650	61	179350	57
Theophylline	C ₇ H ₈ N ₄ O ₂	179,0568	2,2	145833	17	130183	44	142333	14	4187	20
Topiramate	C ₁₂ H ₂₁ NO ₈ S	338,0908	5,8	29000	15	30533	12	30250	13	1045	89
Traumatic acid	C ₁₂ H ₂₀ O ₄	227,1282	3,6	81183	29	256667	30	210500	51	329500	55
Trehalose 6-phosphate	C ₁₂ H ₂₂ O ₁₆ P	452,0566	2,1	144150	43	109517	36	69933	42	72050	34
Tridecanoic acid	C ₁₃ H ₂₆ O ₂	213,1853	9,3	319667	29	1090333	154	382600	60	483500	23
Trihydroxycholestanic acid	C ₂₇ H ₄₆ O ₅	449,3266	10,3	34862	167	17547	86	10332	28	35347	183
Trimethyl carboxyethyl hydroxychroman	C ₁₄ H ₂₀ O ₄	251,1282	4,1	253667	20	144933	27	164167	23	217500	25
Trimethyluric acid	C ₈ H ₁₀ N ₄ O ₃	209,0674	2,1	282	245	552	224	109267	37	37615	84
Tryptophan	C ₁₁ H ₁₂ N ₂ O ₂	203,0819	1,7	52833	59	72833	57	7462	29	52433	26
Undecanedicarboxylic acid	C ₁₃ H ₂₄ O ₄	243,1595	2,1	227883	62	373050	59	610317	49	632517	49
Undecanedioic acid	C ₁₁ H ₂₀ O ₄	215,1282	2,3	11832	87	23773	72	142067	57	19117	63
Undecanoic acid	C ₁₁ H ₂₂ O ₂	185,1540	7,2	302667	31	390500	31	132883	45	284500	30
Valproic acid	C ₈ H ₁₆ O ₂	143,1071	4	317433	66	653317	51	73533	43	755833	37
Valsartan	C ₂₄ H ₂₉ N ₅ O ₃	434,2191	4,2	366500	19	380667	18	319333	21	413000	17
Vitexin	C ₂₁ H ₂₀ O ₁₀	431,0977	4,1	17933	32	15283	32	17305	32	6787	23
Vitexin 4-O-glucoside	C ₂₇ H ₃₀ O ₁₅	593,1505	3,7	10732	55	8528	34	11042	60	2000	245
Xanthene carboxylic acid	C ₁₄ H ₁₀ O ₃	225,0551	3,8	121733	26	112183	16	124033	26	144267	32
Xanthohumol	C ₂₁ H ₂₂ O ₅	353,1388	11,2	47917	49	4128	34	13093	59	10655	75
Xanthurenic acid	C ₁₀ H ₇ NO ₄	204,0296	2,5	9722	124	30425	101	57963	108	40650	127
β-Ecdysone	C ₂₇ H ₄₄ O ₇	479,3008	11,2	42033	92	7633	62	17297	80	25567	55

ANNEXE B – DONNÉES SUPPLÉMENTAIRES DES EAUX POTABLES

Tableau B1- 1. Aires des pics des contaminants de l'usine A (eau brute) en mode FA (+)

#	Nom	RT (min)	Formule	m/z	APR	FEB	JUNE	MAR	MAY
1	BHT-aldehyde	11.04	C ₁₅ H ₂₂ O ₂	235.1699	5.12E+04	5.86E+04	8.98E+04	6.06E+04	8.39E+04
2	BHT-acid	9.79	C ₁₅ H ₂₂ O ₃	251.1648	1.32E+05	1.79E+05	4.86E+04	8.41E+04	1.24E+05
4	Atratone	3.28	C ₉ H ₁₇ N ₅ O	212.1513	8.95E+05	6.12E+05	9.04E+06	5.20E+05	3.97E+05
5	Atrazine	6.65	C ₈ H ₁₄ ClN ₅	216.1017	8.90E+05	1.12E+06	1.88E+05	8.67E+05	3.69E+05
6	Atrazine desisopropyl	2.75	C ₅ H ₈ ClN ₅	174.0548	3.03E+04	6.82E+04	1.73E+04	2.74E+04	6.09E+04
7	Atrazine-2-hydroxy	3	C ₈ H ₁₅ N ₅ O	198.1379	2.86E+04	1.27E+05	1.38E+05	2.16E+04	1.84E+04
8	Atrazine-desethyl	3.8	C ₆ H ₁₀ ClN ₅	188.0704	8.22E+05	1.14E+06	9.64E+05	7.70E+05	6.59E+05
9	Benzophenone	9.41	C ₁₃ H ₁₀ O	183.0811	3.89E+05	0.00E+00	0.00E+00	3.13E+05	2.68E+04
10	Benzoyllecgonine	4.04	C ₁₆ H ₁₉ NO ₄	290.1393	0.00E+00	1.77E+04	4.48E+04	0.00E+00	1.19E+04
12	Caffeine	3.45	C ₈ H ₁₀ N ₄ O ₂	195.0883	1.59E+04	1.52E+04	0.00E+00	1.15E+04	1.62E+04
13	Cocaine	5.23	C ₁₇ H ₂₁ NO ₄	304.1550	2.86E+05	2.99E+05	1.18E+04	2.93E+05	2.55E+05
15	DEET	7.3	C ₁₂ H ₁₇ NO	192.1390	2.44E+06	1.11E+06	1.26E+06	2.22E+06	1.47E+06
16	Dihydrobupropion	5.1	C ₁₃ H ₂₀ ClNO	242.1313	6.74E+05	1.32E+06	1.07E+06	6.17E+05	6.66E+05
17	Etofenprox	4	C ₂₅ H ₂₈ O ₃	377.2118	6.77E+05	4.86E+05	0.00E+00	1.67E+04	0.00E+00
18	Fexofenadine	8.4	C ₃₂ H ₃₉ NO ₄	502.2958	2.94E+04	4.78E+04	2.32E+04	2.53E+04	2.28E+04
19	Gabapentin	3.8	C ₉ H ₁₇ NO ₂	172.1339	7.24E+04	6.39E+04	8.23E+03	7.15E+04	5.34E+04
20	Haloperidol	7.27	C ₂₁ H ₂₃ ClFNO ₂	376.1481	3.97E+04	4.73E+04	0.00E+00	3.91E+04	3.78E+04
21	Lidocaine	3.34	C ₁₄ H ₂₂ N ₂ O	235.1812	5.31E+05	1.07E+06	8.85E+05	4.07E+05	5.11E+05
23	Metolachlor	9.83	C ₁₅ H ₂₂ ClNO ₂	284.1418	5.66E+06	2.14E+06	1.81E+06	4.40E+06	2.63E+06
23	Metolachlor ESA	5.78	C ₁₅ H ₂₃ NO ₅ S	330.1376	5.59E+05	5.12E+05	3.92E+04	9.32E+03	2.67E+04
24	Metolachlor OA	6.68	C ₁₅ H ₂₁ NO ₄	280.1550	6.85E+04	1.32E+05	2.61E+04	8.00E+04	1.66E+05
25	Metoprolol acid	2.73	C ₁₄ H ₂₁ NO ₄	268.1550	6.96E+03	0.00E+00	0.00E+00	5.30E+03	0.00E+00
27	O-Desmethylvenlafaxine	3.75	C ₁₆ H ₂₅ NO ₂	264.1965	5.81E+05	1.03E+06	7.89E+04	6.84E+05	6.04E+05
28	Ritalinic acid	3.6	C ₁₃ H ₁₇ NO ₂	220.1339	3.49E+05	3.33E+05	7.35E+04	3.74E+05	2.99E+05
30	Tebuconazole	9.64	C ₁₆ H ₂₂ ClN ₃ O	308.1531	7.58E+03	1.88E+04	9.93E+03	5.55E+03	4.97E+03
31	Telmisartan	8.72	C ₃₃ H ₃₀ N ₄ O ₂	515.2448	1.16E+05	3.61E+05	5.60E+03	1.34E+05	7.48E+04
32	Tranexamic acid	2.73	C ₈ H ₁₅ NO ₂	158.1182	6.60E+04	1.09E+05	1.44E+06	4.95E+04	1.24E+05
34	Venlafaxine	5.36	C ₁₇ H ₂₇ NO ₂	278.2121	1.21E+04	9.22E+03	1.81E+05	1.17E+04	2.03E+04

Tableau B1- 2. Aires des pics des contaminants de l'usine B (eau brute) en mode FA (+)

#	Nom	RT (min)	Formule	m/z	APR	FEB	JUNE	MAR	MAY
1	BHT-aldehyde	11.04	C ₁₅ H ₂₂ O ₂	235.1699	4.88E+04	5.03E+04	1.22E+05	3.83E+04	8.55E+04
2	BHT-acid	9.79	C ₁₅ H ₂₂ O ₃	251.1648	9.13E+04	2.18E+05	3.91E+04	7.50E+04	1.34E+05
4	Atratrene	3.28	C ₉ H ₁₇ N ₅ O	212.1513	1.05E+06	7.63E+05	1.09E+07	5.72E+05	4.23E+05
5	Atrazine	6.65	C ₈ H ₁₄ ClN ₅	216.1017	6.61E+05	8.17E+05	3.12E+05	5.37E+05	2.74E+05
6	Atrazine desisopropyl	2.75	C ₅ H ₈ ClN ₅	174.0548	3.46E+04	4.36E+04	1.45E+04	3.27E+04	6.18E+04
7	Atrazine-2-hydroxy	3	C ₈ H ₁₅ N ₅ O	198.1379	2.43E+04	5.95E+04	1.36E+05	1.62E+04	2.68E+04
8	Atrazine-desethyl	3.8	C ₆ H ₁₀ ClN ₅	188.0704	7.54E+05	3.55E+06	9.66E+05	8.95E+05	5.87E+05
9	Benzophenone	9.41	C ₁₃ H ₁₀ O	183.0811	3.10E+05	0.00E+00	7.68E+03	3.09E+05	2.09E+04
10	Benzoyllecgonine	4.04	C ₁₆ H ₁₉ NO ₄	290.1393	0.00E+00	0.00E+00	4.06E+04	6.67E+03	0.00E+00
12	Caffeine	3.45	C ₈ H ₁₀ N ₄ O ₂	195.0883	1.88E+04	1.90E+04	2.34E+03	1.16E+04	1.92E+04
13	Cocaine	5.23	C ₁₇ H ₂₁ NO ₄	304.1550	2.99E+05	1.85E+05	1.26E+04	2.37E+05	2.43E+05
15	DEET	7.3	C ₁₂ H ₁₇ NO	192.1390	2.85E+06	1.53E+06	3.02E+06	5.99E+06	2.18E+06
16	Dihydrobupropion	5.1	C ₁₃ H ₂₀ ClNO	242.1313	5.79E+05	3.49E+06	1.09E+06	8.22E+05	5.83E+05
17	Etofenprox	4	C ₂₅ H ₂₈ O ₃	377.2118	1.03E+04	3.89E+04	2.77E+04	0.00E+00	2.31E+04
18	Fexofenadine	8.4	C ₃₂ H ₃₉ NO ₄	502.2958	2.62E+04	6.06E+04	2.67E+04	2.36E+04	1.88E+04
19	Gabapentin	3.8	C ₉ H ₁₇ NO ₂	172.1339	7.24E+04	4.68E+04	6.81E+03	5.97E+04	5.88E+04
20	Haloperidol	7.27	C ₂₁ H ₂₃ ClFNO ₂	376.1481	3.84E+04	2.42E+04	0.00E+00	3.48E+04	3.38E+04
21	Lidocaine	3.34	C ₁₄ H ₂₂ N ₂ O	235.1812	4.60E+05	2.24E+06	1.01E+06	5.87E+05	5.15E+05
23	Metolachlor	9.83	C ₁₅ H ₂₂ ClNO ₂	284.1418	7.26E+06	4.68E+06	5.26E+06	1.41E+07	4.18E+06
23	Metolachlor ESA	5.78	C ₁₅ H ₂₃ NO ₅ S	330.1376	6.07E+03	7.95E+04	2.45E+04	3.08E+04	9.69E+03
24	Metolachlor OA	6.68	C ₁₅ H ₂₁ NO ₄	280.1550	4.53E+04	1.24E+05	3.05E+04	4.60E+04	7.42E+04
25	Metoprolol acid	2.73	C ₁₄ H ₂₁ NO ₄	268.1550	8.76E+03	0.00E+00	0.00E+00	6.55E+03	0.00E+00
27	O-Desmethylvenlafaxine	3.75	C ₁₆ H ₂₅ NO ₂	264.1965	4.74E+05	8.60E+05	8.96E+04	4.47E+05	5.45E+05
28	Ritalinic acid	3.6	C ₁₃ H ₁₇ NO ₂	220.1339	3.90E+05	2.18E+05	6.66E+04	3.13E+05	2.83E+05
30	Tebuconazole	9.64	C ₁₆ H ₂₂ ClN ₃ O	308.1531	1.98E+04	2.16E+05	1.15E+04	3.09E+04	5.06E+03
31	Telmisartan	8.72	C ₃₃ H ₃₀ N ₄ O ₂	515.2448	1.12E+05	1.65E+05	5.19E+03	1.23E+05	9.88E+04
32	Tranexamic acid	2.73	C ₈ H ₁₅ NO ₂	158.1182	6.21E+04	8.69E+04	1.88E+06	5.22E+04	2.39E+05
34	Venlafaxine	5.36	C ₁₇ H ₂₇ NO ₂	278.2121	9.24E+03	2.11E+04	2.15E+05	9.16E+03	2.54E+04

Tableau B1- 3. Aires des pics des contaminants de l'usine C (eau brute) en mode FA (+)

