Campagne nationale de mesure de l'occurrence de composés émergents dans les eaux destinées à la consommation humaine

Empreinte chimique non ciblée par LC-HRMS

Campagne 2024-2025

Demande : Demande n° « 2024-AST-0046 »

RAPPORT
d'appui scientifique et technique

Mars 2026

AGENCE NATIONALE DE SÉCURITÉ SANITAIRE de l'alimentation, de l'environnement et du travail
14 rue Pierre et Marie Curie 94701 Maisons-Alfort Cedex
Tél : +33 (0)1 49 77 13 50 — www.anses.fr

Citation suggérée

Anses. (Anses). Campagne nationale de mesure de l'occurrence de composés émergents dans les eaux destinées à la consommation humaine : Empreinte chimique non ciblée par LC-HRMS - Campagne 2024-2025. Maisons-Alfort : Anses, 84 p.

Mots clés

Eaux destinées à la consommation humaine – Étude faisabilité - HRMS - Campagne d'occurrence - France

Drinking water - feasibility study- Emerging pollutants - HRMS - National survey - France

Présentation des intervenants

PRÉAMBULE : Les experts membres de comités d'experts spécialisés, de groupes de travail ou désignés rapporteurs sont tous nommés à titre personnel, intuitu personae, et ne représentent pas leur organisme d'appartenance.

PARTICIPATION ANSES

Coordination scientifique

Mme Virginie BOITEUX – Chargée de projet - Laboratoire d'Hydrologie de Nancy – Anses

Mme Solène MOTTEAU – Chargée de projets de recherche – Laboratoire d'Hydrologie de Nancy – Anses

Mr Christophe ROSIN – Chef d'unité chimie des eaux – Laboratoire d'Hydrologie de Nancy – Anses

Contribution scientifique

Mme Sophie LARDY-FONTAN – Directrice – Laboratoire d'Hydrologie de Nancy – Anses

Secrétariat administratif

Mme Sophie MARCHAL-MAUER - Documentaliste - Laboratoire d'Hydrologie de Nancy – Anses

REMERCIEMENTS :

Mme Cristina BACH - Chargée de projets de recherche – Laboratoire d'Hydrologie de Nancy – Anses

Mr Xavier DAUCHY – Adjoint chef d'unité chimie des eaux – Laboratoire d'Hydrologie de Nancy – Anses

Mr Romain MEHUT - Chargé de projet - Laboratoire d'Hydrologie de Nancy – Anses

Mme Caroline HOLLARD - Technicienne Chimie - Laboratoire d'Hydrologie de Nancy – Anses

Mme Véronique SAGRES - Technicienne Chimie - Laboratoire d'Hydrologie de Nancy – Anses

Ces travaux ont été menés grâce à la collaboration des Agences Régionales de Santé (Chiffre et al.) et de la Direction Générale de la Santé (Chiffre et al.)

Des standards analytiques ont été obtenus grâce à des collaborations avec Eau de Paris, le laboratoire ANSES de Fougères et INOVALYS.

SOMMAIRE

Présentation des intervenants **3**

Sigles et abréviations **6**

Glossaire **7**

Liste des tableaux **8**

Liste des figures **8**

1 Contexte, objet et modalités de réalisation des travaux **10**

1.1 Contexte **10**

1.2 Objet de la demande **13**

1.3 Modalités de traitement : moyens mis en œuvre et organisation **13**

1.3.1 Méthode d'analyse 13

1.3.2 Contrôles qualité 14

1.3.2.1 Blancs 14

1.3.2.2 Traceurs internes 14

1.3.2.3 Contrôles positifs 15

1.3.2.4 Replicats 15

1.3.3 Base de données interne 15

1.3.4 Mise en œuvre dans le cadre d'une campagne nationale 17

2 Résultats **20**

2.1 Robustesse de la méthode et construction de la démarche de traitement des données **20**

2.1.1 Bilan et maitrise des blancs 20

2.1.1.1 Maitrise des blancs laboratoire 20

2.1.1.2 Maitrise des blancs terrain 21

2.1.2 Bilan des traceurs internes 21

2.1.3 Bilan des contrôles positifs 25

2.1.4 Bilan des réplicats 28

2.1.5 Conclusion sur la robustesse de l'approche et définition de la stratégie de traitement des données 29

2.1.5.1 Conclusions 29

2.1.5.2 Stratégie de traitements des données 30

2.2 Apports de l'approche sur la connaissance de la contamination des ressources et EDCH 31

2.2.1 Eaux Brutes 31

2.2.2 Eaux traitées 39

2.2.2.1 Comparaison entre les eaux brutes et les eaux traitées 40

3 Conclusions 43

4 Bibliographie 47

4.1 Publications 47

4.2 Autres ressources 51

Annexe 1 : Saisine - Instruction N°DGS/EA4/2023/52 du 31 août 2023 53

Annexe 2 : Méthode d'analyse des divers composés par SPE-Online-LC-HRMS 59

Annexe 3 : Logiciels utilisés (UNIFI et R+R studio) 61

Annexe 4 : Composition des contrôles positifs en solvant et en matrice, à 100 et 500 ng/L 62

Annexe 5 : Liste des composés de la base de données interne et paramètres identification associés 66

Sigles et abréviations

AL : Point aléatoire

Anses : Agence nationale de sécurité sanitaire alimentation, environnement, travail

ARS : Agence Régionale de Santé

BDD : Base de données

DGS : Direction Générale de la Santé

DROM : Départements et Régions d'Outre-Mer

EDCH : Eau destinée à la consommation humaine

EIL : Essai Inter-laboratoire

EB : Eau brute

ESO : Eau souterraine

ESU : Eau de surface

ET : Eau traitée

LC : Chromatographie en phase liquide

GD : Point Gros Débit

HRMS : Spectrométrie de Masse Haute Résolution

LHN : Laboratoire d'Hydrologie de Nancy

mDa : millidalton

QTOF : Quadripôle – Temps de Vol

PFAS : Substances perfluoroalkylées et polyfluoroalkylées

SPE : Extraction sur phase solide

SPE-Online-LC-HRMS : Extraction sur phase solide associée chromatographie en phase liquide couplée à de la spectrométrie de masse haute résolution

STEU : Station de traitement des eaux usées

TTP : Sortie d'installation de traitement

Glossaire

Les définitions de ce glossaire sont basées sur les ressources suivantes : article scientifique (Soulier et al. 2021), glossaire ANSES, Rapports AQUAREF.

