

STRATÉGIE COUPLANT SPECTROMÉTRIE DE MASSE ET ESSAIS BIOLOGIQUES POUR ÉVALUER LE DANGER ASSOCIÉ À LA PRÉSENCE DE POLLUANTS ÉMERGEANTS : LE CAS DE L'ESTRONE

Yasmine Souissi¹, Stéphane Bouchonnet¹, Sophie Bourcier¹, Christophe Genty¹, Michel Sablier¹, Selim Aït-Aïssa²

1 - École Polytechnique, Laboratoire des Mécanismes Réactionnels, CNRS, Palaiseau, France

2 - INERIS Institut National de l'Environnement Industriel et des Risques Unité, Unité Écotoxicologie in vitro et in vivo Parc ALATA - BP2 60550 Verneuil en Halatte France

Des études récentes rapportent la présence accrue dans l'environnement de substances connues pour leur activité en tant que perturbateurs endocriniens^[1]. Ces composés nouvellement identifiés sont susceptibles d'être formés au cours des procédés de traitement des eaux ou au cours des dégradations naturelles dans l'environnement aquatique. Qu'ils soient d'origine naturelle ou anthropogénique, ces composés et leurs produits de dégradation peuvent se retrouver en quantité non négligeable dans l'environnement et porter atteinte à l'écosystème aquatique, à ses occupants ainsi qu'à ses destinataires (eaux de consommation, irrigation). Leur nocivité suspectée nous a amené à nous y intéresser ainsi qu'à leurs produits de dégradation.

Nous avons choisi de modéliser la dégradation de l'estrone comme représentant de la famille des œstrogènes ciblés comme polluants majeurs du milieu aquatique^[2]. Nous avons choisi la photolyse comme procédé de dégradation en raison de son utilisation croissante en alternative à la chlorination qui s'est avéré problématique pour la formation de sous-produits toxiques.

En vue de l'identification des produits de photolyse, nous avons adopté deux techniques d'analyse complémentaires : la chromatographie en phase gazeuse couplée à la spectrométrie de masse (GC-ITMS) pour la détection des composés de dégradation peu polaires et apolaires et la chromatographie liquide couplée à la spectrométrie de masse (LC-QTOF) pour la détection des produits de dégradation polaires. La stratégie d'élucidation structurale des produits de dégradation, basée sur l'établissement puis la comparaison des mécanismes de fragmentation des molécules mères natives ou marquées au deutérium s'est avérée très efficace. La spectrométrie de masse démontre sa pertinence pour identifier sans équivoque les structures des composés de dégradation.

Pour évaluer l'activité biologique de ces produits de dégradation, nous avons utilisé une batterie de tests *in vivo*^[3] et *in silico*. Ces essais ont démontré la capacité de plusieurs des photoproduits identifiés à se lier à activer le récepteur des œstrogènes.

L'ensemble de ces résultats sera utilisé pour évaluer le danger présenté par la formation de ces produits de dégradation de l'estrone. Nous tenterons ensuite de tirer une conclusion sur la pertinence de la stratégie adoptée pour l'évaluation des risques associés.

¹ Fontenele, E.G.P., et al., *Environmental contaminants and endocrine disruptors*. *Arquivos Brasileiros De Endocrinologia E Metabologia*, 2010. 54(1): p. 6-16.

² Souissi, Y., et al., *Estrone direct photolysis: By-product identification using LC-Q-TOF*. *Chemosphere*, 2012. 87(2): p. 185-193.

³ Louiz, I., et al., *Monitoring of dioxin-like, estrogenic and anti-androgenic activities in sediments of the Bizerta lagoon (Tunisia) by means of in vitro cell-based bioassays: Contribution of low concentrations of polynuclear aromatic hydrocarbons (PAHs)*. *Science of the Total Environment*, 2008. 402(2-3): p. 318-329.