#	Nom	RT (min)	Formule	m/z	APR	FEB	JUNE	MAR	MAY
1	BHT-aldehyde	11.04	C ₁₅ H ₂₂ O ₂	235.1699	4.23E+04	5.20E+04	1.22E+05	4.85E+04	6.69E+04
2	BHT-acid	9.79	C ₁₅ H ₂₂ O ₃	251.1648	1.38E+05	3.05E+05	7.44E+04	2.41E+05	2.18E+05
4	Atraton	3.28	C ₉ H ₁₇ N ₅ O	212.1513	1.76E+06	7.11E+05	1.14E+07	5.30E+05	4.70E+05
5	Atrazine	6.65	C ₈ H ₁₄ ClN ₅	216.1017	8.19E+05	1.37E+06	2.91E+05	1.19E+06	4.13E+05
6	Atrazine desisopropyl	2.75	C ₅ H ₈ ClN ₅	174.0548	5.74E+04	3.46E+04	1.34E+04	5.13E+04	3.78E+04
7	Atrazine-2-hydroxy	3	C ₈ H ₁₅ N ₅ O	198.1379	3.33E+04	3.72E+04	1.54E+05	2.86E+04	1.69E+04
8	Atrazine-desethyl	3.8	C ₆ H ₁₀ ClN ₅	188.0704	1.07E+06	1.88E+06	8.27E+05	5.37E+05	4.59E+05
9	Benzophenone	9.41	C ₁₃ H ₁₀ O	183.0811	2.98E+05	0.00E+00	0.00E+00	7.77E+04	8.00E+03
10	Benzoylecgonine	4.04	C ₁₆ H ₁₉ NO ₄	290.1393	0.00E+00	0.00E+00	3.25E+04	0.00E+00	0.00E+00
12	Caffeine	3.45	C ₈ H ₁₀ N ₄ O ₂	195.0883	1.82E+04	1.15E+04	0.00E+00	9.53E+03	7.73E+03
13	Cocaine	5.23	C ₁₇ H ₂₁ NO ₄	304.1550	6.51E+04	3.92E+04	7.44E+03	5.30E+04	1.36E+05
15	DEET	7.3	C ₁₂ H ₁₇ NO	192.1390	9.59E+05	5.91E+05	7.53E+05	5.66E+05	1.41E+06
16	Dihydrobupropion	5.1	C ₁₃ H ₂₀ ClNO	242.1313	9.18E+05	1.96E+06	8.58E+05	4.50E+05	3.97E+05
17	Etofenprox	4	C ₂₅ H ₂₈ O ₃	377.2118	1.57E+05	2.36E+04	3.78E+04	0.00E+00	8.43E+03
18	Fexofenadine	8.4	C ₃₂ H ₃₉ NO ₄	502.2958	3.02E+04	6.59E+04	3.13E+04	3.05E+04	1.99E+04
19	Gabapentin	3.8	C ₉ H ₁₇ NO ₂	172.1339	5.15E+03	3.29E+03	6.36E+03	1.01E+04	2.84E+04
20	Haloperidol	7.27	C ₂₁ H ₂₃ ClFNO ₂	376.1481	1.46E+04	9.36E+03	0.00E+00	5.67E+03	1.64E+04
21	Lidocaine	3.34	C ₁₄ H ₂₂ N ₂ O	235.1812	6.53E+05	1.53E+06	9.53E+05	3.42E+05	4.07E+05
23	Metolachlor	9.83	C ₁₅ H ₂₂ ClNO ₂	284.1418	3.25E+06	2.67E+06	1.49E+06	2.02E+06	2.91E+06
23	Metolachlor ESA	5.78	C ₁₅ H ₂₃ NO ₅ S	330.1376	2.39E+05	6.63E+04	1.16E+04	7.56E+03	9.97E+03
24	Metolachlor OA	6.68	C ₁₅ H ₂₁ NO ₄	280.1550	4.26E+04	1.11E+05	3.88E+04	6.94E+04	5.38E+04
25	Metoprolol acid	2.73	C ₁₄ H ₂₁ NO ₄	268.1550	4.74E+03	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00
27	O-Desmethylvenlafaxine	3.75	C ₁₆ H ₂₅ NO ₂	264.1965	5.86E+05	1.10E+06	8.63E+04	8.07E+05	5.46E+05
28	Ritalinic acid	3.6	C ₁₃ H ₁₇ NO ₂	220.1339	3.73E+04	1.50E+04	6.41E+04	5.98E+04	1.67E+05
30	Tebuconazole	9.64	C ₁₆ H ₂₂ ClN ₃ O	308.1531	2.84E+04	2.39E+05	1.25E+04	2.99E+04	6.21E+03
31	Telmisartan	8.72	C ₃₃ H ₃₀ N ₄ O ₂	515.2448	1.11E+05	9.31E+04	7.63E+03	9.29E+04	7.58E+04
32	Tranexamic acid	2.73	C ₈ H ₁₅ NO ₂	158.1182	1.04E+05	9.82E+04	1.89E+06	6.69E+04	1.53E+05
34	Venlafaxine	5.36	C ₁₇ H ₂₇ NO ₂	278.2121	1.26E+04	1.47E+04	1.91E+05	9.49E+03	1.28E+04

Tableau B1- 4 Aires des pics des contaminants de l'usine D (eau brute) en mode FA (+)

#	Nom	RT (min)	Formule	m/z	APR	FEB	JUNE	MAR	MAY
1	BHT-aldehyde	11.04	C ₁₅ H ₂₂ O ₂	235.1699	5.41E+04	8.28E+04	1.26E+05	7.65E+04	9.03E+04
2	BHT-acid	9.79	C ₁₅ H ₂₂ O ₃	251.1648	1.40E+05	2.42E+05	7.64E+04	1.54E+05	2.68E+05
4	Atratrene	3.28	C ₉ H ₁₇ N ₅ O	212.1513	1.30E+06	4.92E+05	1.19E+07	5.12E+05	3.17E+05
5	Atrazine	6.65	C ₈ H ₁₄ ClN ₅	216.1017	6.35E+05	8.37E+05	2.76E+05	8.84E+05	2.77E+05
6	Atrazine desisopropyl	2.75	C ₅ H ₈ ClN ₅	174.0548	5.75E+04	3.88E+04	1.28E+04	6.60E+04	4.28E+04
7	Atrazine-2-hydroxy	3	C ₈ H ₁₅ N ₅ O	198.1379	2.67E+04	4.49E+04	1.48E+05	3.04E+04	1.80E+04
8	Atrazine-desethyl	3.8	C ₆ H ₁₀ ClN ₅	188.0704	1.83E+06	1.22E+06	9.60E+05	5.68E+05	7.33E+05
9	Benzophenone	9.41	C ₁₃ H ₁₀ O	183.0811	2.39E+05	0.00E+00	0.00E+00	9.11E+04	6.48E+03
10	Benzoylgonine	4.04	C ₁₆ H ₁₉ NO ₄	290.1393	0.00E+00	0.00E+00	1.49E+04	0.00E+00	6.75E+03
12	Caffeine	3.45	C ₈ H ₁₀ N ₄ O ₂	195.0883	1.87E+04	7.71E+03	0.00E+00	1.41E+04	9.69E+03
13	Cocaine	5.23	C ₁₇ H ₂₁ NO ₄	304.1550	1.34E+05	4.81E+04	1.01E+04	6.47E+04	1.46E+05
15	DEET	7.3	C ₁₂ H ₁₇ NO	192.1390	1.20E+06	1.45E+05	1.26E+06	5.43E+05	3.05E+06
16	Dihydrobupropion	5.1	C ₁₃ H ₂₀ ClNO	242.1313	1.75E+06	1.29E+06	1.02E+06	4.99E+05	6.78E+05
17	Etofenprox	4	C ₂₅ H ₂₈ O ₃	377.2118	3.27E+04	6.56E+05	3.47E+04	2.62E+04	0.00E+00
18	Fexofenadine	8.4	C ₃₂ H ₃₉ NO ₄	502.2958	2.92E+04	3.00E+04	2.75E+04	2.98E+04	2.16E+04
19	Gabapentin	3.8	C ₉ H ₁₇ NO ₂	172.1339	2.34E+04	7.09E+03	7.14E+03	1.40E+04	2.34E+04
20	Haloperidol	7.27	C ₂₁ H ₂₃ ClFNO ₂	376.1481	2.14E+04	0.00E+00	0.00E+00	8.79E+03	1.96E+04
21	Lidocaine	3.34	C ₁₄ H ₂₂ N ₂ O	235.1812	9.51E+05	9.33E+05	9.83E+05	3.22E+05	5.88E+05
23	Metolachlor	9.83	C ₁₅ H ₂₂ ClNO ₂	284.1418	3.65E+06	4.69E+05	2.78E+06	1.72E+06	6.77E+06
23	Metolachlor ESA	5.78	C ₁₅ H ₂₃ NO ₅ S	330.1376	4.32E+03	4.33E+05	8.13E+04	2.67E+04	0.00E+00
24	Metolachlor OA	6.68	C ₁₅ H ₂₁ NO ₄	280.1550	5.17E+04	1.11E+05	2.53E+04	5.60E+04	1.89E+05
25	Metoprolol acid	2.73	C ₁₄ H ₂₁ NO ₄	268.1550	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00
27	O-Desmethylvenlafaxine	3.75	C ₁₆ H ₂₅ NO ₂	264.1965	6.60E+05	8.75E+05	7.87E+04	5.76E+05	6.63E+05
28	Ritalinic acid	3.6	C ₁₃ H ₁₇ NO ₂	220.1339	1.15E+05	3.86E+04	6.64E+04	6.92E+04	1.51E+05
30	Tebuconazole	9.64	C ₁₆ H ₂₂ ClN ₃ O	308.1531	1.72E+04	6.84E+04	1.22E+04	1.19E+04	8.62E+03
31	Telmisartan	8.72	C ₃₃ H ₃₀ N ₄ O ₂	515.2448	1.41E+05	8.53E+04	7.14E+03	1.17E+05	6.42E+04
32	Tranexamic acid	2.73	C ₈ H ₁₅ NO ₂	158.1182	9.29E+04	8.96E+04	1.89E+06	5.79E+04	1.37E+05
34	Venlafaxine	5.36	C ₁₇ H ₂₇ NO ₂	278.2121	8.88E+03	7.57E+03	7.09E+04	7.13E+03	1.59E+04

Tableau B1- 5. Aires des pics des contaminants de l'usine E (eau brute) en mode FA (+)

#	Nom	RT (min)	Formule	m/z	APR	FEB	JUNE	MAR	MAY
---	-----	----------	---------	-----	-----	-----	------	-----	-----

1	BHT-aldehyde	11.04	C ₁₅ H ₂₂ O ₂	235.1699	5.25E+04	9.38E+04	1.12E+05	6.98E+04	8.87E+04
2	BHT-acid	9.79	C ₁₅ H ₂₂ O ₃	251.1648	2.02E+05	3.23E+05	5.71E+04	1.58E+05	2.83E+05
4	Atraton	3.28	C ₉ H ₁₇ N ₅ O	212.1513	1.27E+06	3.02E+05	1.01E+07	7.11E+05	7.36E+05
5	Atrazine	6.65	C ₈ H ₁₄ ClN ₅	216.1017	7.54E+05	1.28E+06	1.59E+05	1.22E+06	4.00E+05
6	Atrazine desisopropyl	2.75	C ₅ H ₈ ClN ₅	174.0548	4.93E+04	4.37E+04	1.37E+04	5.45E+04	3.42E+04
7	Atrazine-2-hydroxy	3	C ₈ H ₁₅ N ₅ O	198.1379	4.62E+04	8.97E+04	1.51E+05	4.36E+04	1.50E+04
8	Atrazine-desethyl	3.8	C ₆ H ₁₀ ClN ₅	188.0704	7.42E+05	1.49E+06	1.03E+06	1.46E+06	5.14E+05
9	Benzophenone	9.41	C ₁₃ H ₁₀ O	183.0811	1.58E+05	0.00E+00	0.00E+00	1.01E+05	0.00E+00
10	Benzoylecgonine	4.04	C ₁₆ H ₁₉ NO ₄	290.1393	0.00E+00	9.35E+03	1.52E+04	0.00E+00	9.42E+03
12	Caffeine	3.45	C ₈ H ₁₀ N ₄ O ₂	195.0883	1.12E+04	9.56E+03	8.24E+02	1.36E+04	5.05E+03
13	Cocaine	5.23	C ₁₇ H ₂₁ NO ₄	304.1550	7.34E+04	4.30E+04	7.66E+03	6.88E+04	8.14E+04
15	DEET	7.3	C ₁₂ H ₁₇ NO	192.1390	1.04E+06	1.52E+05	9.24E+05	9.64E+05	1.65E+06
16	Dihydrobupropion	5.1	C ₁₃ H ₂₀ ClNO	242.1313	5.93E+05	1.56E+06	1.09E+06	1.22E+06	5.28E+05
17	Etofenprox	4	C ₂₅ H ₂₈ O ₃	377.2118	2.64E+06	2.44E+04	0.00E+00	4.95E+04	0.00E+00
18	Fexofenadine	8.4	C ₃₂ H ₃₉ NO ₄	502.2958	2.33E+04	4.70E+04	2.49E+04	3.21E+04	2.13E+04
19	Gabapentin	3.8	C ₉ H ₁₇ NO ₂	172.1339	9.24E+03	4.48E+03	7.92E+03	1.34E+04	1.25E+04
20	Haloperidol	7.27	C ₂₁ H ₂₃ ClFNO ₂	376.1481	1.09E+04	0.00E+00	0.00E+00	8.22E+03	9.46E+03
21	Lidocaine	3.34	C ₁₄ H ₂₂ N ₂ O	235.1812	4.79E+05	1.11E+06	1.00E+06	8.47E+05	5.09E+05
23	Metolachlor	9.83	C ₁₅ H ₂₂ ClNO ₂	284.1418	3.06E+06	6.44E+05	1.64E+06	3.64E+06	3.33E+06
23	Metolachlor ESA	5.78	C ₁₅ H ₂₃ NO ₅ S	330.1376	4.49E+05	5.89E+04	4.46E+04	3.31E+04	2.03E+04
24	Metolachlor OA	6.68	C ₁₅ H ₂₁ NO ₄	280.1550	4.49E+04	8.95E+04	5.31E+04	4.36E+04	1.07E+05
25	Metoprolol acid	2.73	C ₁₄ H ₂₁ NO ₄	268.1550	1.31E+04	5.03E+03	0.00E+00	1.95E+04	1.68E+04
27	O-Desmethylvenlafaxine	3.75	C ₁₆ H ₂₅ NO ₂	264.1965	7.28E+05	1.02E+06	1.60E+05	7.79E+05	7.94E+05
28	Ritalinic acid	3.6	C ₁₃ H ₁₇ NO ₂	220.1339	6.59E+04	2.46E+04	6.96E+04	7.22E+04	8.66E+04
30	Tebuconazole	9.64	C ₁₆ H ₂₂ ClN ₃ O	308.1531	2.00E+04	2.46E+04	1.20E+04	4.04E+03	1.05E+04
31	Telmisartan	8.72	C ₃₃ H ₃₀ N ₄ O ₂	515.2448	1.46E+05	8.93E+04	1.34E+04	1.23E+05	5.85E+04
32	Tranexamic acid	2.73	C ₈ H ₁₅ NO ₂	158.1182	8.78E+04	1.20E+05	1.87E+06	7.29E+04	1.87E+05
34	Venlafaxine	5.36	C ₁₇ H ₂₇ NO ₂	278.2121	1.22E+04	6.60E+03	5.79E+04	7.17E+03	1.51E+04

Tableau B1- 6. Aires des pics des contaminants de l'usine F (eau brute) en mode FA (+)