Erreur de masse : Différence exprimée en ppm entre les masses ou rapports masse sur charge théorique set expérimentaux.

Erreur sur le temps de rétention : Différence absolue ou relative entre les temps de rétention théoriques et expérimentaux.

Faux positif : Composé identifié alors qu'il est absent dans l'échantillon. Les faux positifs peuvent être dus à de multiples sources d'erreurs, telles que l'inadéquation des critères d'identification, des informations erronées dans la base de données utilisées pour l'identification, défaut de contrôle de la contamination ou encore les blancs incorrectement pris en compte.

Faux négatif : Composé non identifié alors que celui-ci est recherché et présent dans l'échantillon. Les faux négatifs peuvent provenir entre autres d'un manque de sensibilité de la méthode analytique, d'un manque de robustesse de la méthode notamment vis-à-vis d'effets matriciels, d'erreurs dans la base de données utilisées pour l'identification, ou des critères d'identification trop stringents.

Fragment : Partie d'une molécule ou d'un ion produit dans le spectromètre de masse.

Composé recherché : Composé présumé présent dans un échantillon, listé dans une base de données ou une liste molécules, et qui est recherché sans disposer nécessairement d'un étalon analytique de référence.

Composé identifié : Composé satisfaisant les critères d'identification et critères qualité et dont l'identité est associée à un niveau de confiance.

Base de données : Ensemble d'informations ou de spectres de masse caractérisant des composés.

Identification : Processus visant à déterminer l'identité d'un signal au cours d'une analyse par l'accumulation de preuves et associé à un niveau de confiance.

Signal : Couple rapport masse sur charge – temps de rétention associé à une intensité et obtenue par analyse non ciblée.

Liste des tableaux

Tableau 1 : Coefficients de variation de l'intensité, médianes de l'erreur en masse (ppm) et de l'erreur absolue (min) sur l'ensemble des séries par traceur interne 25

Tableau 2 : Médianes du pourcentage de molécules identifiées, de l'erreur en masse (ppm) et de l'erreur absolue (min) sur l'ensemble de la campagne par traceur interne 28

Liste des figures

Figure 1 : Illustration de l'espace chimique atteignable lors de l'analyse non ciblée, issue et traduit de Black et al. (2023) 11

Figure 2 : Niveaux de confiance selon l'échelle de Schymanski. Adapté de Schymanski et al. (2014) 12

Figure 3 : Caractéristique de la base de données interne : nombre/répartition selon l'usage ou la classe chimique 17

Figure 4 : Répartition des échantillons prélevés en eaux brutes (EB) et eaux traitées (ET) en fonction du type de points gros débit (GD) et aléatoire (AL) 18

Figure 5 : Distribution géographique des eaux brutes prélevées en métropole et dans les DROM (Martinique, Guadeloupe, Guyane, Réunion, Mayotte). (GD = point bleu ; AL = point noir) 19

Figure 6 : Bilan des valeurs de l'erreur en masse (ppm) pour chaque traceur interne et par type d'échantillon. QC : Contrôle qualité. 22

Figure 7 : Bilan des valeurs de l'erreur absolue sur le temps de rétention (min) pour chaque traceur interne par type d'échantillon. QC : Contrôle qualité. 23

Figure 8 : Bilan des valeurs de coefficient de variation (%) de l'intensité du signal sur une séquence par traceur interne et par nature de l'échantillon. QC : Contrôle qualité. 24

Figure 9 : Bilan du pourcentage de molécules identifiées par type de contrôle positif. QC : Contrôle qualité. 26

Figure 10 : Bilan des valeurs de l'erreur en masse (ppm) par type de QC. QC : Contrôle qualité 27

Figure 11 : Bilan des valeurs de l'erreur absolue sur le temps de rétention (min) par type de QC. QC : Contrôle qualité. 27

Figure 12 : Logigramme pour le traitement des données obtenues par la méthode SPE-online-LC-HRMS par échantillon et par composé. L'attribution du niveau de confiance est basée sur le rapport AQUAREF 2022 –BRGM/RP-71775-FR. 31

Figure 13 : Nombre de molécules distinctes par usage ou classe chimique, selon la ressource en eau brute (ESU, ESO) ou le type de site/point sélectionné (AL, GD). 32

Figure 14 : Pourcentages d'échantillons où au moins un composé a été identifié, par famille de contaminants et par type de ressources 33

Figure 15 : Boites à moustaches du nombre de composés par intervalles de fréquence d'identification (%) et distributions des fréquences d'identification (%) par molécule et par type d'eau. ESO : eau souterraine, ESU : eau de surface 33

Figure 16 : Fréquence d'identification supérieure à 5%, des composés identifiés dans les eaux brutes par usage et selon le niveau de confiance. Benzoic.24Et2 : 2-(4-Diethylamino-2-hydroxybenzoyl)benzoic acid, 4(5)MeBnTriaz : 4 (ou 5)-methyl-1H-benzotriazole 35