#	Nom	RT (min)	Formule	m/z	APR	FEB	JUNE	MAR	MAY
1	BHT-aldehyde	11.04	C ₁₅ H ₂₂ O ₂	235.1699	6.18E+04	9.27E+04	1.57E+05	3.15E+04	4.95E+04
2	BHT-acid	9.79	C ₁₅ H ₂₂ O ₃	251.1648	1.21E+05	1.72E+05	5.35E+04	1.33E+05	2.93E+05
4	Atratrene	3.28	C ₉ H ₁₇ N ₅ O	212.1513	1.68E+06	5.74E+05	7.93E+06	5.59E+05	4.66E+05
5	Atrazine	6.65	C ₈ H ₁₄ ClN ₅	216.1017	5.50E+05	7.89E+05	1.64E+05	7.19E+05	4.32E+05
6	Atrazine desisopropyl	2.75	C ₅ H ₈ ClN ₅	174.0548	6.58E+04	4.54E+04	1.88E+03	4.60E+04	4.64E+04
7	Atrazine-2-hydroxy	3	C ₈ H ₁₅ N ₅ O	198.1379	5.08E+04	3.20E+04	1.49E+05	2.93E+04	5.51E+04
8	Atrazine-desethyl	3.8	C ₆ H ₁₀ ClN ₅	188.0704	1.55E+06	1.89E+06	8.23E+05	6.96E+05	7.79E+05
9	Benzophenone	9.41	C ₁₃ H ₁₀ O	183.0811	2.12E+05	0.00E+00	0.00E+00	7.10E+04	0.00E+00
10	Benzoylgonine	4.04	C ₁₆ H ₁₉ NO ₄	290.1393	0.00E+00	0.00E+00	3.47E+04	0.00E+00	2.25E+04
12	Caffeine	3.45	C ₈ H ₁₀ N ₄ O ₂	195.0883	1.59E+04	1.63E+04	0.00E+00	1.41E+04	1.94E+04
13	Cocaine	5.23	C ₁₇ H ₂₁ NO ₄	304.1550	7.20E+04	4.12E+04	0.00E+00	2.37E+04	2.76E+04
15	DEET	7.3	C ₁₂ H ₁₇ NO	192.1390	1.14E+06	3.27E+05	2.45E+05	5.67E+05	3.83E+06
16	Dihydrobupropion	5.1	C ₁₃ H ₂₀ ClNO	242.1313	1.28E+06	1.82E+06	8.61E+05	5.95E+05	7.72E+05
17	Etofenprox	4	C ₂₅ H ₂₈ O ₃	377.2118	6.96E+05	2.23E+04	4.24E+04	0.00E+00	7.72E+03
18	Fexofenadine	8.4	C ₃₂ H ₃₉ NO ₄	502.2958	2.83E+04	3.06E+04	4.07E+04	2.74E+04	2.16E+04
19	Gabapentin	3.8	C ₉ H ₁₇ NO ₂	172.1339	4.67E+03	3.75E+03	2.16E+03	4.36E+03	3.38E+03
20	Haloperidol	7.27	C ₂₁ H ₂₃ ClFNO ₂	376.1481	1.65E+04	8.41E+03	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00
21	Lidocaine	3.34	C ₁₄ H ₂₂ N ₂ O	235.1812	8.93E+05	1.27E+06	8.64E+05	4.04E+05	6.33E+05
23	Metolachlor	9.83	C ₁₅ H ₂₂ ClNO ₂	284.1418	4.78E+06	1.19E+06	4.20E+05	2.10E+06	8.79E+06
23	Metolachlor ESA	5.78	C ₁₅ H ₂₃ NO ₅ S	330.1376	6.34E+04	2.28E+04	2.49E+04	1.70E+04	8.70E+04
24	Metolachlor OA	6.68	C ₁₅ H ₂₁ NO ₄	280.1550	3.17E+04	8.57E+04	2.73E+04	4.39E+04	1.13E+05
25	Metoprolol acid	2.73	C ₁₄ H ₂₁ NO ₄	268.1550	5.86E+03	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00
27	O-Desmethylvenlafaxine	3.75	C ₁₆ H ₂₅ NO ₂	264.1965	4.74E+05	8.76E+05	6.39E+04	6.08E+05	6.67E+05
28	Ritalinic acid	3.6	C ₁₃ H ₁₇ NO ₂	220.1339	4.89E+04	2.33E+04	4.64E+03	3.09E+04	2.58E+04
30	Tebuconazole	9.64	C ₁₆ H ₂₂ ClN ₃ O	308.1531	1.98E+04	5.95E+03	6.64E+03	5.85E+03	1.62E+04
31	Telmisartan	8.72	C ₃₃ H ₃₀ N ₄ O ₂	515.2448	1.37E+05	8.99E+04	9.89E+03	7.28E+04	3.22E+04
32	Tranexamic acid	2.73	C ₈ H ₁₅ NO ₂	158.1182	1.02E+05	1.29E+05	1.80E+06	5.93E+04	3.16E+05
34	Venlafaxine	5.36	C ₁₇ H ₂₇ NO ₂	278.2121	1.68E+04	2.59E+04	1.71E+05	8.33E+03	1.76E+04

Tableau B1- 7. Aires des pics des contaminants de l'usine A (eau traitée) en mode FA (+)

#	Nom	RT (min)	Formule	m/z	APR	FEB	JUNE	MAR	MAY
1	BHT-aldehyde	11.04	C ₁₅ H ₂₂ O ₂	235.1699	3.39E+04	3.84E+04	2.63E+04	2.24E+04	5.19E+04
2	BHT-acid	9.79	C ₁₅ H ₂₂ O ₃	251.1648	1.43E+05	2.58E+05	1.66E+05	1.23E+05	1.46E+05
4	Atratone	3.28	C ₉ H ₁₇ N ₅ O	212.1513	8.15E+05	8.07E+05	1.69E+05	7.05E+05	5.09E+04
5	Atrazine	6.65	C ₈ H ₁₄ ClN ₅	216.1017	1.11E+06	1.08E+06	1.19E+05	1.41E+06	9.37E+04
6	Atrazine desisopropyl	2.75	C ₅ H ₈ ClN ₅	174.0548	2.80E+04	2.69E+04	1.41E+04	2.74E+04	2.77E+04
7	Atrazine-2-hydroxy	3	C ₈ H ₁₅ N ₅ O	198.1379	1.31E+04	5.03E+04	3.83E+04	1.61E+04	2.83E+04
8	Atrazine-desethyl	3.8	C ₆ H ₁₀ ClN ₅	188.0704	8.60E+05	1.82E+06	3.79E+05	9.18E+05	6.27E+05
9	Benzophenone	9.41	C ₁₃ H ₁₀ O	183.0811	2.35E+05	0.00E+00	2.51E+04	2.68E+05	1.12E+04
10	Benzoylcegonine	4.04	C ₁₆ H ₁₉ NO ₄	290.1393	0.00E+00	1.05E+04	3.84E+04	0.00E+00	3.18E+04
12	Caffeine	3.45	C ₈ H ₁₀ N ₄ O ₂	195.0883	6.59E+03	1.07E+04	5.72E+03	6.67E+03	1.26E+04
13	Cocaine	5.23	C ₁₇ H ₂₁ NO ₄	304.1550	2.54E+05	1.96E+05	1.74E+05	2.41E+05	2.69E+05
15	DEET	7.3	C ₁₂ H ₁₇ NO	192.1390	2.26E+06	2.57E+06	8.80E+05	3.55E+06	9.61E+05
16	Dihydrobupropion	5.1	C ₁₃ H ₂₀ ClNO	242.1313	7.41E+05	1.54E+06	4.06E+05	7.80E+05	7.27E+05
17	Etofenprox	4	C ₂₅ H ₂₈ O ₃	377.2118	2.53E+04	4.77E+05	2.91E+04	0.00E+00	3.25E+04
18	Fexofenadine	8.4	C ₃₂ H ₃₉ NO ₄	502.2958	0.00E+00	3.93E+04	9.13E+03	0.00E+00	7.00E+03
19	Gabapentin	3.8	C ₉ H ₁₇ NO ₂	172.1339	5.43E+04	4.09E+04	1.14E+04	5.26E+04	4.77E+04
20	Haloperidol	7.27	C ₂₁ H ₂₃ ClFNO ₂	376.1481	3.03E+04	2.60E+04	2.68E+04	2.81E+04	3.09E+04
21	Lidocaine	3.34	C ₁₄ H ₂₂ N ₂ O	235.1812	3.82E+05	1.33E+06	3.60E+05	4.08E+05	4.01E+05
23	Metolachlor	9.83	C ₁₅ H ₂₂ ClNO ₂	284.1418	5.87E+06	7.60E+06	1.63E+06	7.59E+06	1.14E+06
23	Metolachlor ESA	5.78	C ₁₅ H ₂₃ NO ₅ S	330.1376	4.73E+03	2.49E+05	2.98E+04	2.62E+04	1.77E+04
24	Metolachlor OA	6.68	C ₁₅ H ₂₁ NO ₄	280.1550	8.90E+04	1.44E+05	1.41E+05	1.04E+05	1.22E+05
25	Metoprolol acid	2.73	C ₁₄ H ₂₁ NO ₄	268.1550	0.00E+00	6.20E+03	0.00E+00	5.38E+03	0.00E+00
27	O-Desmethylvenlafaxine	3.75	C ₁₆ H ₂₅ NO ₂	264.1965	6.49E+05	8.70E+05	3.36E+05	6.17E+05	5.63E+05
28	Ritalinic acid	3.6	C ₁₃ H ₁₇ NO ₂	220.1339	3.07E+05	2.05E+05	5.88E+04	2.99E+05	2.50E+05
30	Tebuconazole	9.64	C ₁₆ H ₂₂ ClN ₃ O	308.1531	2.22E+04	1.02E+05	2.66E+03	1.04E+04	4.19E+03
31	Telmisartan	8.72	C ₃₃ H ₃₀ N ₄ O ₂	515.2448	9.52E+04	1.66E+05	1.63E+04	1.07E+05	3.66E+04
32	Tranexamic acid	2.73	C ₈ H ₁₅ NO ₂	158.1182	4.87E+04	1.03E+05	2.15E+05	4.38E+04	1.00E+05
34	Venlafaxine	5.36	C ₁₇ H ₂₇ NO ₂	278.2121	8.83E+03	1.20E+04	1.65E+04	5.42E+03	1.64E+04

Tableau B1- 8. Aires des pics des contaminants de l'usine B (eau traitée) en mode FA (+)

#	Nom	RT(min)	Formule	m/z	APR	FEB	JUNE	MAR	MAY
1	BHT-aldehyde	11.04	C ₁₅ H ₂₂ O ₂	235.1699	1.52E+04	3.64E+04	4.93E+04	2.64E+04	1.79E+04
2	BHT-acid	9.79	C ₁₅ H ₂₂ O ₃	251.1648	1.28E+05	1.89E+05	1.52E+05	1.25E+05	1.11E+05
4	Atritone	3.28	C ₉ H ₁₇ N ₅ O	212.1513	5.27E+05	5.69E+05	2.64E+05	6.77E+05	6.43E+04
5	Atrazine	6.65	C ₈ H ₁₄ ClN ₅	216.1017	1.20E+06	1.38E+06	1.35E+05	1.81E+06	8.59E+04
6	Atrazine desisopropyl	2.75	C ₅ H ₈ ClN ₅	174.0548	2.94E+04	5.11E+04	2.86E+04	2.55E+04	4.21E+04
7	Atrazine-2-hydroxy	3	C ₈ H ₁₅ N ₅ O	198.1379	1.05E+04	4.90E+04	4.53E+04	9.81E+03	4.88E+04
8	Atrazine-desethyl	3.8	C ₆ H ₁₀ ClN ₅	188.0704	7.00E+05	4.09E+06	8.27E+05	6.31E+05	5.64E+05
9	Benzophenone	9.41	C ₁₃ H ₁₀ O	183.0811	2.54E+05	0.00E+00	1.27E+04	2.83E+05	0.00E+00
10	Benzoylcegonine	4.04	C ₁₆ H ₁₉ NO ₄	290.1393	0.00E+00	1.47E+04	9.11E+04	0.00E+00	1.77E+04
12	Caffeine	3.45	C ₈ H ₁₀ N ₄ O ₂	195.0883	1.13E+04	9.73E+03	6.44E+03	6.55E+03	1.26E+04
13	Cocaine	5.23	C ₁₇ H ₂₁ NO ₄	304.1550	2.33E+05	2.02E+05	1.51E+05	2.24E+05	2.61E+05
15	DEET	7.3	C ₁₂ H ₁₇ NO	192.1390	5.00E+06	2.28E+06	1.28E+06	5.34E+06	1.14E+06
16	Dihydrobupropion	5.1	C ₁₃ H ₂₀ ClNO	242.1313	5.71E+05	3.51E+06	8.96E+05	5.81E+05	5.76E+05
17	Etopenprox	4	C ₂₅ H ₂₈ O ₃	377.2118	1.72E+04	5.59E+04	1.80E+04	2.36E+04	3.05E+04
18	Fexofenadine	8.4	C ₃₂ H ₃₉ NO ₄	502.2958	0.00E+00	1.71E+04	7.47E+03	0.00E+00	0.00E+00
19	Gabapentin	3.8	C ₉ H ₁₇ NO ₂	172.1339	6.01E+04	5.21E+04	1.37E+04	5.08E+04	4.96E+04
20	Haloperidol	7.27	C ₂₁ H ₂₃ ClFNO ₂	376.1481	3.21E+04	2.54E+04	2.91E+04	2.95E+04	3.68E+04
21	Lidocaine	3.34	C ₁₄ H ₂₂ N ₂ O	235.1812	3.65E+05	1.65E+06	6.93E+05	3.49E+05	3.55E+05
23	Metolachlor	9.83	C ₁₅ H ₂₂ ClNO ₂	284.1418	1.22E+07	6.52E+06	2.50E+06	1.18E+07	1.73E+06
23	Metolachlor ESA	5.78	C ₁₅ H ₂₃ NO ₅ S	330.1376	3.52E+03	1.13E+05	7.80E+03	1.02E+04	0.00E+00
24	Metolachlor OA	6.68	C ₁₅ H ₂₁ NO ₄	280.1550	6.90E+04	1.08E+05	1.50E+05	8.75E+04	1.06E+05
25	Metoprolol acid	2.73	C ₁₄ H ₂₁ NO ₄	268.1550	0.00E+00	1.14E+04	0.00E+00	9.86E+03	0.00E+00
27	O-Desmethylvenlafaxine	3.75	C ₁₆ H ₂₅ NO ₂	264.1965	5.46E+05	8.75E+05	3.55E+05	8.05E+05	5.70E+05
28	Ritalinic acid	3.6	C ₁₃ H ₁₇ NO ₂	220.1339	3.11E+05	2.36E+05	5.14E+04	2.97E+05	2.65E+05
30	Tebuconazole	9.64	C ₁₆ H ₂₂ ClN ₃ O	308.1531	1.18E+04	7.25E+03	7.81E+03	9.70E+03	0.00E+00
31	Telmisartan	8.72	C ₃₃ H ₃₀ N ₄ O ₂	515.2448	6.14E+04	1.84E+05	1.00E+04	7.27E+04	3.20E+04
32	Tranexamic acid	2.73	C ₈ H ₁₅ NO ₂	158.1182	4.54E+04	2.12E+05	2.54E+05	4.59E+04	1.52E+05
34	Venlafaxine	5.36	C ₁₇ H ₂₇ NO ₂	278.2121	3.26E+03	1.29E+04	2.08E+04	1.22E+04	1.48E+04

Tableau B1- 9. Aires des pics des contaminants de l'usine C (eau traitée) en mode FA (+)

#	Nom	RT(min)	Formule	m/z	APR	FEB	JUNE	MAR	MAY
1	BHT-aldehyde	11.04	C ₁₅ H ₂₂ O ₂	235.1699	3.01E+04	5.76E+04	1.34E+04	5.51E+04	5.69E+04
2	BHT-acid	9.79	C ₁₅ H ₂₂ O ₃	251.1648	1.07E+05	2.75E+05	1.26E+05	1.40E+05	1.51E+05
4	Atralone	3.28	C ₉ H ₁₇ N ₅ O	212.1513	1.31E+06	7.52E+05	2.09E+05	8.18E+05	9.67E+04
5	Atrazine	6.65	C ₈ H ₁₄ ClN ₅	216.1017	7.89E+05	1.82E+06	4.68E+04	9.79E+05	3.55E+04
6	Atrazine desisopropyl	2.75	C ₅ H ₈ ClN ₅	174.0548	4.16E+04	3.16E+04	3.75E+04	4.94E+04	3.69E+04
7	Atrazine-2-hydroxy	3	C ₈ H ₁₅ N ₅ O	198.1379	3.04E+04	1.44E+05	5.36E+04	3.37E+04	3.95E+04
8	Atrazine-desethyl	3.8	C ₆ H ₁₀ ClN ₅	188.0704	1.32E+06	2.87E+06	5.22E+05	1.16E+06	8.45E+05
9	Benzophenone	9.41	C ₁₃ H ₁₀ O	183.0811	8.28E+04	0.00E+00	1.04E+04	8.91E+04	0.00E+00
10	Benzoyllecgonine	4.04	C ₁₆ H ₁₉ NO ₄	290.1393	0.00E+00	7.67E+03	1.39E+04	0.00E+00	1.57E+04
12	Caffeine	3.45	C ₈ H ₁₀ N ₄ O ₂	195.0883	4.47E+03	1.17E+04	1.67E+04	7.05E+03	4.22E+04
13	Cocaine	5.23	C ₁₇ H ₂₁ NO ₄	304.1550	4.40E+04	3.20E+04	5.96E+04	5.88E+04	9.26E+04
15	DEET	7.3	C ₁₂ H ₁₇ NO	192.1390	1.09E+06	2.44E+05	5.36E+05	4.22E+05	2.17E+06
16	Dihydrobupropion	5.1	C ₁₃ H ₂₀ ClNO	242.1313	1.13E+06	2.38E+06	5.30E+05	9.21E+05	8.52E+05
17	Etofenprox	4	C ₂₅ H ₂₈ O ₃	377.2118	9.16E+05	0.00E+00	1.86E+04	1.89E+04	3.12E+04
18	Fexofenadine	8.4	C ₃₂ H ₃₉ NO ₄	502.2958	0.00E+00	6.40E+03	9.15E+03	0.00E+00	8.74E+03
19	Gabapentin	3.8	C ₉ H ₁₇ NO ₂	172.1339	4.29E+03	4.20E+03	2.55E+03	1.09E+04	1.79E+04
20	Haloperidol	7.27	C ₂₁ H ₂₃ ClFNO ₂	376.1481	9.17E+03	7.59E+03	8.79E+03	4.80E+03	1.23E+04
21	Lidocaine	3.34	C ₁₄ H ₂₂ N ₂ O	235.1812	6.08E+05	1.27E+06	4.17E+05	5.26E+05	5.71E+05
23	Metolachlor	9.83	C ₁₅ H ₂₂ ClNO ₂	284.1418	3.76E+06	8.01E+05	1.16E+06	1.37E+06	3.79E+06
23	Metolachlor ESA	5.78	C ₁₅ H ₂₃ NO ₅ S	330.1376	6.87E+04	1.07E+05	4.39E+04	7.91E+03	4.55E+04
24	Metolachlor OA	6.68	C ₁₅ H ₂₁ NO ₄	280.1550	2.84E+04	8.40E+04	1.37E+05	5.59E+04	8.37E+04
25	Metoprolol acid	2.73	C ₁₄ H ₂₁ NO ₄	268.1550	0.00E+00	9.71E+03	0.00E+00	1.36E+04	0.00E+00
27	O-Desmethylvenlafaxine	3.75	C ₁₆ H ₂₅ NO ₂	264.1965	4.49E+05	8.10E+05	2.50E+05	5.72E+05	4.99E+05
28	Ritalinic acid	3.6	C ₁₃ H ₁₇ NO ₂	220.1339	3.89E+04	1.78E+04	1.03E+04	7.45E+04	9.01E+04
30	Tebuconazole	9.64	C ₁₆ H ₂₂ ClN ₃ O	308.1531	2.37E+04	1.47E+04	4.61E+03	4.79E+03	0.00E+00
31	Telmisartan	8.72	C ₃₃ H ₃₀ N ₄ O ₂	515.2448	8.27E+04	1.33E+05	2.59E+04	9.15E+04	4.83E+04
32	Tranexamic acid	2.73	C ₈ H ₁₅ NO ₂	158.1182	7.23E+04	2.28E+05	2.60E+05	8.17E+04	1.69E+05
34	Venlafaxine	5.36	C ₁₇ H ₂₇ NO ₂	278.2121	5.92E+03	1.16E+04	1.72E+04	7.66E+03	1.09E+04

Tableau B1- 10. Aires des pics des contaminants de l'usine D (eau traitée) en mode FA (+)

#	Nom	RT(min)	Formule	m/z	APR	FEB	JUNE	MAR	MAY
---	-----	---------	---------	-----	-----	-----	------	-----	-----

1	BHT-aldehyde	11.04	C ₁₅ H ₂₂ O ₂	235.1699	4.05E+04	4.46E+04	1.73E+04	6.81E+04	6.08E+04
2	BHT-acid	9.79	C ₁₅ H ₂₂ O ₃	251.1648	1.53E+05	2.86E+05	1.65E+05	1.65E+05	2.00E+05
4	Atraton	3.28	C ₉ H ₁₇ N ₅ O	212.1513	1.07E+06	7.98E+05	2.24E+05	6.36E+05	6.01E+04
5	Atrazine	6.65	C ₈ H ₁₄ ClN ₅	216.1017	9.12E+05	1.79E+06	9.40E+04	1.28E+06	1.02E+05
6	Atrazine desisopropyl	2.75	C ₅ H ₈ ClN ₅	174.0548	4.51E+04	3.72E+04	4.27E+04	4.94E+04	4.79E+04
7	Atrazine-2-hydroxy	3	C ₈ H ₁₅ N ₅ O	198.1379	2.18E+04	1.14E+05	5.78E+04	1.79E+04	3.62E+04
8	Atrazine-desethyl	3.8	C ₆ H ₁₀ ClN ₅	188.0704	1.14E+06	3.35E+06	4.00E+05	6.19E+05	6.52E+05
9	Benzophenone	9.41	C ₁₃ H ₁₀ O	183.0811	1.34E+05	0.00E+00	1.64E+04	7.35E+04	0.00E+00
10	Benzoylcegonine	4.04	C ₁₆ H ₁₉ NO ₄	290.1393	0.00E+00	1.41E+04	3.19E+05	0.00E+00	1.86E+04
12	Caffeine	3.45	C ₈ H ₁₀ N ₄ O ₂	195.0883	8.47E+03	9.73E+03	6.65E+03	7.55E+03	4.40E+04
13	Cocaine	5.23	C ₁₇ H ₂₁ NO ₄	304.1550	1.45E+05	6.47E+04	1.31E+05	9.38E+04	1.20E+05
15	DEET	7.3	C ₁₂ H ₁₇ NO	192.1390	3.71E+05	2.14E+05	5.21E+05	8.12E+05	1.50E+06
16	Dihydrobupropion	5.1	C ₁₃ H ₂₀ ClNO	242.1313	1.01E+06	2.66E+06	4.23E+05	5.83E+05	6.90E+05
17	Etofenprox	4	C ₂₅ H ₂₈ O ₃	377.2118	6.04E+05	0.00E+00	0.00E+00	9.72E+03	4.85E+04
18	Fexofenadine	8.4	C ₃₂ H ₃₉ NO ₄	502.2958	0.00E+00	1.41E+04	1.15E+04	0.00E+00	0.00E+00
19	Gabapentin	3.8	C ₉ H ₁₇ NO ₂	172.1339	2.63E+04	1.17E+04	8.99E+03	2.12E+04	2.35E+04
20	Haloperidol	7.27	C ₂₁ H ₂₃ ClFNO ₂	376.1481	2.41E+04	1.22E+04	2.27E+04	1.15E+04	1.57E+04
21	Lidocaine	3.34	C ₁₄ H ₂₂ N ₂ O	235.1812	5.20E+05	1.34E+06	3.53E+05	4.09E+05	4.48E+05
23	Metolachlor	9.83	C ₁₅ H ₂₂ ClNO ₂	284.1418	9.63E+05	8.91E+05	1.62E+06	2.17E+06	2.19E+06
23	Metolachlor ESA	5.78	C ₁₅ H ₂₃ NO ₅ S	330.1376	5.18E+05	5.99E+04	4.49E+04	3.41E+04	3.50E+04
24	Metolachlor OA	6.68	C ₁₅ H ₂₁ NO ₄	280.1550	5.91E+04	1.07E+05	1.12E+05	7.74E+04	1.05E+05
25	Metoprolol acid	2.73	C ₁₄ H ₂₁ NO ₄	268.1550	0.00E+00	1.23E+04	0.00E+00	1.12E+04	0.00E+00
27	O-Desmethylvenlafaxine	3.75	C ₁₆ H ₂₅ NO ₂	264.1965	5.67E+05	9.17E+05	2.94E+05	6.31E+05	5.67E+05
28	Ritalinic acid	3.6	C ₁₃ H ₁₇ NO ₂	220.1339	1.83E+05	5.87E+04	4.06E+04	1.19E+05	1.39E+05
30	Tebuconazole	9.64	C ₁₆ H ₂₂ ClN ₃ O	308.1531	1.17E+04	3.18E+04	6.31E+03	1.59E+04	0.00E+00
31	Telmisartan	8.72	C ₃₃ H ₃₀ N ₄ O ₂	515.2448	1.24E+05	1.35E+05	1.50E+04	9.70E+04	3.37E+04
32	Tranexamic acid	2.73	C ₈ H ₁₅ NO ₂	158.1182	6.01E+04	2.10E+05	3.58E+05	7.32E+04	2.27E+05
34	Venlafaxine	5.36	C ₁₇ H ₂₇ NO ₂	278.2121	5.25E+03	1.15E+04	1.31E+04	5.28E+03	1.26E+04

Tableau B1- 11. Aires des pics des contaminants de l'usine E (eau traitée) en mode FA (+)

#	Nom	RT(min)	Formule	m/z	APR	FEB	JUNE	MAR	MAY
1	BHT-aldehyde	11.04	C ₁₅ H ₂₂ O ₂	235.1699	3.18E+04	6.76E+04	1.16E+04	3.15E+04	3.17E+04
2	BHT-acid	9.79	C ₁₅ H ₂₂ O ₃	251.1648	9.80E+04	2.92E+05	8.81E+04	1.57E+05	1.08E+05

4	Atralone	3.28	C ₉ H ₁₇ N ₅ O	212.1513	9.41E+05	8.67E+05	1.69E+05	8.20E+05	8.25E+05
5	Atrazine	6.65	C ₈ H ₁₄ ClN ₅	216.1017	4.17E+05	1.83E+06	8.98E+04	6.47E+05	4.85E+04
6	Atrazine desisopropyl	2.75	C ₅ H ₈ ClN ₅	174.0548	4.34E+04	3.52E+04	5.44E+03	4.31E+04	2.32E+04
7	Atrazine-2-hydroxy	3	C ₈ H ₁₅ N ₅ O	198.1379	4.50E+04	5.27E+04	3.92E+04	3.93E+04	2.56E+04
8	Atrazine-desethyl	3.8	C ₆ H ₁₀ ClN ₅	188.0704	1.08E+06	2.86E+06	5.85E+05	1.01E+06	7.59E+05
9	Benzophenone	9.41	C ₁₃ H ₁₀ O	183.0811	7.40E+04	0.00E+00	2.23E+04	7.56E+04	0.00E+00
10	Benzoylcegonine	4.04	C ₁₆ H ₁₉ NO ₄	290.1393	0.00E+00	8.17E+03	1.75E+04	0.00E+00	3.62E+04
12	Caffeine	3.45	C ₈ H ₁₀ N ₄ O ₂	195.0883	6.11E+03	3.73E+03	1.04E+04	2.42E+03	2.08E+04
13	Cocaine	5.23	C ₁₇ H ₂₁ NO ₄	304.1550	4.95E+04	2.63E+04	4.63E+04	5.06E+04	5.44E+04
15	DEET	7.3	C ₁₂ H ₁₇ NO	192.1390	1.26E+06	5.30E+05	9.34E+05	3.51E+05	1.48E+06
16	Dihydrobupropion	5.1	C ₁₃ H ₂₀ ClNO	242.1313	8.73E+05	2.57E+06	6.06E+05	8.38E+05	6.62E+05
17	Etofenprox	4	C ₂₅ H ₂₈ O ₃	377.2118	8.23E+03	6.63E+05	1.48E+04	1.92E+04	9.33E+03
18	Fexofenadine	8.4	C ₃₂ H ₃₉ NO ₄	502.2958	0.00E+00	8.19E+03	6.20E+03	0.00E+00	0.00E+00
19	Gabapentin	3.8	C ₉ H ₁₇ NO ₂	172.1339	9.44E+03	2.66E+03	3.28E+03	1.26E+04	8.87E+03
20	Haloperidol	7.27	C ₂₁ H ₂₃ ClFNO ₂	376.1481	1.48E+04	0.00E+00	1.11E+04	1.05E+04	7.81E+03
21	Lidocaine	3.34	C ₁₄ H ₂₂ N ₂ O	235.1812	6.23E+05	1.36E+06	4.47E+05	8.78E+05	4.08E+05
23	Metolachlor	9.83	C ₁₅ H ₂₂ ClNO ₂	284.1418	3.69E+06	2.20E+06	2.03E+06	8.87E+05	2.85E+06
23	Metolachlor ESA	5.78	C ₁₅ H ₂₃ NO ₅ S	330.1376	2.32E+04	3.07E+05	2.17E+04	1.97E+04	3.86E+04
24	Metolachlor OA	6.68	C ₁₅ H ₂₁ NO ₄	280.1550	2.41E+04	7.96E+04	1.09E+05	4.72E+04	7.77E+04
25	Metoprolol acid	2.73	C ₁₄ H ₂₁ NO ₄	268.1550	8.80E+03	3.09E+04	0.00E+00	3.83E+04	0.00E+00
27	O-Desmethylvenlafaxine	3.75	C ₁₆ H ₂₅ NO ₂	264.1965	4.06E+05	8.13E+05	2.23E+05	4.78E+05	3.22E+05
28	Ritalinic acid	3.6	C ₁₃ H ₁₇ NO ₂	220.1339	7.50E+04	1.63E+04	1.91E+04	8.11E+04	8.38E+04
30	Tebuconazole	9.64	C ₁₆ H ₂₂ ClN ₃ O	308.1531	2.19E+04	4.92E+04	4.63E+03	6.12E+03	9.62E+03
31	Telmisartan	8.72	C ₃₃ H ₃₀ N ₄ O ₂	515.2448	1.38E+05	7.51E+04	7.73E+03	8.72E+04	2.33E+04
32	Tranexamic acid	2.73	C ₈ H ₁₅ NO ₂	158.1182	8.74E+04	1.20E+05	8.46E+04	9.54E+04	2.23E+05
34	Venlafaxine	5.36	C ₁₇ H ₂₇ NO ₂	278.2121	6.47E+03	7.76E+03	1.60E+04	5.02E+03	1.29E+04

Tableau B1- 12. Aires des pics des contaminants de l'usine F (eau traitée) en mode FA (+)

#	Nom	RT(min)	Formule	m/z	APR	FEB	JUNE	MAR	MAY
1	BHT-aldehyde	11.04	C ₁₅ H ₂₂ O ₂	235.1699	3.79E+04	5.13E+04	2.70E+04	5.33E+04	2.22E+04

2	BHT-acid	9.79	C ₁₅ H ₂₂ O ₃	251.1648	9.37E+04	2.20E+05	1.19E+05	1.04E+05	1.67E+05
4	Atritone	3.28	C ₉ H ₁₇ N ₅ O	212.1513	1.57E+06	7.41E+05	1.96E+05	7.90E+05	8.29E+04
5	Atrazine	6.65	C ₈ H ₁₄ ClN ₅	216.1017	4.75E+05	1.29E+06	7.10E+04	8.78E+05	2.45E+04
6	Atrazine desisopropyl	2.75	C ₅ H ₈ ClN ₅	174.0548	4.48E+04	4.40E+04	2.03E+04	3.91E+04	2.52E+04
7	Atrazine-2-hydroxy	3	C ₈ H ₁₅ N ₅ O	198.1379	3.43E+04	5.97E+04	4.21E+04	3.88E+04	3.10E+04
8	Atrazine-desethyl	3.8	C ₆ H ₁₀ ClN ₅	188.0704	9.28E+05	3.58E+06	3.92E+05	6.84E+05	5.87E+05
9	Benzophenone	9.41	C ₁₃ H ₁₀ O	183.0811	1.16E+05	0.00E+00	0.00E+00	9.00E+04	0.00E+00
10	Benzoylcegonine	4.04	C ₁₆ H ₁₉ NO ₄	290.1393	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	1.62E+04
12	Caffeine	3.45	C ₈ H ₁₀ N ₄ O ₂	195.0883	8.01E+03	6.92E+03	3.03E+03	7.36E+03	1.02E+04
13	Cocaine	5.23	C ₁₇ H ₂₁ NO ₄	304.1550	5.12E+04	2.75E+04	8.23E+03	2.09E+04	1.67E+04
15	DEET	7.3	C ₁₂ H ₁₇ NO	192.1390	5.79E+05	1.31E+05	2.99E+05	3.13E+05	4.36E+05
16	Dihydrobupropion	5.1	C ₁₃ H ₂₀ ClNO	242.1313	7.83E+05	3.04E+06	3.95E+05	5.99E+05	6.40E+05
17	Etofenprox	4	C ₂₅ H ₂₈ O ₃	377.2118	1.30E+06	1.90E+05	2.34E+04	1.87E+04	1.65E+04
18	Fexofenadine	8.4	C ₃₂ H ₃₉ NO ₄	502.2958	0.00E+00	6.15E+03	1.60E+04	0.00E+00	8.42E+03
19	Gabapentin	3.8	C ₉ H ₁₇ NO ₂	172.1339	3.76E+03	4.78E+03	2.29E+03	3.20E+03	4.18E+03
20	Haloperidol	7.27	C ₂₁ H ₂₃ ClFNO ₂	376.1481	1.10E+04	0.00E+00	0.00E+00	2.53E+03	0.00E+00
21	Lidocaine	3.34	C ₁₄ H ₂₂ N ₂ O	235.1812	4.73E+05	1.51E+06	3.57E+05	3.63E+05	4.44E+05
23	Metolachlor	9.83	C ₁₅ H ₂₂ ClNO ₂	284.1418	2.15E+06	7.13E+05	5.55E+05	1.09E+06	6.29E+05
23	Metolachlor ESA	5.78	C ₁₅ H ₂₃ NO ₅ S	330.1376	2.77E+05	1.00E+05	3.74E+04	8.07E+03	1.16E+04
24	Metolachlor OA	6.68	C ₁₅ H ₂₁ NO ₄	280.1550	3.05E+04	7.61E+04	1.43E+05	3.80E+04	7.32E+04
25	Metoprolol acid	2.73	C ₁₄ H ₂₁ NO ₄	268.1550	0.00E+00	5.44E+03	0.00E+00	9.79E+03	0.00E+00
27	O-Desmethylvenlafaxine	3.75	C ₁₆ H ₂₅ NO ₂	264.1965	3.52E+05	6.59E+05	3.31E+05	4.53E+05	5.21E+05
28	Ritalinic acid	3.6	C ₁₃ H ₁₇ NO ₂	220.1339	4.05E+04	2.76E+04	6.56E+03	2.41E+04	1.18E+04
30	Tebuconazole	9.64	C ₁₆ H ₂₂ ClN ₃ O	308.1531	1.22E+04	9.61E+03	1.64E+03	5.07E+03	1.05E+04
31	Telmisartan	8.72	C ₃₃ H ₃₀ N ₄ O ₂	515.2448	8.38E+04	3.30E+04	1.42E+04	6.82E+04	4.31E+04
32	Tranexamic acid	2.73	C ₈ H ₁₅ NO ₂	158.1182	7.87E+04	1.99E+05	2.98E+05	8.48E+04	2.89E+05
34	Venlafaxine	5.36	C ₁₇ H ₂₇ NO ₂	278.2121	4.27E+03	7.10E+03	1.50E+04	7.14E+03	1.19E+04