Figure 17 : Fréquence d'identification (%) par molécule et par type d'eau pour les molécules aux usages définis comme comestibles, PFAS et dans l'industrie. Benzoic.24Et2 : 2-(4-Diethylamino-2-hydroxybenzoyl)benzoic acid, 4(5)MeBnTriaz : 4 (ou 5)-methyl-1H-benzotriazole 36

Figure 18 : Fréquence d'identification (%) par molécule et par type d'eau pour les molécules définies comme pharmaceutiques. 37

Figure 19 : Fréquence d'identification (%) par molécule et par type d'eau pour les molécules définies comme pesticides. 38

Figure 20 : Fréquence d'identification supérieure à 5%, des composés identifiés dans les eaux traitées par usage et selon le niveau de confiance..... 40

Figure 21 : Nombre de molécules distinctes par usage, selon le type d'eau (EB ou ET) ou le type de sélection (AL, GD) pour l'eau traitée. 41

Figure 22 : Boite à moustaches des fréquences d'identification par usage et par type d'eau et boite à moustaches par type de site pour les eaux traitées. Les points rouges représentent les moyennes par usage et par type d'eau. 41

Figure 23 : Répartition des composés selon s'ils sont identifiés en EB et ET, seulement en EB ou seulement en ET. 42

1 Contexte, objet et modalités de réalisation des travaux

1.1 Contexte

Dans le cadre de son mandat de laboratoire national de référence pour les eaux destinées à la consommation Humaine, le Laboratoire d'Hydrologie de Nancy de l'Anses organise périodiquement des campagnes nationales d'analyse, avec l'appui de la DGS et des ARS. Ces travaux, sur des composés émergents non réglementés ou pour lesquels le socle de connaissance reste parcellaire, permettent de recueillir des données d'exposition nécessaires à l'évaluation des risques sanitaires. Les précédentes campagnes nationales d'occurrence de composés émergents dans les EDCH ont concerné : les médicaments humains et vétérinaires (Anses 2011b) ; des composés alkyls perfluorés (Anses 2011a), les perchlorates et nitrosamines (Anses 2013) ; les haloacétonitriles, trihalométhanes iodés, halocétones, chloropicrine, alkylphénols, bisphénols (Anses 2018), le chrome hexavalent et chrome total (Anses 2019), les acides haloacétiques – chlorates, phtalates, *Rouxiella chamberiensis* (Anses 2020), métabolites de pesticides, résidus d'explosifs, 1,4-dioxane (Anses 2023), les PFAS et ultra-short PFAS (Anses 2025), pesticides dans le cadre de l'étude EAT3 (Anses 2026).

En 2023, une nouvelle campagne a été lancée. Elle est cadrée par l'instruction DGS/EA4/2023/52 du 31/08/2023. Ce rapport présente uniquement les résultats pour l'empreinte chimique non ciblée par approche de chromatographie en phase liquide couplée à la spectrométrie de masse haute résolution à temps de vol (LC-HRMS [Q-TOF]).

Dans le cadre du contrôle sanitaire des eaux, les méthodes utilisées sont des méthodes dites « ciblées ». L'analyse ciblée repose sur une sélection en amont d'une liste restreinte de composés d'intérêts. Une méthode d'analyse quantitative spécifique est alors développée et validée pour rechercher ces molécules. Les résultats de l'analyse ciblée se limitent donc aux seules molécules initialement choisies.

L'essor de la spectrométrie de masse haute résolution (HRMS) a permis le développement de nouvelles approches dites non ciblées pour s'affranchir de cette limite. De façon très schématique, ces approches permettent d'acquérir en une seule analyse une caractérisation chimique complète de l'échantillon d'eau (appelée empreinte chimique). Cette empreinte chimique est enregistrée et stockée, et peut être traitée immédiatement ou *a posteriori* autant de fois que souhaité, afin d'identifier la présence de substances d'intérêt répertoriées dans des bibliothèques (= bases de données) très larges de substances, ou encore d'identifier des substances non connues sur la base de leurs spectres de masse. Le traitement de l'empreinte chimique *a posteriori* permet d'identifier la présence de substances non recherchées au moment de l'analyse de l'échantillon.

Ce principe analytique s'appuie sur le pouvoir résolutif, c'est-à-dire la capacité de différencier des composés dont la masse moléculaire est très proche (inférieur à 0,1 mDa), et de détection non sélective par des instruments de spectrométrie de masse haute résolution. Elles reposent sur le développement de méthodes dites « généralistes » dont les paramètres sont fixés pour atteindre un compromis sensibilité/spécificité sur de larges gammes de composés sans cependant être universel.

En effet, il est essentiel de rappeler que si l'objectif d'une approche non ciblée est d'être non sélective, dans les faits l'intégralité des composés d'un échantillon ne peut pas être analysé par une seule méthode. En fonction d'une part des choix de la méthode d'analyse instrumentale et d'autre part de la stratégie de traitement des données, une sélection au sein de l'espace chimique théorique s'opère (Figure 1).

Ainsi des facteurs tels que la méthode de préparation d'échantillons, le principe de couplage chromatographique-spectrométrie de masse, les conditions opératoires de la méthode jouent un rôle majeur sur la définition de l'espace chimique détectable ; chaque étape pouvant réduire l'étendue des types de molécules compris dans cet espace.

Après analyse, des empreintes chimiques sont alors obtenues, constituées de signaux ayant chacun un temps de rétention et un rapport masse sur charge. Ces signaux sont priorisés en fonction de l'objectif de l'étude puis l'identité des molécules est recherchée à l'aide de bases de données spectrales internes (générées au laboratoire) ou externes (générées dans des laboratoires extérieurs), d'approches *in silico*, de méthodes complémentaires ou d'annotation manuelle des spectres de masse, conduisant à la définition d'un nouveau sous espace dit « espace identifiable ».