Tableau B1- 13. Aires des pics des contaminants de l'usine A (eau brute) en mode FA (-)

#	Nom	RT(min)	Formule	m/z	APR	FEB	JUNE	MAR	MAY
---	-----	---------	---------	-----	-----	-----	------	-----	-----

1	BHT-aldehyde	11.0	C15H22O2	233.1540	1.27E+05	1.68E+05	5.97E+06	2.74E+05	1.13E+05
2	BHT-acid	9.8	C15H22O3	249.1490	0.00E+00	6.35E+04	6.19E+05	8.44E+04	4.37E+04
3	Acetochlor ESA	5.7	C14H21NO5S	314.1061	1.83E+05	1.74E+05	0.00E+00	1.66E+05	1.24E+05
23	Metolachlor ESA	5.6	C15H23NO5S	328.1218	8.19E+05	6.78E+05	0.00E+00	8.94E+05	6.00E+05
26	n-Octyl sulfate	6.0	C8H18O4S	209.0847	0.00E+00	3.33E+07	7.05E+03	3.62E+07	4.85E+04
29	TBHQ+SO3	6.0	C10H14O5S	245.0484	0.00E+00	9.60E+04	0.00E+00	2.29E+05	0.00E+00
33	Valsartan	9.3	C24H29N5O3	434.2191	2.56E+04	2.29E+04	1.61E+04	2.62E+04	2.15E+04

Tableau B1- 14. Aires des pics des contaminants de l'usine B (eau traitée) en mode FA (-)

#	Nom	RT(min)	Formule	m/z	APR	FEB	JUNE	MAR	MAY
1	BHT-aldehyde	11.0	C15H22O2	233.1540	1.12E+05	1.60E+05	3.26E+05	7.25E+06	1.54E+05
2	BHT-acid	9.8	C15H22O3	249.1490	0.00E+00	5.77E+04	1.09E+05	7.34E+05	0.00E+00
3	Acetochlor ESA	5.7	C14H21NO5S	314.1061	9.34E+04	1.61E+05	1.59E+05	0.00E+00	1.53E+05
23	Metolachlor ESA	5.6	C15H23NO5S	328.1218	5.62E+05	6.38E+05	8.85E+05	2.23E+03	6.20E+05
26	n-Octyl sulfate	6.0	C8H18O4S	209.0847	5.22E+04	3.30E+07	3.18E+07	1.18E+04	4.37E+04
29	TBHQ+SO3	6.0	C10H14O5S	245.0484	0.00E+00	1.15E+05	1.53E+05	0.00E+00	9.91E+03
33	Valsartan	9.3	C24H29N5O3	434.2191	1.76E+04	2.41E+04	1.66E+04	9.78E+03	1.86E+04

Tableau B1- 15. Aires des pics des contaminants de l'usine C (eau traitée) en mode FA (-)

#	Nom	RT(min)	Formule	m/z	APR	FEB	JUNE	MAR	MAY
1	BHT-aldehyde	11.0	C15H22O2	233.1540	1.46E+05	1.46E+05	5.13E+05	6.59E+06	1.36E+05
2	BHT-acid	9.8	C15H22O3	249.1490	9.91E+03	4.52E+04	6.29E+04	6.47E+05	4.39E+04
3	Acetochlor ESA	5.7	C14H21NO5S	314.1061	0.00E+00	1.48E+04	0.00E+00	0.00E+00	4.69E+04
23	Metolachlor ESA	5.6	C15H23NO5S	328.1218	5.68E+05	1.55E+05	9.77E+05	0.00E+00	2.93E+05
26	n-Octyl sulfate	6.0	C8H18O4S	209.0847	2.62E+04	7.49E+06	2.97E+07	6.91E+03	4.79E+03
29	TBHQ+SO3	6.0	C10H14O5S	245.0484	0.00E+00	5.16E+04	9.98E+04	0.00E+00	0.00E+00
33	Valsartan	9.3	C24H29N5O3	434.2191	3.96E+04	4.50E+04	3.83E+04	1.38E+04	2.17E+04

Tableau B1- 16. Aires des pics des contaminants de l'usine D (eau traitée) en mode FA (-)

#	Nom	RT(min)	Formule	m/z	APR	FEB	JUNE	MAR	MAY
1	BHT-aldehyde	11.0	C15H22O2	233.1540	1.23E+05	1.45E+05	3.43E+05	7.36E+06	9.78E+04
2	BHT-acid	9.8	C15H22O3	249.1490	0.00E+00	4.94E+04	5.79E+04	8.32E+05	2.43E+04

3	Acetochlor ESA	5.7	C14H21NO5S	314.1061	7.37E+03	3.06E+04	5.37E+04	0.00E+00	5.09E+04
23	Metolachlor ESA	5.6	C15H23NO5S	328.1218	5.23E+05	1.80E+05	1.06E+06	1.73E+03	3.04E+05
26	n-Octyl sulfate	6.0	C8H18O4S	209.0847	1.13E+04	1.75E+07	2.96E+07	9.63E+03	4.06E+04
29	TBHQ+SO3	6.0	C10H14O5S	245.0484	0.00E+00	5.45E+04	1.44E+05	0.00E+00	0.00E+00
33	Valsartan	9.3	C24H29N5O3	434.2191	4.42E+04	4.20E+04	4.49E+04	2.10E+04	3.33E+04

Tableau B1- 17. Aires des pics des contaminants de l'usine E (eau traitée) en mode FA (-)

#	Nom	RT(min)	Formule	m/z	APR	FEB	JUNE	MAR	MAY
1	BHT-aldehyde	11.0	C15H22O2	233.1540	6.59E+04	1.80E+05	3.86E+05	6.78E+06	2.28E+05
2	BHT-acid	9.8	C15H22O3	249.1490	7.62E+03	6.12E+04	6.21E+04	6.63E+05	4.47E+04
3	Acetochlor ESA	5.7	C14H21NO5S	314.1061	0.00E+00	2.34E+04	1.91E+04	0.00E+00	2.34E+04
23	Metolachlor ESA	5.6	C15H23NO5S	328.1218	4.51E+05	1.93E+05	7.57E+05	1.20E+03	1.66E+05
26	n-Octyl sulfate	6.0	C8H18O4S	209.0847	2.93E+04	1.56E+07	3.12E+07	9.21E+03	2.66E+04
29	TBHQ+SO3	6.0	C10H14O5S	245.0484	0.00E+00	5.34E+04	1.78E+05	0.00E+00	0.00E+00
33	Valsartan	9.3	C24H29N5O3	434.2191	3.90E+04	3.17E+04	3.29E+04	1.92E+04	1.59E+04

Tableau B1- 18. Aires des pics des contaminants de l'usine F (eau traitée) en mode FA (-)

#	Nom	RT(min)	Formule	m/z	APR	FEB	JUNE	MAR	MAY
1	BHT-aldehyde	11.0	C15H22O2	233.1540	1.20E+05	1.41E+05	3.71E+05	4.87E+06	1.79E+05
2	BHT-acid	9.8	C15H22O3	249.1490	7.33E+03	4.45E+04	5.53E+04	5.50E+05	0.00E+00
3	Acetochlor ESA	5.7	C14H21NO5S	314.1061	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00
23	Metolachlor ESA	5.6	C15H23NO5S	328.1218	4.95E+05	9.05E+04	1.10E+06	0.00E+00	7.04E+04
26	n-Octyl sulfate	6.0	C8H18O4S	209.0847	4.85E+04	9.28E+06	2.87E+07	7.09E+03	2.99E+04
29	TBHQ+SO3	6.0	C10H14O5S	245.0484	0.00E+00	3.03E+04	1.35E+05	0.00E+00	0.00E+00
33	Valsartan	9.3	C24H29N5O3	434.2191	3.95E+04	3.00E+04	3.57E+04	1.62E+04	2.85E+04

Tableau B1- 19. Aires des pics des contaminants de l'usine A (eau traitée) en mode FA (-)

#	Nom	RT(min)	Formule	m/z	APR	FEB	JUNE	MAR	MAY
1	BHT-aldehyde	11.0	C15H22O2	233.1540	1.64E+05	1.92E+05	2.93E+05	4.91E+04	1.23E+04
2	BHT-acid	9.8	C15H22O3	249.1490	2.20E+04	9.87E+04	1.00E+05	9.97E+03	1.46E+04

3	Acetochlor ESA	5.7	C14H21NO5S	314.1061	1.23E+05	1.82E+05	1.58E+05	8.10E+04	1.26E+05
23	Metolachlor ESA	5.6	C15H23NO5S	328.1218	5.40E+05	5.94E+05	7.55E+05	3.41E+05	4.97E+05
26	n-Octyl sulfate	6.0	C8H18O4S	209.0847	2.85E+04	3.30E+07	3.05E+07	0.00E+00	3.79E+04
29	TBHQ+SO3	6.0	C10H14O5S	245.0484	0.00E+00	1.13E+05	1.00E+05	0.00E+00	0.00E+00
33	Valsartan	9.3	C24H29N5O3	434.2191	2.03E+04	1.50E+04	1.93E+04	0.00E+00	8.43E+03

Tableau B1- 20. Aires des pics des contaminants de l'usine B (eau traitée) en mode FA (-)

#	Nom	RT(min)	Formule	m/z	APR	FEB	JUNE	MAR	MAY
1	BHT-aldehyde	11.0	C15H22O2	233.1540	7.53E+04	1.87E+05	1.28E+05	5.86E+04	1.64E+04
2	BHT-acid	9.8	C15H22O3	249.1490	1.87E+04	8.17E+04	5.94E+04	0.00E+00	9.14E+03
3	Acetochlor ESA	5.7	C14H21NO5S	314.1061	1.18E+05	1.54E+05	1.74E+05	7.78E+04	1.19E+05
23	Metolachlor ESA	5.6	C15H23NO5S	328.1218	5.24E+05	6.15E+05	8.17E+05	3.08E+05	5.54E+05
26	n-Octyl sulfate	6.0	C8H18O4S	209.0847	2.92E+04	3.05E+07	2.44E+07	0.00E+00	1.87E+04
29	TBHQ+SO3	6.0	C10H14O5S	245.0484	0.00E+00	1.23E+05	7.27E+04	6.03E+03	0.00E+00
33	Valsartan	9.3	C24H29N5O3	434.2191	1.92E+04	1.66E+04	5.07E+03	0.00E+00	6.28E+03

Tableau B1- 21. Aires des pics des contaminants de l'usine C (eau traitée) en mode FA (-)

#	Nom	RT(min)	Formule	m/z	APR	FEB	JUNE	MAR	MAY
1	BHT-aldehyde	11.0	C15H22O2	233.1540	1.49E+05	2.16E+05	3.28E+05	5.51E+04	1.48E+04
2	BHT-acid	9.8	C15H22O3	249.1490	0.00E+00	1.01E+05	9.02E+04	1.49E+04	6.15E+03
3	Acetochlor ESA	5.7	C14H21NO5S	314.1061	0.00E+00	2.26E+04	0.00E+00	3.15E+04	2.92E+04
23	Metolachlor ESA	5.6	C15H23NO5S	328.1218	5.63E+05	1.68E+05	8.13E+05	1.73E+05	1.90E+05
26	n-Octyl sulfate	6.0	C8H18O4S	209.0847	3.04E+04	1.22E+07	2.27E+07	0.00E+00	3.33E+04
29	TBHQ+SO3	6.0	C10H14O5S	245.0484	0.00E+00	8.62E+04	5.87E+04	0.00E+00	0.00E+00
33	Valsartan	9.3	C24H29N5O3	434.2191	3.75E+04	4.18E+04	3.89E+04	7.28E+03	2.72E+04

Tableau B1- 22. Aires des pics des contaminants de l'usine D (eau traitée) en mode FA (-)

#	Nom	RT(min)	Formule	m/z	APR	FEB	JUNE	MAR	MAY
1	BHT-aldehyde	11.0	C15H22O2	233.1540	1.22E+05	2.03E+05	3.37E+05	5.52E+04	1.00E+04
2	BHT-acid	9.8	C15H22O3	249.1490	0.00E+00	7.10E+04	7.48E+04	1.09E+04	4.46E+03
3	Acetochlor ESA	5.7	C14H21NO5S	314.1061	1.47E+04	5.61E+04	5.83E+04	4.84E+04	3.18E+04

23	Metolachlor ESA	5.6	C15H23NO5S	328.1218	5.59E+05	2.70E+05	8.93E+05	2.36E+05	2.05E+05
26	n-Octyl sulfate	6.0	C8H18O4S	209.0847	4.16E+04	2.20E+07	1.71E+07	6.72E+03	0.00E+00
29	TBHQ+SO3	6.0	C10H14O5S	245.0484	0.00E+00	6.35E+04	4.89E+04	0.00E+00	0.00E+00
33	Valsartan	9.3	C24H29N5O3	434.2191	3.29E+04	3.54E+04	2.69E+04	0.00E+00	0.00E+00

Tableau B1- 23. Aires des pics des contaminants de l'usine E (eau traitée) en mode FA (-)

#	Nom	RT(min)	Formule	m/z	APR	FEB	JUNE	MAR	MAY
1	BHT-aldehyde	11.0	C15H22O2	233.1540	1.64E+05	2.23E+05	2.43E+05	4.72E+04	2.52E+05
2	BHT-acid	9.8	C15H22O3	249.1490	0.00E+00	8.52E+04	4.97E+04	2.23E+04	8.81E+04
3	Acetochlor ESA	5.7	C14H21NO5S	314.1061	0.00E+00	1.12E+04	1.12E+04	1.32E+04	1.50E+04
23	Metolachlor ESA	5.6	C15H23NO5S	328.1218	2.60E+05	1.33E+05	6.08E+05	6.95E+04	8.43E+04
26	n-Octyl sulfate	6.0	C8H18O4S	209.0847	3.64E+04	9.55E+06	2.14E+07	9.23E+03	2.20E+04
29	TBHQ+SO3	6.0	C10H14O5S	245.0484	0.00E+00	2.66E+04	6.32E+04	0.00E+00	0.00E+00
33	Valsartan	9.3	C24H29N5O3	434.2191	2.90E+04	2.68E+04	3.22E+04	0.00E+00	9.91E+03

Tableau B1- 24. Aires des pics des contaminants de l'usine F (eau traitée) en mode FA (-)

#	Nom	RT(min)	Formule	m/z	APR	FEB	JUNE	MAR	MAY
1	BHT-aldehyde	11.0	C15H22O2	233.1540	2.28E+05	2.37E+05	4.78E+05	5.17E+04	2.68E+04
2	BHT-acid	9.8	C15H22O3	249.1490	0.00E+00	6.35E+04	7.18E+04	9.52E+03	3.37E+04
3	Acetochlor ESA	5.7	C14H21NO5S	314.1061	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00
23	Metolachlor ESA	5.6	C15H23NO5S	328.1218	3.59E+05	9.78E+04	1.04E+06	1.37E+04	2.99E+04
26	n-Octyl sulfate	6.0	C8H18O4S	209.0847	4.87E+04	2.33E+07	1.31E+07	0.00E+00	0.00E+00
29	TBHQ+SO3	6.0	C10H14O5S	245.0484	0.00E+00	4.08E+04	5.39E+04	0.00E+00	0.00E+00
33	Valsartan	9.3	C24H29N5O3	434.2191	3.43E+04	5.19E+04	3.66E+04	8.97E+03	1.01E+04

Tableau B1- 25. Aires des pics des contaminants de l'usine A (eau brute) en mode AmAc (-)

#	Nom	RT(min)	Formule	m/z	APR	FEB	JUNE	MAR	MAY
3	Acetochlor ESA	4.1	C ₁₅ H ₂₂ O ₂	233.1540	3.E+04	9.E+04	0.E+00	4.E+04	1.E+05
11	BHT+O	9.5	C ₁₅ H ₂₂ O ₃	249.1490	0.E+00	6.E+03	2.E+05	0.E+00	0.E+00
2	BHT-acid	6.9	C ₁₄ H ₂₁ NO ₅ S	314.1061	3.E+05	2.E+05	7.E+04	6.E+05	3.E+05

1	BHT-aldehyde	11.0	C ₁₅ H ₂₄ O ₂	235.1697	8.E+05	5.E+05	2.E+07	5.E+05	8.E+05
14	DBP	6.4	C ₁₄ H ₂₂ O	205.1591	3.E+04	0.E+00	5.E+03	4.E+04	0.E+00
23	Metolachlor ESA	4.2	C ₁₅ H ₂₃ NO ₅ S	328.1218	1.E+05	2.E+05	0.E+00	1.E+05	3.E+05
26	n-Octyl sulfate	4.0	C ₈ H ₁₈ O ₄ S	209.0847	8.E+06	2.E+04	0.E+00	9.E+06	7.E+04
29	TBHQ+SO ₃	3.9	C ₁₀ H ₁₄ O ₅ S	245.0483	1.E+05	0.E+00	0.E+00	7.E+04	3.E+04

Tableau B1- 26. Aires des pics des contaminants de l'usine B (eau brute) en mode AmAc (-)

#	Nom	RT(min)	Formule	m/z	APR	FEB	JUNE	MAR	MAY
3	Acetochlor ESA	4.1	C ₁₅ H ₂₂ O ₂	233.1540	3.E+04	3.E+04	0.E+00	3.E+04	1.E+05
11	BHT+O	9.5	C ₁₅ H ₂₂ O ₃	249.1490	0.E+00	5.E+03	2.E+05	0.E+00	0.E+00
2	BHT-acid	6.9	C ₁₄ H ₂₁ NO ₅ S	314.1061	4.E+05	1.E+05	8.E+04	1.E+05	5.E+06
1	BHT-aldehyde	11.0	C ₁₅ H ₂₄ O ₂	235.1697	9.E+05	5.E+05	2.E+07	5.E+05	8.E+05
14	DBP	6.4	C ₁₄ H ₂₂ O	205.1591	2.E+04	0.E+00	4.E+03	2.E+04	0.E+00
23	Metolachlor ESA	4.2	C ₁₅ H ₂₃ NO ₅ S	328.1218	1.E+05	9.E+04	0.E+00	1.E+05	3.E+05
26	n-Octyl sulfate	4.0	C ₈ H ₁₈ O ₄ S	209.0847	8.E+06	2.E+04	0.E+00	7.E+06	5.E+04
29	TBHQ+SO ₃	3.9	C ₁₀ H ₁₄ O ₅ S	245.0483	1.E+05	0.E+00	0.E+00	8.E+04	2.E+04

Tableau B1- 27. Aires des pics des contaminants de l'usine C (eau brute) en mode AmAc (-)

#	Nom	RT(min)	Formule	m/z	APR	FEB	JUNE	MAR	MAY
3	Acetochlor ESA	4.1	C ₁₅ H ₂₂ O ₂	233.1540	1.E+04	0.E+00	0.E+00	2.E+04	5.E+04
11	BHT+O	9.5	C ₁₅ H ₂₂ O ₃	249.1490	0.E+00	1.E+04	2.E+05	0.E+00	0.E+00
2	BHT-acid	6.9	C ₁₄ H ₂₁ NO ₅ S	314.1061	2.E+05	3.E+05	1.E+05	3.E+05	3.E+05
1	BHT-aldehyde	11.0	C ₁₅ H ₂₄ O ₂	235.1697	1.E+06	8.E+05	2.E+07	8.E+05	8.E+05
14	DBP	6.4	C ₁₄ H ₂₂ O	205.1591	2.E+04	0.E+00	3.E+03	3.E+04	0.E+00
23	Metolachlor ESA	4.2	C ₁₅ H ₂₃ NO ₅ S	328.1218	2.E+05	2.E+05	0.E+00	6.E+04	1.E+05
26	n-Octyl sulfate	4.0	C ₈ H ₁₈ O ₄ S	209.0847	7.E+06	2.E+04	0.E+00	6.E+06	4.E+04
29	TBHQ+SO ₃	3.9	C ₁₀ H ₁₄ O ₅ S	245.0483	7.E+04	0.E+00	0.E+00	6.E+04	0.E+00

Tableau B1- 28. Aires des pics des contaminants de l'usine D (eau brute) en mode AmAc (-)

#	Nom	RT(min)	Formule	m/z	APR	FEB	JUNE	MAR	MAY
3	Acetochlor ESA	4.1	C ₁₅ H ₂₂ O ₂	233.1540	0.E+00	0.E+00	0.E+00	0.E+00	2.E+04
11	BHT+O	9.5	C ₁₅ H ₂₂ O ₃	249.1490	6.E+03	0.E+00	5.E+04	0.E+00	0.E+00
2	BHT-acid	6.9	C ₁₄ H ₂₁ NO ₅ S	314.1061	2.E+05	1.E+05	2.E+05	2.E+05	2.E+05

1	BHT-aldehyde	11.0	C ₁₅ H ₂₄ O ₂	235.1697	2.E+06	3.E+05	2.E+07	9.E+05	2.E+06
14	DBP	6.4	C ₁₄ H ₂₂ O	205.1591	4.E+04	0.E+00	5.E+03	2.E+04	0.E+00
23	Metolachlor ESA	4.2	C ₁₅ H ₂₃ NO ₅ S	328.1218	2.E+05	1.E+05	0.E+00	5.E+04	1.E+05
26	n-Octyl sulfate	4.0	C ₈ H ₁₈ O ₄ S	209.0847	7.E+06	1.E+04	0.E+00	5.E+06	3.E+04
29	TBHQ+SO ₃	3.9	C ₁₀ H ₁₄ O ₅ S	245.0483	1.E+05	0.E+00	0.E+00	4.E+04	0.E+00

Tableau B1- 29. Aires des pics des contaminants de l'usine E (eau brute) en mode AmAc (-)

#	Nom	RT(min)	Formule	m/z	APR	FEB	JUNE	MAR	MAY
3	Acetochlor ESA	4.1	C ₁₅ H ₂₂ O ₂	233.1540	0.E+00	0.E+00	0.E+00	0.E+00	5.E+04
11	BHT+O	9.5	C ₁₅ H ₂₂ O ₃	249.1490	0.E+00	9.E+03	8.E+04	0.E+00	0.E+00
2	BHT-acid	6.9	C ₁₄ H ₂₁ NO ₅ S	314.1061	3.E+05	2.E+05	7.E+04	3.E+05	2.E+05
1	BHT-aldehyde	11.0	C ₁₅ H ₂₄ O ₂	235.1697	2.E+06	9.E+05	2.E+07	8.E+05	1.E+06
14	DBP	6.4	C ₁₄ H ₂₂ O	205.1591	3.E+04	0.E+00	2.E+03	2.E+04	0.E+00
23	Metolachlor ESA	4.2	C ₁₅ H ₂₃ NO ₅ S	328.1218	2.E+05	2.E+05	0.E+00	4.E+04	2.E+05
26	n-Octyl sulfate	4.0	C ₈ H ₁₈ O ₄ S	209.0847	7.E+06	2.E+04	0.E+00	2.E+06	0.E+00
29	TBHQ+SO ₃	3.9	C ₁₀ H ₁₄ O ₅ S	245.0483	6.E+04	0.E+00	0.E+00	3.E+04	0.E+00

Tableau B1- 30. Aires des pics des contaminants de l'usine F (eau brute) en mode AmAc (-)

#	Nom	RT(min)	Formule	m/z	APR	FEB	JUNE	MAR	MAY
3	Acetochlor ESA	4.1	C ₁₅ H ₂₂ O ₂	233.1540	0.E+00	0.E+00	0.E+00	0.E+00	0.E+00
11	BHT+O	9.5	C ₁₅ H ₂₂ O ₃	249.1490	8.E+03	9.E+03	2.E+05	0.E+00	1.E+04
2	BHT-acid	6.9	C ₁₄ H ₂₁ NO ₅ S	314.1061	2.E+05	2.E+05	2.E+04	1.E+05	5.E+06
1	BHT-aldehyde	11.0	C ₁₅ H ₂₄ O ₂	235.1697	2.E+06	6.E+05	2.E+07	7.E+05	1.E+06
14	DBP	6.4	C ₁₄ H ₂₂ O	205.1591	1.E+04	0.E+00	5.E+03	2.E+04	0.E+00
23	Metolachlor ESA	4.2	C ₁₅ H ₂₃ NO ₅ S	328.1218	2.E+05	1.E+05	0.E+00	3.E+04	3.E+04
26	n-Octyl sulfate	4.0	C ₈ H ₁₈ O ₄ S	209.0847	6.E+06	2.E+04	0.E+00	3.E+06	1.E+04
29	TBHQ+SO ₃	3.9	C ₁₀ H ₁₄ O ₅ S	245.0483	8.E+04	0.E+00	0.E+00	2.E+04	0.E+00

Tableau B1- 31. Aires des pics des contaminants de l'usine A (eau traitée) en mode AmAc (-)

#	Nom	RT(min)	Formule	m/z	APR	FEB	JUNE	MAR	MAY
3	Acetochlor ESA	4.1	C ₁₅ H ₂₂ O ₂	233.1540	3.E+04	5.E+04	7.E+04	4.E+04	8.E+04
11	BHT+O	9.5	C ₁₅ H ₂₂ O ₃	249.1490	0.E+00	0.E+00	0.E+00	0.E+00	0.E+00
2	BHT-acid	6.9	C ₁₄ H ₂₁ NO ₅ S	314.1061	6.E+05	3.E+05	4.E+05	4.E+05	3.E+05

1	BHT-aldehyde	11.0	C ₁₅ H ₂₄ O ₂	235.1697	1.E+06	1.E+06	3.E+05	8.E+05	7.E+04
14	DBP	6.4	C ₁₄ H ₂₂ O	205.1591	3.E+04	1.E+03	0.E+00	2.E+04	0.E+00
23	Metolachlor ESA	4.2	C ₁₅ H ₂₃ NO ₅ S	328.1218	1.E+05	1.E+05	2.E+05	1.E+05	2.E+05
26	n-Octyl sulfate	4.0	C ₈ H ₁₈ O ₄ S	209.0847	7.E+06	2.E+04	0.E+00	7.E+06	5.E+04
29	TBHQ+SO ₃	3.9	C ₁₀ H ₁₄ O ₅ S	245.0483	7.E+04	0.E+00	0.E+00	9.E+04	0.E+00

Tableau B1- 32. Aires des pics des contaminants de l'usine B (eau traite) en mode AmAc (-)

#	Nom	RT(min)	Formule	m/z	APR	FEB	JUNE	MAR	MAY
3	Acetochlor ESA	4.1	C ₁₅ H ₂₂ O ₂	233.1540	2.E+04	3.E+04	5.E+04	4.E+04	1.E+05
11	BHT+O	9.5	C ₁₅ H ₂₂ O ₃	249.1490	0.E+00	3.E+03	0.E+00	0.E+00	0.E+00
2	BHT-acid	6.9	C ₁₄ H ₂₁ NO ₅ S	314.1061	3.E+05	1.E+05	3.E+05	3.E+05	3.E+05
1	BHT-aldehyde	11.0	C ₁₅ H ₂₄ O ₂	235.1697	5.E+05	4.E+05	4.E+05	7.E+05	8.E+04
14	DBP	6.4	C ₁₄ H ₂₂ O	205.1591	1.E+04	0.E+00	0.E+00	2.E+04	0.E+00
23	Metolachlor ESA	4.2	C ₁₅ H ₂₃ NO ₅ S	328.1218	1.E+05	6.E+04	1.E+05	1.E+05	3.E+05
26	n-Octyl sulfate	4.0	C ₈ H ₁₈ O ₄ S	209.0847	5.E+06	1.E+04	1.E+04	7.E+06	4.E+04
29	TBHQ+SO ₃	3.9	C ₁₀ H ₁₄ O ₅ S	245.0483	4.E+04	0.E+00	2.E+04	1.E+05	0.E+00

Tableau B1- 33. Aires des pics des contaminants de l'usine C (eau traite) en mode AmAc (-)

#	Nom	RT(min)	Formule	m/z	APR	FEB	JUNE	MAR	MAY
3	Acetochlor ESA	4.1	C ₁₅ H ₂₂ O ₂	233.1540	3.E+04	0.E+00	6.E+04	1.E+04	3.E+04
11	BHT+O	9.5	C ₁₅ H ₂₂ O ₃	249.1490	0.E+00	2.E+04	0.E+00	0.E+00	0.E+00
2	BHT-acid	6.9	C ₁₄ H ₂₁ NO ₅ S	314.1061	5.E+05	1.E+05	3.E+05	3.E+05	1.E+05
1	BHT-aldehyde	11.0	C ₁₅ H ₂₄ O ₂	235.1697	2.E+06	1.E+06	6.E+05	1.E+06	8.E+04
14	DBP	6.4	C ₁₄ H ₂₂ O	205.1591	4.E+04	0.E+00	0.E+00	1.E+04	0.E+00
23	Metolachlor ESA	4.2	C ₁₅ H ₂₃ NO ₅ S	328.1218	2.E+05	1.E+05	1.E+05	7.E+04	2.E+05
26	n-Octyl sulfate	4.0	C ₈ H ₁₈ O ₄ S	209.0847	5.E+06	2.E+04	0.E+00	6.E+06	3.E+04
29	TBHQ+SO ₃	3.9	C ₁₀ H ₁₄ O ₅ S	245.0483	6.E+04	0.E+00	0.E+00	5.E+04	0.E+00

Tableau B1- 34. Aires des pics des contaminants de l'usine D (eau traite) en mode AmAc (-)