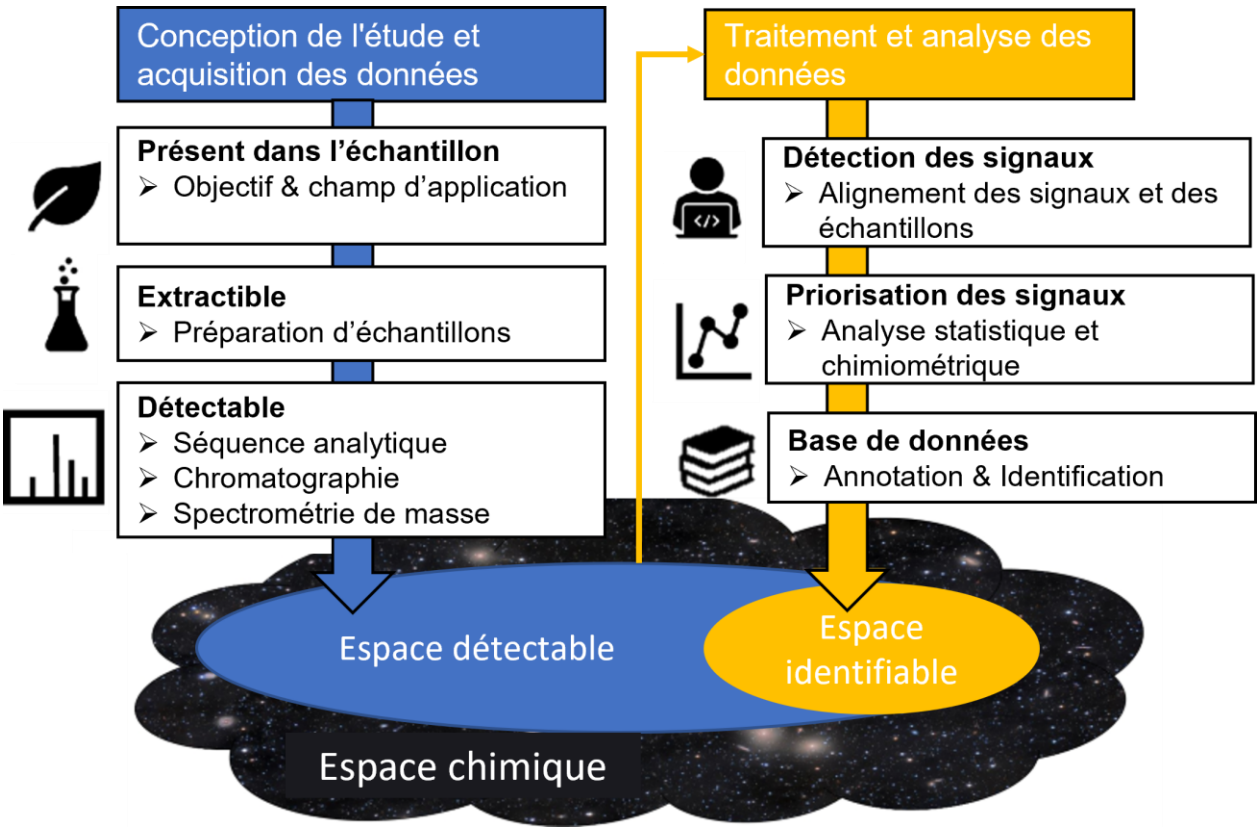


Figure 1 : Illustration de l'espace chimique atteignable lors de l'analyse non ciblée, issue et traduit de Black et al. (2023)

L'analyse de suspects est une variante de l'analyse non ciblée visant l'identification des signaux à partir de listes étendues de molécules et des bases de données spectrales internes ou externes. Elle se base sur les mêmes méthodes généralistes que l'analyse non ciblée, et compare les données acquises sur les échantillons (rapport masse sur charge, profil isotopique, fragmentation, temps de rétention) avec les données théoriques.

L'identification des composés par ces approches s'appuie sur des échelles de confiance, en fonction de critères établis. Communément admise dans la communauté scientifique, la classification de Schymanski et al. (2014) fait référence et sert de point d'appui (figure 2). Le niveau de confiance est basé sur l'accumulation de preuves visibles et vérifiées (rapport masse sur charge, temps de rétention de référence ou prédit, spectre MS/MS et fragmentation, profil isotopique, etc…). L'échelle de confiance s'étend du niveau 1, le plus fiable et le plus élevé, au niveau 5, le plus faible. Ainsi, la confirmation non équivoque de l'identité d'un composé repose sur l'injection de l'étalon référence selon la même méthode analytique développée au sein du laboratoire.

	Niveau de confiance	Preuves minimales
Point de départ de l'analyse ciblée →	Niveau 1 : Structure confirmée	Structure confirmée par un étalon analytique (masse, temps de rétention, fragments)
	Niveau 2 : Structure probable	Spectre MS, spectre MS/MS, correspondance élevée avec une base de données, fragments caractéristiques
Point de départ de l'analyse de suspects →	Niveau 3 : Structures possibles	Spectre MS, spectre MS/MS, correspondance avec des fragments prédits in silico, correspondance incomplète avec une base de données
	Niveau 4 : Formule brute sans équivoque	Profil isotopique, adduits
Point de départ de l'analyse non ciblée →	Niveau 5 : Signal d'intérêt	Couple masse sur charge – temps de rétention associé à une intensité

Figure 2 : Niveaux de confiance selon l'échelle de Schymanski. Adapté de Schymanski et al. (2014)

L'échelle de Schymanski repose sur l'association de critères d'identification (preuves minimales), chacun avec un seuil de tolérance, qui dès lors qu'ils sont respectés définissent le niveau de confiance associé à l'identification. En l'absence de normes, les critères et les seuils de tolérance sont variables et spécifiques aux objectifs des études. Cependant, certains critères tels que l'erreur en masse font néanmoins l'objet de consensus (Hollender et al. 2023; Schulz 2019; Togola et al. 2022).