#	Nom	RT(min)	Formule	m/z	APR	FEB	JUNE	MAR	MAY
3	Acetochlor ESA	4.1	C ₁₅ H ₂₂ O ₂	233.1540	0.E+00	0.E+00	0.E+00	0.E+00	0.E+00
11	BHT+O	9.5	C ₁₅ H ₂₂ O ₃	249.1490	0.E+00	1.E+04	0.E+00	0.E+00	0.E+00
2	BHT-acid	6.9	C ₁₄ H ₂₁ NO ₅ S	314.1061	3.E+05	9.E+04	3.E+05	4.E+05	2.E+05

1	BHT-aldehyde	11.0	C ₁₅ H ₂₄ O ₂	235.1697	1.E+06	1.E+06	2.E+05	1.E+06	2.E+06
14	DBP	6.4	C ₁₄ H ₂₂ O	205.1591	8.E+03	0.E+00	0.E+00	3.E+04	0.E+00
23	Metolachlor ESA	4.2	C ₁₅ H ₂₃ NO ₅ S	328.1218	2.E+05	6.E+04	3.E+04	5.E+04	7.E+04
26	n-Octyl sulfate	4.0	C ₈ H ₁₈ O ₄ S	209.0847	6.E+06	2.E+04	0.E+00	4.E+06	4.E+04
29	TBHQ+SO3	3.9	C ₁₀ H ₁₄ O ₅ S	245.0483	5.E+04	0.E+00	0.E+00	3.E+04	0.E+00

Tableau B1- 35. Aires des pics des contaminants de l'usine E (eau traite) en mode AmAc (-)

#	Nom	RT(min)	Formule	m/z	APR	FEB	JUNE	MAR	MAY
3	Acetochlor ESA	4.1	C ₁₅ H ₂₂ O ₂	233.1540	0.E+00	0.E+00	2.E+04	1.E+04	2.E+04
11	BHT+O	9.5	C ₁₅ H ₂₂ O ₃	249.1490	6.E+03	1.E+04	0.E+00	6.E+03	0.E+00
2	BHT-acid	6.9	C ₁₄ H ₂₁ NO ₅ S	314.1061	3.E+05	1.E+05	2.E+05	4.E+05	1.E+05
1	BHT-aldehyde	11.0	C ₁₅ H ₂₄ O ₂	235.1697	2.E+06	1.E+06	2.E+05	1.E+06	1.E+05
14	DBP	6.4	C ₁₄ H ₂₂ O	205.1591	2.E+04	0.E+00	0.E+00	2.E+04	0.E+00
23	Metolachlor ESA	4.2	C ₁₅ H ₂₃ NO ₅ S	328.1218	2.E+05	1.E+05	6.E+04	4.E+04	7.E+04
26	n-Octyl sulfate	4.0	C ₈ H ₁₈ O ₄ S	209.0847	5.E+06	2.E+04	0.E+00	4.E+06	3.E+04
29	TBHQ+SO3	3.9	C ₁₀ H ₁₄ O ₅ S	245.0483	4.E+04	0.E+00	0.E+00	8.E+04	0.E+00

Tableau B1- 36. Aires des pics des contaminants de l'usine F (eau traite) en mode AmAc (-)

#	Nom	RT(min)	Formule	m/z	APR	FEB	JUNE	MAR	MAY
3	Acetochlor ESA	4.1	C ₁₅ H ₂₂ O ₂	233.1540	0.E+00	0.E+00	0.E+00	0.E+00	0.E+00
11	BHT+O	9.5	C ₁₅ H ₂₂ O ₃	249.1490	1.E+04	1.E+04	0.E+00	7.E+03	0.E+00
2	BHT-acid	6.9	C ₁₄ H ₂₁ NO ₅ S	314.1061	4.E+05	2.E+05	4.E+05	3.E+05	1.E+05
1	BHT-aldehyde	11.0	C ₁₅ H ₂₄ O ₂	235.1697	3.E+06	1.E+06	4.E+05	1.E+06	2.E+05
14	DBP	6.4	C ₁₄ H ₂₂ O	205.1591	2.E+04	0.E+00	0.E+00	1.E+04	0.E+00
23	Metolachlor ESA	4.2	C ₁₅ H ₂₃ NO ₅ S	328.1218	3.E+05	1.E+05	1.E+04	3.E+04	4.E+04
26	n-Octyl sulfate	4.0	C ₈ H ₁₈ O ₄ S	209.0847	4.E+06	3.E+04	0.E+00	7.E+06	0.E+00
29	TBHQ+SO3	3.9	C ₁₀ H ₁₄ O ₅ S	245.0483	4.E+04	0.E+00	0.E+00	2.E+04	0.E+00

RÉFÉRENCES

- Allen, Darren R et McWhinney, Brett C. (2019). Quadrupole Time-of-Flight Mass Spectrometry: A Paradigm Shift in Toxicology Screening Applications. *The Clinical Biochemist Reviews*, 40(3), 135-146. <https://doi.org/10.33176/AACB-19-00023>
- Arnot, Jon A et Gobas, Frank A. (2006). A review of bioconcentration factor (BCF) and bioaccumulation factor (BAF) assessments for organic chemicals in aquatic organisms. *Environmental Reviews*, 14(4), 257-297.
- Backe, Will J., Ort, Christoph, Brewer, Alex J. et Field, Jennifer A. (2011). Analysis of Androgenic Steroids in Environmental Waters by Large-volume Injection Liquid Chromatography Tandem Mass Spectrometry. *Analytical chemistry*, 83(7), 2622-2630. <https://doi.org/10.1021/ac103013h>
- Barcelo, Damia. (2012). *Emerging Organic Contaminants and Human Health*. Springer.
- Bein, Emil, Sierra Olea, Millaray, Petersen, Sophie, Drewes, Jörg E. et Hübner, Uwe. (2023). Ozonation of Gabapentin in Water—Investigating Reaction Kinetics and Transformation Mechanisms of a Primary Amine Using Isotopically Labeled Ozone. *Environmental Science & Technology*, 57(47), 18825-18833. <https://doi.org/10.1021/acs.est.2c06709>
- Benotti, Mark J et Brownawell, Bruce J. (2009). Microbial degradation of pharmaceuticals in estuarine and coastal seawater. *Environmental pollution (Barking, Essex : 1987)*, 157(3), 994-1002. <https://doi.org/10.1016/j.envpol.2008.10.009>
- Bijlsma, Lubertus, Boix, Clara, Niessen, Wilfried M.A., Ibáñez, María, Sancho, Juan V. et Hernández, Félix. (2013). Investigation of degradation products of cocaine and benzoylecgonine in the aquatic environment. *Science of the Total Environment*, 443, 200-208. <https://doi.org/10.1016/j.scitotenv.2012.11.006>
- Boateng, Isaac Duah, Li, Fengnan et Yang, Xiao-Ming. (2024). Development, Validation, and Application of High-Performance Liquid Chromatography with Diode-Array Detection Method for Simultaneous Determination of Ginkgolic Acids and Ginkgols in Ginkgo biloba. *Foods (Basel, Switzerland)*, 13(8). <https://doi.org/10.3390/foods13081250>
- Boesl, Ulrich. (2017). Time-of-flight mass spectrometry: Introduction to the basics. *Mass Spectrometry Reviews*, 36(1), 86-109. <https://doi.org/10.1002/mas.21520>
- Boudou, A. (1989). *Aquatic Ecotoxicology* (1^{re} éd.). CRC Press. <https://doi.org/10.1201/9781351069854>
- Boxall, Alistair B. A., Rudd, Murray A., Brooks, Bryan W., Caldwell, Daniel J., Choi, Kyungho, Hickmann, Silke, Innes, Elizabeth, Ostapyk, Kim, Staveley, Jane P., Verslycke, Tim, Ankley, Gerald T., Beazley, Karen F., Belanger, Scott E., Berninger, Jason P., Carriquiriborde, Pedro, Coors, Anja, Deleo, Paul C., Dyer, Scott D., Ericson, Jon F., ... Van Der Kraak, Glen. (2012). Pharmaceuticals and personal care products in the environment: what are the big questions? *Environmental Health Perspectives*, 120(9), 1221-1229. <https://doi.org/10.1289/ehp.1104477>

- Buerge, Ignaz J, Poiger, Thomas, Muller, Markus D et Buser, Hans-Rudolf. (2003). Caffeine, an anthropogenic marker for wastewater contamination of surface waters. *Environmental Science & Technology*, 37(4), 691-700.
- Burton, Adrian. (2006). Pharmaceuticals: A Headache for Water Treatment. *Environmental Health Perspectives*, 114(5), A278.
- Canada, Health. (2011). *Guidelines for Canadian Drinking Water Quality: Guideline Technical Document – Atrazine* [research;guidance]. <https://www.canada.ca/en/health-canada/services/publications/healthy-living/guidelines-canadian-drinking-water-quality-guideline-technical-document-atrazine.html>
- Canada, Santé. (2014, 22 octobre). *Recommandations pour la qualité de l'eau potable au Canada - Tableaux sommaires* [lignes directrices]. <https://www.canada.ca/fr/sante-canada/services/sante-environnement-milieu-travail/rapports-publications/qualite-eau/recommandations-qualite-eau-potable-canada-tableau-sommaire.html>
- Castro, G., Rodríguez, I., Ramil, M. et Cela, R. (2019). Selective determination of sartan drugs in environmental water samples by mixed-mode solid-phase extraction and liquid chromatography tandem mass spectrometry. *Chemosphere*, 224, 562-571. <https://doi.org/10.1016/j.chemosphere.2019.02.137>
- Chaturvedi, Preeti, Shukla, Parul, Giri, Balendu Shekher, Chowdhary, Pankaj, Chandra, Ram, Gupta, Pratima et Pandey, Ashok. (2021). Prevalence and hazardous impact of pharmaceutical and personal care products and antibiotics in environment: A review on emerging contaminants. *Environmental research*, 194, 110664. <https://doi.org/10.1016/j.envres.2020.110664>
- Chernushevich, Igor V., Loboda, Alexander V. et Thomson, Bruce A. (2001). An introduction to quadrupole–time-of-flight mass spectrometry. *Journal of Mass Spectrometry*, 36(8), 849-865. <https://doi.org/10.1002/jms.207>
- Coutens, Basile, Yroni, Antoine, Rampon, Claire et Guiard, Bruno P. (2022). Psychopharmacological properties and therapeutic profile of the antidepressant venlafaxine. *Psychopharmacology*, 239(9), 2735-2752. <https://doi.org/10.1007/s00213-022-06203-8>
- Daughton, Christian G. (2005). “Emerging” Chemicals as Pollutants in the Environment: a 21st Century Perspective.
- de Hoffmann, Edmond, Stroobant, Vincent et De Hoffmann, Edmond. (2007). *Mass Spectrometry: Principles and Applications*. John Wiley & Sons, Incorporated. <http://ebookcentral.proquest.com/lib/uqam/detail.action?docID=326409>
- Derco, Ján, Dudáš, Jozef, Valičková, Mária, Šimovičová, Katarína et Kecskés, Juraj. (2015). Removal of micropollutants by ozone based processes. *Chemical Engineering & Processing: Process Intensification*, 94, 78-84. <https://doi.org/10.1016/j.cep.2015.03.014>
- Ebele, Anekwe Jennifer, Abou-Elwafa Abdallah, Mohamed et Harrad, Stuart. (2017). Pharmaceuticals and personal care products (PPCPs) in the freshwater aquatic environment. *Emerging Contaminants*, 3(1), 1-16. <https://doi.org/10.1016/j.emcon.2016.12.004>

- Fabbri, Elena et Franzellitti, Silvia. (2016). Human pharmaceuticals in the marine environment: Focus on exposure and biological effects in animal species. *Environmental Toxicology and Chemistry*, 35(4), 799-812. <https://doi.org/10.1002/etc.3131>
- Falfushynska, Halina, Rychter, Piotr, Boshtova, Anastasiia, Faidiuk, Yuliia, Kasianchuk, Nadiia et Rzymiski, Piotr. (2024). Illicit Drugs in Surface Waters: How to Get Fish off the Addictive Hook. *Pharmaceuticals*, 17(4), 537. <https://doi.org/10.3390/ph17040537>
- Fisk, Aaron T., Rosenberg, Bruno, Cymbalisty, Chris D., Stern, Gary A. et Muir, Derek C.G. (1999). Octanol/water partition coefficients of toxaphene congeners determined by the “slow-stirring” method. *Chemosphere*, 39(14), 2549-2562. [https://doi.org/10.1016/S0045-6535\(99\)00157-5](https://doi.org/10.1016/S0045-6535(99)00157-5)
- G Marshall, Alan, T Blakney, Greg, Chen, Tong, K Kaiser, Nathan, M McKenna, Amy, P Rodgers, Ryan, M Ruddy, Brian et Xian, Feng. (2013). Mass resolution and mass accuracy: how much is enough? *Mass Spectrometry (Tokyo, Japan)*, 2(Spec Iss), S0009. <https://doi.org/10.5702/massspectrometry.S0009>
- Gangaraju Gedda, Kolli Balakrishn, Randhi Uma Devi et Kinjal J Shah. (2021). Introduction to Conventional Wastewater Treatment Technologies: Limitations and Recent Advances. Dans *Introduction to Conventional Wastewater Treatment Technologies: Limitations and Recent Advances*. <https://doi.org/10.21741/9781644901144-1>
- Ghosh, Rahul, Parde, Divyesh, Bhaduri, Soumyadeep, Rajpurohit, Praveen et Behera, Manaswini. (2024). Occurrence, fate, transport, and removal technologies of emerging contaminants: A review on recent advances and future perspectives. *CLEAN – Soil, Air, Water*, 52(12), 2300259. <https://doi.org/10.1002/clen.202300259>
- Guesmi, Amal, Ohlund, Leanne et Sleno, Lekha. (2020). In vitro metabolism of sunscreen compounds by liquid chromatography/high-resolution tandem mass spectrometry. *Rapid communications in mass spectrometry: RCM*, 34(8), e8679. <https://doi.org/10.1002/rcm.8679>
- Gutiérrez-Del-Río, Ignacio, López-Ibáñez, Sara, Magadán-Corpas, Patricia, Fernández-Calleja, Luis, Pérez-Valero, Álvaro, Tuñón-Granda, Mateo, Miguélez, Elisa M., Villar, Claudio J. et Lombó, Felipe. (2021). Terpenoids and Polyphenols as Natural Antioxidant Agents in Food Preservation. *Antioxidants (Basel, Switzerland)*, 10(8), 1264. <https://doi.org/10.3390/antiox10081264>
- Harish, Harini et Jegatheesan, Veeriah. (2025). A Review of Sources, Worldwide Legislative Measures and the Factors Influencing the Treatment Technologies for Contaminants of Emerging Concern (CECs). *Current Pollution Reports*, 11(1), 44. <https://doi.org/10.1007/s40726-025-00357-7>
- Heberer, Thomas. (2002). Occurrence, fate, and removal of pharmaceutical residues in the aquatic environment: a review of recent research data. *Toxicology Letters*, 131(1), 5-17. [https://doi.org/10.1016/S0378-4274\(02\)00041-3](https://doi.org/10.1016/S0378-4274(02)00041-3)
- Herrmann, Manuel, Menz, Jakob, Olsson, Oliver et Kümmerer, Klaus. (2015). Identification of phototransformation products of the antiepileptic drug gabapentin: Biodegradability and initial assessment of toxicity. *Water Research*, 85, 11-21. <https://doi.org/10.1016/j.watres.2015.08.004>

- Houtman, Corine J. (2010). Emerging contaminants in surface waters and their relevance for the production of drinking water in Europe. *Journal of Integrative Environmental Sciences*, 7(4), 271-295. <https://doi.org/10.1080/1943815X.2010.511648>
- Humbert, Luc. (2010). Extraction en phase solide (SPE) : théorie et applications Solid phase extraction (SPE): theory and applications. *Annales de toxicologie analytique*. <https://doi.org/10.1051/ata/2010010>
- John D. Meeker et Heather M. Stapleton. (2009, 13 novembre). *House Dust Concentrations of Organophosphate Flame Retardants in Relation to Hormone Levels and Semen Quality Parameters*. <https://ehp.niehs.nih.gov/doi/epdf/10.1289/ehp.0901332>
- Kiontke, Andreas, Oliveira-Birkmeier, Ariana, Opitz, Andreas et Birkemeyer, Claudia. (2016). Electrospray Ionization Efficiency Is Dependent on Different Molecular Descriptors with Respect to Solvent pH and Instrumental Configuration. *PLOS ONE*, 11(12), e0167502. <https://doi.org/10.1371/journal.pone.0167502>
- Krauss, Martin, Singer, Heinz et Hollender, Juliane. (2010). LC–high resolution MS in environmental analysis: from target screening to the identification of unknowns. *Analytical and Bioanalytical Chemistry*, 397(3), 943-951. <https://doi.org/10.1007/s00216-010-3608-9>
- Lai, Yin-Hung et Wang, Yi-Sheng. (2023). Advances in high-resolution mass spectrometry techniques for analysis of high mass-to-charge ions. *Mass Spectrometry Reviews*, 42(6), 2426-2445. <https://doi.org/10.1002/mas.21790>
- Lapworth, D.J., Baran, N., Stuart, M.E. et Ward, R.S. (2012). Emerging organic contaminants in groundwater: A review of sources, fate and occurrence. *Environmental Pollution*, 163, 287-303. <https://doi.org/10.1016/j.envpol.2011.12.034>
- LeBlanc, André et Sleno, Lekha. (2011). Atrazine metabolite screening in human microsomes: detection of novel reactive metabolites and glutathione adducts by LC-MS. *Chemical Research in Toxicology*, 24(3), 329-339. <https://doi.org/10.1021/tx200008f>
- Lei, Meng, Zhang, Lun, Lei, Jianjun, Zong, Liang, Li, Jiahui, Wu, Zheng et Wang, Zheng. (2015). Overview of Emerging Contaminants and Associated Human Health Effects. *BioMed Research International*, 2015(1), 404796. <https://doi.org/10.1155/2015/404796>
- Letzel, Marion, Weiss, Klaus, Schüssler, Walter et Sengl, Manfred. (2010). Occurrence and fate of the human pharmaceutical metabolite ritalinic acid in the aquatic system. *Chemosphere*, 81(11), 1416-1422. <https://doi.org/10.1016/j.chemosphere.2010.09.018>
- Levesque-Vargas, Matias, Ohlund, Leanne, Sleno, Lekha, Gélina, Yves, Höhener, Patrick et Ponsin, Violaine. (2025). Insights from multiple stable isotopes (C, N, Cl) into the photodegradation of herbicides atrazine and metolachlor. *Chemosphere*, 370, 144010. <https://doi.org/10.1016/j.chemosphere.2024.144010>
- Liu, Ze-hua, Kanjo, Yoshinori et Mizutani, Satoshi. (2009). Urinary excretion rates of natural estrogens and androgens from humans, and their occurrence and fate in the environment: A review.

- Science of the Total Environment*, 407(18), 4975-4985.
<https://doi.org/10.1016/j.scitotenv.2009.06.001>
- Madikizela, Lawrence Mzukisi, Ncube, Somandla et Chimuka, Luke. (2020). Analysis, occurrence and removal of pharmaceuticals in African water resources: A current status. *Journal of Environmental Management*, 253, 109741. <https://doi.org/10.1016/j.jenvman.2019.109741>
- Mahmood, Tahira, Momin, Saima, Ali, Rahmat, Naeem, Abdul, Khan, Afsar, Mahmood, Tahira, Momin, Saima, Ali, Rahmat, Naeem, Abdul et Khan, Afsar. (2022). Technologies for Removal of Emerging Contaminants from Wastewater. Dans *Wastewater Treatment*. IntechOpen.
<https://doi.org/10.5772/intechopen.104466>
- Margot, Jonas, Kienle, Cornelia, Magnet, Anoÿs, Weil, Mirco, Rossi, Luca, de Alencastro, Luiz Felipe, Abegglen, Christian, Thonney, Denis, Chèvre, Nathalie, Schärer, Michael et Barry, D. A. (2013). Treatment of micropollutants in municipal wastewater: ozone or powdered activated carbon? *The Science of the Total Environment*, 461-462, 480-498.
<https://doi.org/10.1016/j.scitotenv.2013.05.034>
- MELCCFP. (2025a). *Atlas de l'eau*. <https://www.environnement.gouv.qc.ca/eau/atlas/index.htm>
- MELCCFP. (2025b). *Suivi des substances toxiques et des contaminants émergents dans les eaux de surface*. https://www.environnement.gouv.qc.ca/eau/eco_aqua/suivi_mil-aqua/toxique_eaux-surface.htm?utm_source=chatgpt.com
- Mohapatra, Dipti Prakash et Kirpalani, Deepak M. (2019). Advancement in treatment of wastewater: Fate of emerging contaminants. *The Canadian Journal of Chemical Engineering*, 97(10), 2621-2631. <https://doi.org/10.1002/cjce.23533>
- Montiel-León, Juan Manuel, Vo Duy, Sung, Munoz, Gabriel, Bouchard, Maryse F., Amyot, Marc et Sauvé, Sébastien. (2019). Quality survey and spatiotemporal variations of atrazine and desethylatrazine in drinking water in Quebec, Canada. *Science of The Total Environment*, 671, 578-585.
<https://doi.org/10.1016/j.scitotenv.2019.03.228>
- Morin-Crini, Nadia, Lichtfouse, Eric, Liu, Guorui, Balaram, Vysetti, Ribeiro, Ana Rita Lado, Lu, Zhijiang, Stock, Friederike, Carmona, Eric, Teixeira, Margarida Ribau, Picos-Corrales, Lorenzo A., Carlos Moreno-Pirajan, Juan, Giraldo, Liliana, Li, Cui, Pandey, Abhishek, Hocquet, Didier, Torri, Giangiacomo et Crini, Gregorio. (2022). Worldwide cases of water pollution by emerging contaminants: a review. *Environmental Chemistry Letters*, 20, 2311-2338.
<https://doi.org/10.1007/s10311-022-01447-4>
- Mota, Sandra, Rego, Liliana, Sousa, Emília, Cruz, Maria Teresa et Almeida, Isabel Martins de. (2025). Usage Frequency and Ecotoxicity of Skin Depigmenting Agents. *Pharmaceuticals (Basel, Switzerland)*, 18(3). <https://doi.org/10.3390/ph18030368>
- Muambo, Kimberly Etombi, Kim, Min-Gyeong, Kim, Da-Hye, Park, Sangmin et Oh, Jeong-Eun. (2024). Pharmaceuticals in raw and treated water from drinking water treatment plants nationwide: Insights into their sources and exposure risk assessment. *Water Research X*, 24, 100256.
<https://doi.org/10.1016/j.wroa.2024.100256>

- Nasier, Mohammad Abd et Abdulrazzaq, Khalid Adel. (2021). Conventional Water Treatment Plant, Principles, and Important Factors Influence on The Efficiency. *Design Engineering*, (8).
- Oss, Merit, Krueve, Anneli, Herodes, Koit et Leito, Ivo. (2010). Electrospray ionization efficiency scale of organic compounds. *Analytical chemistry*, 82(7), 2865-72. <https://doi.org/10.1021/ac902856t>
- Osuoha, Justice Obinna, Anyanwu, Brilliance Onyinyechi et Ejileugha, Chisom. (2023). Pharmaceuticals and personal care products as emerging contaminants: Need for combined treatment strategy. *Journal of Hazardous Materials Advances*, 9, 100206. <https://doi.org/10.1016/j.hazadv.2022.100206>
- Ousji, Ons, Ohlund, Leanne et Sleno, Lekha. (2020). Comprehensive In Vitro Metabolism Study of Bisphenol A Using Liquid Chromatography-High Resolution Tandem Mass Spectrometry. *Chemical Research in Toxicology*, 33(6), 1468-1477. <https://doi.org/10.1021/acs.chemrestox.0c00042>
- Ousji, Ons et Sleno, Lekha. (2020). Identification of In Vitro Metabolites of Synthetic Phenolic Antioxidants BHT, BHA, and TBHQ by LC-HRMS/MS. *International Journal of Molecular Sciences*, 21(24), 9525. <https://doi.org/10.3390/ijms21249525>
- Ousji, Ons et Sleno, Lekha. (2021). In Vitro Metabolism of Five Bisphenol A Analogs Studied by LC-HRMS/MS. *Journal of the American Society for Mass Spectrometry*, 32(4), 847-859. <https://doi.org/10.1021/jasms.0c00301>
- Pal, Amrita, He, Yiliang, Jekel, Martin, Reinhard, Martin et Gin, Karina Yew-Hoong. (2014). Emerging contaminants of public health significance as water quality indicator compounds in the urban water cycle. *Environment International*, 71, 46-62. <https://doi.org/10.1016/j.envint.2014.05.025>
- Pereira, L.C., De Souza, A. O., Bernardes, M. F. F., Pazin, M., Tasso, Pereira, Pereira, P. H. et Dorta, D. J. (2015). Aperspective on the potential risks of emerging contaminants to human and environmental health. *Environ Sci Pollut Res*. <https://doi.org/10.1007/s11356-015-4896-6>
- Portrait de la région métropolitaine*. (2025). Gouvernement du Québec. <https://www.quebec.ca/gouvernement/gestion-municipale/organisation-municipale/organisation-territoriale/metropole/portrait-region-metropolitaine>
- Postle, Jeffrey K., Rheineck, Bruce D., Allen, Paula E., Baldock, Jon O., Cook, Cody J., Zogbaum, Randy et Vandenberg, James P. (2004). Chloroacetanilide herbicide metabolites in Wisconsin groundwater: 2001 survey results. *Environmental Science & Technology*, 38(20), 5339-5343. <https://doi.org/10.1021/es040399h>
- Rochester, Johanna R et Bolden, Ashley L. (2015). Bisphenol S and F: A Systematic Review and Comparison of the Hormonal Activity of Bisphenol A Substitutes. *Environmental Health Perspectives (Online)*, 123(7), 643.
- Rosenfeld, Paul E. et Feng, Lydia G. H. (2011). 16 - Emerging Contaminants. Dans Paul E. Rosenfeld et Lydia G. H. Feng (dir.), *Risks of Hazardous Wastes* (p. 215-222). William Andrew Publishing. <https://doi.org/10.1016/B978-1-4377-7842-7.00016-7>

- Ryan, Michael C., Stucky, Mark, Wakefield, Chris, Melott, James M., Akbani, Rehan, Weinstein, John N. et Broom, Bradley M. (2019). Interactive Clustered Heat Map Builder: An easy web-based tool for creating sophisticated clustered heat maps. *F1000Research*, 8, ISCB Comm J-1750. <https://doi.org/10.12688/f1000research.20590.2>
- Schymanski, Emma L., Singer, Heinz P., Slobodnik, Jaroslav, Ipolyi, Ildiko M., Oswald, Peter, Krauss, Martin, Schulze, Tobias, Haglund, Peter, Letzel, Thomas, Grosse, Sylvia, Thomaidis, Nikolaos S., Bletsou, Anna, Zwiener, Christian, Ibáñez, María, Portolés, Tania, de Boer, Ronald, Reid, Malcolm J., Onghena, Matthias, Kunkel, Uwe, ... Hollender, Juliane. (2015). Non-target screening with high-resolution mass spectrometry: critical review using a collaborative trial on water analysis. *Analytical and Bioanalytical Chemistry*, 407(21), 6237-6255. <https://doi.org/10.1007/s00216-015-8681-7>
- Singh, Vipin Kumar, Singh, Rishikesh et Lichtfouse, Eric. (2021). *Sustainable Agriculture Reviews 50: Emerging Contaminants in Agriculture*. Springer Nature.
- Snyder, Lloyd R., Kirkland, Joseph J. et Dolan, John W. (2011). *Introduction to Modern Liquid Chromatography*. John Wiley & Sons.
- Strain, Harveer S., Beazley, Karen F. et Walker, Tony R. (2021). Pharmaceuticals and personal care products and their sublethal and lethal effects in aquatic organisms. *Environmental Reviews*, 29(2), 142-181. <https://doi.org/10.1139/er-2020-0054>
- Steckel, Arnold et Schlosser, Gitta. (2019). An Organic Chemist's Guide to Electrospray Mass Spectrometric Structure Elucidation. *Molecules*, 24(3), 611. <https://doi.org/10.3390/molecules24030611>
- Stefanakis, Alexandros I. et Becker, Julie A. (2016). *A review of emerging contaminants in water: Classification, Sources, and Potential Risks*. https://scholar.google.com/scholar_lookup?title=A+review+of+emerging+contaminants+in+water:+Classification,+sources,+and+potential+risks+in:+Impact+of+water+pollution+on+human+health+and+environmental+sustainability&author=Stefanakis,+A.&author=Becker,+J.A.&publication_year=2016&journal=IGI+Glob.&doi=10.4018/978-1-4666-9559-7.ch003
- Subedi, Bikram et Kannan, Kurunthachalam. (2014). Fate of Artificial Sweeteners in Wastewater Treatment Plants in New York State, U.S.A. *Environmental Science & Technology*, 48(23), 13668.
- Thacharodi, Aswin, Hassan, Saqib, Hegde, Thanushree A., Thacharodi, Dhanya Dilip, Brindhadevi, Kathirvel et Pugazhendhi, Arivalagan. (2023). Water a major source of endocrine-disrupting chemicals: An overview on the occurrence, implications on human health and bioremediation strategies. *Environmental Research*, 231. <https://doi.org/10.1016/j.envres.2023.116097>
- US EPA, OW. (2015). *Surface Water Treatment Rules* [Other Policies and Guidance]. <https://www.epa.gov/dwreginfo/surface-water-treatment-rules>
- Vasilachi, Ionela Cătălina, Asiminicesei, Dana Mihaela, Fertu, Daniela Ionela et Gavrilescu, Maria. (2021). Occurrence and Fate of Emerging Pollutants in Water Environment and Options for Their Removal. *Water*, 13(2), 181. <https://doi.org/10.3390/w13020181>

- Vilela, Caren Leite Spindola, Bassin, João Paulo et Peixoto, Raquel Silva. (2018). Water contamination by endocrine disruptors: Impacts, microbiological aspects and trends for environmental protection. *Environmental Pollution*, 235, 546-559. <https://doi.org/10.1016/j.envpol.2017.12.098>
- Waters. (2025). *Modes de séparation HPLC*.
https://www.waters.com/nextgen/ca/fr/education/primers/beginner-s-guide-to-liquid-chromatography/hplc-separation-modes.html?srltid=AfmBOoofwWzIDvg--3M1qbEdGcFY6CUuUcAmH8VQp6T0q4qJHp_Ligm
- World Health Organization. (2020, 26 octobre). *Chemical safety: Pesticides*. <https://www.who.int/news-room/questions-and-answers/item/chemical-safety-pesticides>
- Xian, Feng, Hendrickson, Christopher L. et Marshall, Alan G. (2012). High Resolution Mass Spectrometry. *Analytical Chemistry*, 84(2), 708-719. <https://doi.org/10.1021/ac203191t>
- Xu, Xiaoqing, Liu, Aimei, Hu, Siyi, Ares, Irma, Martínez-Larrañaga, María-Rosa, Wang, Xu, Martínez, Marta, Anadón, Arturo et Martínez, María-Aránzazu. (2021). Synthetic phenolic antioxidants: Metabolism, hazards and mechanism of action. *Food Chemistry*, 353, 129488. <https://doi.org/10.1016/j.foodchem.2021.129488>
- Yang, Yang, Zhao, Menglin, Hu, Ting, Su, Fang, Qian, Feng et Wang, Zishu. (2021). Identification of an antitumor effect of demethylzeylasteral on human gastric cancer cells. *Oncology Letters*, 21(1), 1-1. <https://doi.org/10.3892/ol.2020.12310>