Les méthodes d'analyse non ciblées intégrant les approches suspects ont été éprouvées au cours de projets de recherche (Ciccarelli et al. 2025; Manz et al. 2023; Newton et al. 2018; Nika et al. 2023; Schymanski et al. 2015) et mises en œuvre par AQUAREF en France dans le cadre des activités du réseau de surveillance prospective (Merel et al. 2023; Togola, Guillemain, et al. 2020; Togola, Lestremeau, et al. 2020) ou dans le cadre des travaux du réseau NORMAN ou du partnership PARC.

Au travers de cette campagne, pour la première fois, le Laboratoire d'Hydrologie de Nancy (LHN) a mis en œuvre une approche prospective dite d'analyse de screening sans *a priori*. Ces approches sont de plus en plus utilisées pour l'identification de substances émergentes dans les eaux, car elles permettent une vue d'ensemble plus large que les approches analytiques ciblées (Orlando-Véliz et al. 2025). Cette approche est complémentaire des approches ciblées couramment mises en œuvre dans les activités de surveillance et dans les campagnes d'occurrence de composés émergents déployées par le LHN.

1.2 Objet de la demande

L'objectif de ce travail est d'une part d'évaluer la faisabilité de déployer ces nouvelles approches dans un exercice à grande échelle, d'autre part d'en discuter les avantages et les limites et *in fine* de déterminer leur plus-value à travers le déroulement d'une campagne nationale pour identifier des molécules d'intérêt de manière précoce et itérative. Dans le cadre de cette étude, seules des données qualitatives sont produites : identification de la présence non équivoque d'une molécule avec un seuil de confiance associé à ce niveau d'identification. En conséquence ces données ne sauraient se substituer à des analyses mises en œuvre par des méthodes quantitatives ciblées.

1.3 Modalités de traitement : moyens mis en œuvre et organisation

1.3.1 Méthode d'analyse

Les objectifs de la méthode développée étaient de permettre l'analyse du plus grand nombre possible de composés d'intérêt en étant suffisamment robuste pour assurer des résultats fiables.

Une méthode d'extraction en ligne (SPE Online) couplée à de la chromatographie en phase liquide et à de la spectrométrie de masse haute résolution (SPE Online - LC-HRMS) a été choisie afin d'obtenir un niveau de sensibilité minimal. Le principe de la SPE online permet de concentrer les composés sur cartouche à phase solide directement intégrée au système chromatographique permettant ainsi une augmentation de sensibilité. Cependant la contrepartie est qu'elle amène une sélectivité dans le spectre des composés qui pourront être retenus sur la cartouche. Le choix de la phase stationnaire va influencer les caractéristiques des substances retenues. L'objectif de cette première étude étant d'être généraliste, la colonne choisie est une phase C18 universellement reconnue pour sa large gamme d'applications. Au niveau de la spectrométrie de masse, un instrument à temps de vol (Tisler et al.) a été utilisé, équipé d'une source electrospray (ESI). L'ESI est une source d'ionisation douce, limitant les fragments en source, utilisable sur un large champ de molécules.

Les analyses ont été réalisées sur la fraction dissoute des échantillons après une étape de centrifugation des échantillons pour les eaux brutes superficielles.

L'Annexe 2 décrit les conditions opératoires de cette méthode analytique.

Les données issues de l'analyse SPE-Online-LC-HRMS ont été traitées *via* le logiciel du constructeur de l'appareil (Unifi®, waters) puis *via* des logiciels open-source (R et Rstudio) en appliquant des scripts internes selon les modalités en Annexe 3.

1.3.2 Contrôles qualité

Les contrôles qualité visent à s'assurer que les performances de la méthode sont maintenues dans le temps et agissent en garant de la fiabilité des résultats. Ils sont par exemple utilisés pour réduire le nombre de faux positifs et de faux négatifs, vérifier l'absence de contamination croisée et sont employés pour qualifier et surveiller la méthode sur les critères essentiels pour l'identification des composés : variabilité en masse, du temps de rétention et du signal, capacité à identifier les molécules ajoutées dans les contrôles positifs et gestion de la contamination externe. Plusieurs types de contrôles qualité ont été mis en place pour vérifier ces critères : blancs, traceurs internes, contrôles positifs ou encore replicats d'analyse.

1.3.2.1 Blancs

Les blancs sont des contrôles qualité internes réalisés régulièrement avec un objectif d'évaluer une éventuelle contamination lors de la mise en œuvre de la méthode. Les blancs sont définis comme des essais réalisés en l'absence de l'analyte d'intérêt. Dans le cadre de cette campagne, trois catégories de blancs ont été mises en œuvre :

- Blanc instrumental : injection d'un blanc solvant avec pour objectif la vérification d'une potentielle contamination de l'appareil analytique (phases mobiles, source d'ionisation, colonnes, tuyaux, etc.). Un blanc instrumental a été analysé par séquence.
- Blanc méthode (ou blanc de procédure) : échantillon d'eau ultra pure avec un objectif de vérification et contrôle de la contamination potentielle au cours du processus analytique complet. Des blancs méthode ont été injectés en début et fin de séquence et après chaque contrôle positif.
- Blanc terrain : échantillon d'eau témoin (Evian) acheminé sur le terrain avec un transfert du contenu du flacon initial vers un second flacon au moment des prélèvements. Cette manipulation permet d'exposer le blanc aux mêmes conditions environnementales que l'échantillon, afin de vérifier l'absence de contamination potentielle durant la procédure d'échantillonnage et de transport. Un blanc terrain par département a été effectué, excepté pour les départements de l'Orne (61) et du Tarn-et-Garonne (82).

La stratégie de définition des blancs a été adaptée à la méthode mise en œuvre dans cette étude. Ainsi, dans le cadre de l'utilisation d'une méthode SPE-online-LC-HRMS, les blancs méthodes ont été plus nombreux que les blancs instrumentaux car ils sont plus intégratifs et englobent à la fois la méthode d'extraction (SPE), la méthode de séparation et l'ensemble de l'appareil analytique.

En moyenne, les blancs représentent 17% des injections d'une série analytique.

1.3.2.2 Traceurs internes

Une solution de huit traceurs internes a été ajoutée à chaque échantillon et à l'ensemble des contrôles qualité afin de vérifier le bon déroulement de l'analyse depuis l'étape d'extraction jusqu'à l'analyse finale afin de tracer les possibles effets matriciels propres à chaque échantillon et la dérive de l'instrument de mesure. Ces traceurs ont été sélectionnés pour couvrir un large panel de composés recherchés en termes de temps de rétention (tr), masse moléculaire, sensibilité et classe d'usage/chimique.

Cette solution est constituée des étalons analytiques suivants : D_{10}-Carbamazépine, D_6-Chlorpyrifos-methyl, D_6-Diuron, D_6-Metolachlor, D_6-Omethoate, m3-PFHxS ($^{13}C_3$-PFHxS). Les D_{10}-Carbamazépine, D_6-Chlorpyrifos-methyl, D_6-Diuron, D_6-Metolachlor, D_6-Omethoate en mode positif et D_6-Diuron, m3-PFHxS ont été utilisés en mode négatif.

1.3.2.3 Contrôles positifs

Des solutions de contrôle positif ont été injectées dans chaque séquence analytique afin de suivre les performances de la méthode. Ces contrôles ont consisté en l'injection d'un mélange connu de 80 étalons analytiques aux concentrations de 100 ng/L et 500 ng/L. Deux types de contrôles positifs ont été mis en œuvre : le premier dans l'eau ultra pure (QC_solvant) et le second en matrice (échantillons naturels dopés) (QC_matrice) (Annexe 4). Les contrôles positifs en matrice permettent de surveiller les effets matriciels des échantillons sur la méthode notamment les effets d'ionisation, dérives des temps de rétention, susceptibles d'influencer la détection et l'identification des composés. Des critères d'acceptation sur ces contrôles qualité ont été établis et ont conditionné la validation de chaque séquence analytique.

1.3.2.4 Replicats

Chaque échantillon a été analysé en dupliquat sans injection aléatoire. Cette répétition de l'injection a pour but de vérifier la répétabilité de la réponse et de ne conserver que les signaux robustes ainsi que déceler des éventuels effets mémoires. La moyenne de la réponse des deux injections a été conservée lorsque que les deux réplicats sont positifs. En l'absence du composé dans l'un des réplicats, le résultat a été exclu.

1.3.3 Base de données interne

- **Généralités**

Les bases de données (BDD) sont un outil essentiel dans les approches non ciblées, pour l'interprétation des résultats et l'identification des signaux obtenus par la méthode. Ces BDD regroupent des informations caractéristiques d'un composé (masse exacte de l'ion moléculaire, fragments, profil isotopique, formule brute, mode d'ionisation, etc…) pour les bases non spectrales, ainsi que des spectres MS ou HRMS/MS pour les bases spectrales. Dans ce dernier cas, des informations relatives aux conditions d'obtention des spectres (méthode analytique, instrument et ses réglages, etc…) sont également disponibles. Là encore l'absence de cadre harmonisé et consensuellement établi conduit à une très grande diversité de ces BDD et limite leur interopérabilité.

Par comparaison des données expérimentales aux données théoriques de la BDD, une identité peut être attribuée aux signaux. Les BDD utilisées peuvent être des BDD internes ou externes :

- Une BDD interne est établie par le laboratoire sur l'instrument utilisé avec la même méthode analytique que celle mise en œuvre pour l'analyse des échantillons,
- Une BDD externe est une base regroupant les données d'un ou plusieurs laboratoires extérieurs, sur différents instruments, avec des conditions opératoires (méthode chromatographique, mode d'acquisition, réglages du spectromètre de masse, etc..) pouvant varier.

La qualité d'une BDD influence la fiabilité de l'identification et donc la robustesse des résultats. Des informations erronées ou incomplètes, des spectres de mauvaise qualité ou encore des méthodes d'acquisition trop différentes peuvent affecter la pertinence d'une BDD. À ce titre, une BDD interne s'avère plus robuste, en raison notamment de conditions opératoires maîtrisées.

■ Construction de la BDD interne

L'injection d'étalons de composés connus dans le système analytique et avec les conditions chromatographiques employées par le laboratoire va permettre de constituer une base de données incluant des données spectrométriques de référence mais également des temps de rétention expérimentaux. En complément des données spectrométriques, la concordance des temps de rétention de cette base de données avec les temps de rétention de composés suspectés va permettre de confirmer et de valider la proposition pour la nature d'une molécule suspectée.

Initialement élaborée à partir des étalons analytiques disponibles au sein du laboratoire, elle a fait l'objet d'un enrichissement continu basé notamment sur une veille scientifique, l'intégration de signaux faibles, de travaux de l'Anses, et d'informations issues de réseaux de surveillance prospective. La collaboration avec d'autres laboratoires internes et externes à l'agence a permis des échanges d'étalons analytiques. Par le principe intrinsèque de l'approche non ciblée, à savoir l'acquisition d'empreinte chimique sans *a priori* et leur retraitement *a posteriori*, cet enrichissement a pu être mené durant la campagne nationale avec plus de 100 composés ajoutés entre mai 2023 et juillet 2025 et il se poursuit encore.

Au moment du lancement du retraitement des résultats (juillet 2025), 841 étalons analytiques ont été injectés selon la méthode analytique décrite précédemment (§ 1.3.2), dont 581 ont été considérés comme analysables par la méthode optimisée par le laboratoire. Ils ont été intégrés à la base de données avec les informations suivantes : masse exacte, temps de rétention, mode d'ionisation et données de fragmentation. Les molécules non intégrées à cette BDD interne correspondent principalement à des composés présentant des propriétés physico-chimiques particulières, telles qu'une faible masse moléculaire, un faible coefficient de partage octanol/eau (log K_{ow}) ou une rétention trop importante sur la colonne. À titre d'exemple, des molécules telles que la metformine (log $K_o w$ = −1,3), l'atrazine desethyl-deisopropyl DEDIA (log $K_o w$ = −0,1), le glyphosate (log $K_o w$ = -4,6), l'acide trifluoroacétique TFA (log $K_o w$ = 0,9), les BAC-C16 à C18 (log $K_o w$ = 9,5 et 10,6) n'ont pas pu être intégrés à cette BDD.

Cette base de données a un nombre défini et fixé de molécules. Les résultats sont donc influencés par la composition de cette base. Par exemple, une plus grande proportion de pesticides dans les résultats peut être liée à la constitution de base et pas nécessairement à une pression particulière de cette famille de composés.

L'annexe 5 regroupe l'ensemble des composés constituant la BDD interne du LHN avec leurs paramètres d'identification. Sur les 581 composés de la base de données, on dénombre 372 substances actives de pesticides[1] et leurs métabolites, 89 principes actifs pharmaceutiques (humains et vétérinaires) et métabolites, 57 composés per-et polyfluroalkylés (PFAS), 36 produits industriels, 12 dites domestiques, huit ingrédients cosmétiques, trois résidus d'explosifs, deux toxines et deux produits naturels.
A noter que les molécules référencées dans la BDD interne ont été classées pour certaines arbitrairement selon leurs usages ou classe chimique, comme indiqué en figure 3.

[1] Sans préjuger de leur statut d'autorisation (un certain nombre de substances actives de la base sont interdites)

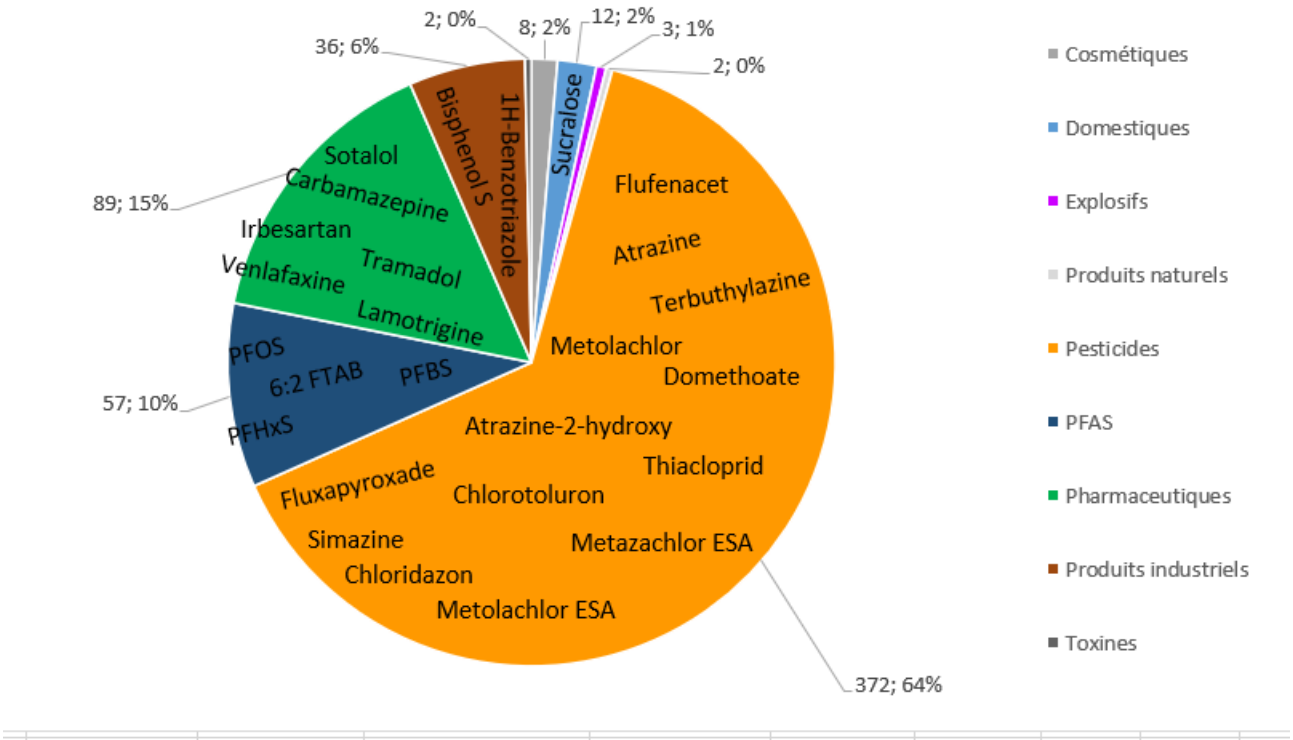


Figure 3 : Caractéristique de la base de données interne : nombre/répartition selon l'usage ou la classe chimique

1.3.4 Mise en œuvre dans le cadre d'une campagne nationale

La méthode analytique SPE-Online-LC-HRMS a été mise en œuvre dans le cadre de la campagne nationale 2023-2025, dans le but d'établir sa robustesse dans le temps sur des matrices variées et évaluer l'intérêt de cette approche pour l'acquisition de données d'occurrence de composés chimiques dans les eaux destinées à la consommation humaine et leur ressource à une grande échelle.

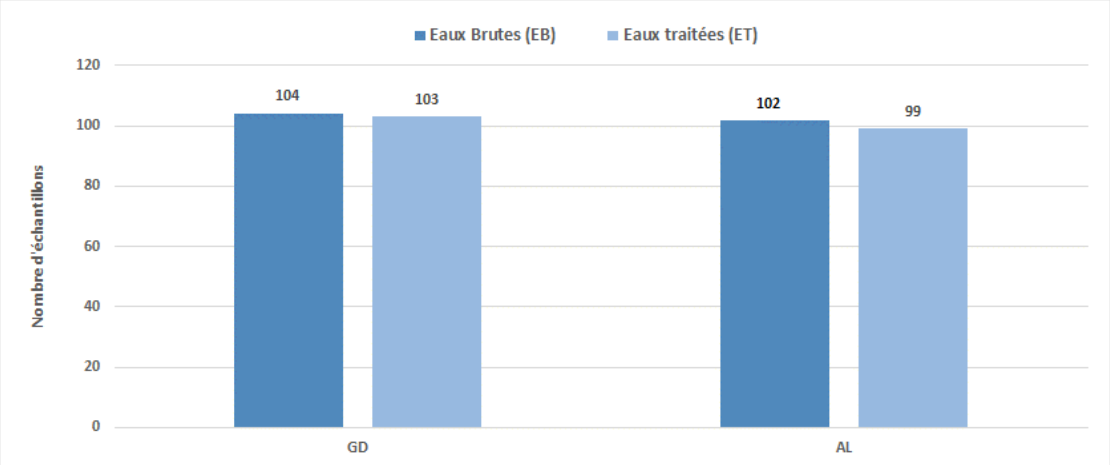
Dans ce contexte, tous les départements (hexagonaux et ultramarins) ont fait l'objet d'un échantillonnage grâce à une étroite collaboration avec les ARS. Pour chaque département, deux types de points (couples EB/ET) ont été échantillonnés :

- Le point de gros débit (GD), dont les ressources fournissent le plus gros débit d'eau traitée du département,
- Un point aléatoire (AL), dont les ressources sont issues d'un tirage au sort aléatoire sur chaque département,

Les échantillons ont été prélevés à l'occasion des actions du contrôle sanitaire des eaux, dans des flacons en verre selon les recommandations formulées par le LHN.

Le retour des échantillons a été réalisé dans des emballages réfrigérés, avec un contrôle à réception de la température de l'enceinte. Les échantillons ont été réceptionnés au laboratoire dans les 24 à 48 heures suivant le prélèvement dans la majorité des cas. Seuls quelques échantillons sont parvenus au laboratoire une semaine à deux semaines après le prélèvement (cas des DROM en particulier).

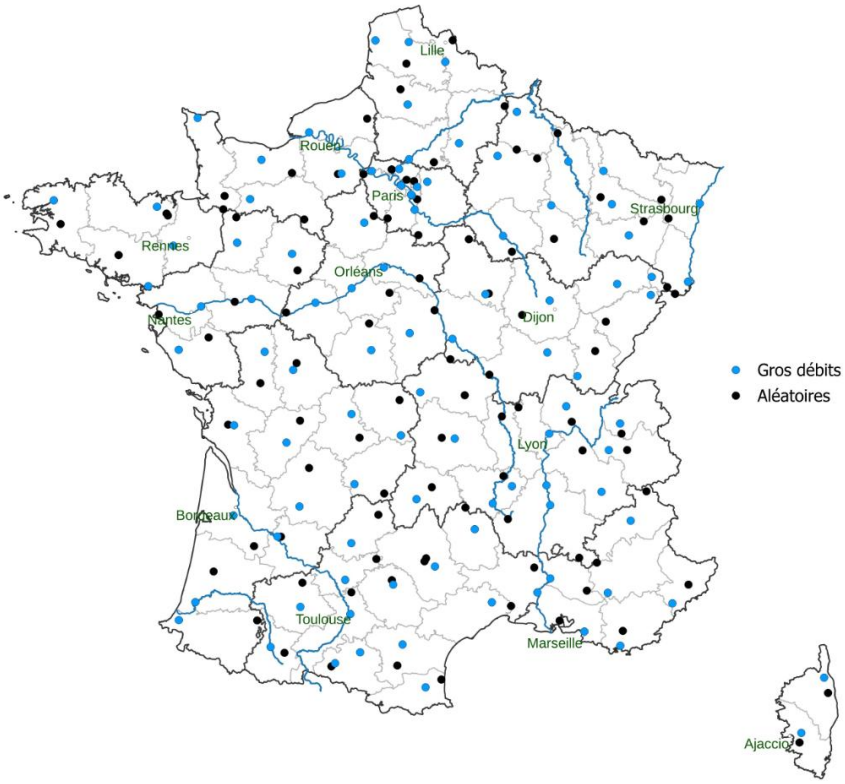
Au total, 206 eaux brutes (EB) et 202 eaux traitées (ET) ont été analysées avec une majorité d'eaux d'origine souterraine (136) par rapport aux eaux d'origine superficielle (70). La répartition des échantillons prélevés en eaux brutes (EB) et eaux traitées (ET) en fonction du type de points (gros débit (GD), aléatoire (AL)) est présentée sur la figure 4.



(ET) en fonction de la catégorie de points gros débit (GD) et aléatoire (AL)

Figure 4 : Répartition des échantillons prélevés en eaux brutes (EB) et eaux traitées (ET) en fonction du type de points gros débit (GD) et aléatoire (AL)

La localisation géographique des points d'eau brute prélevés en fonction de leur type est présentée sur la figure 5.



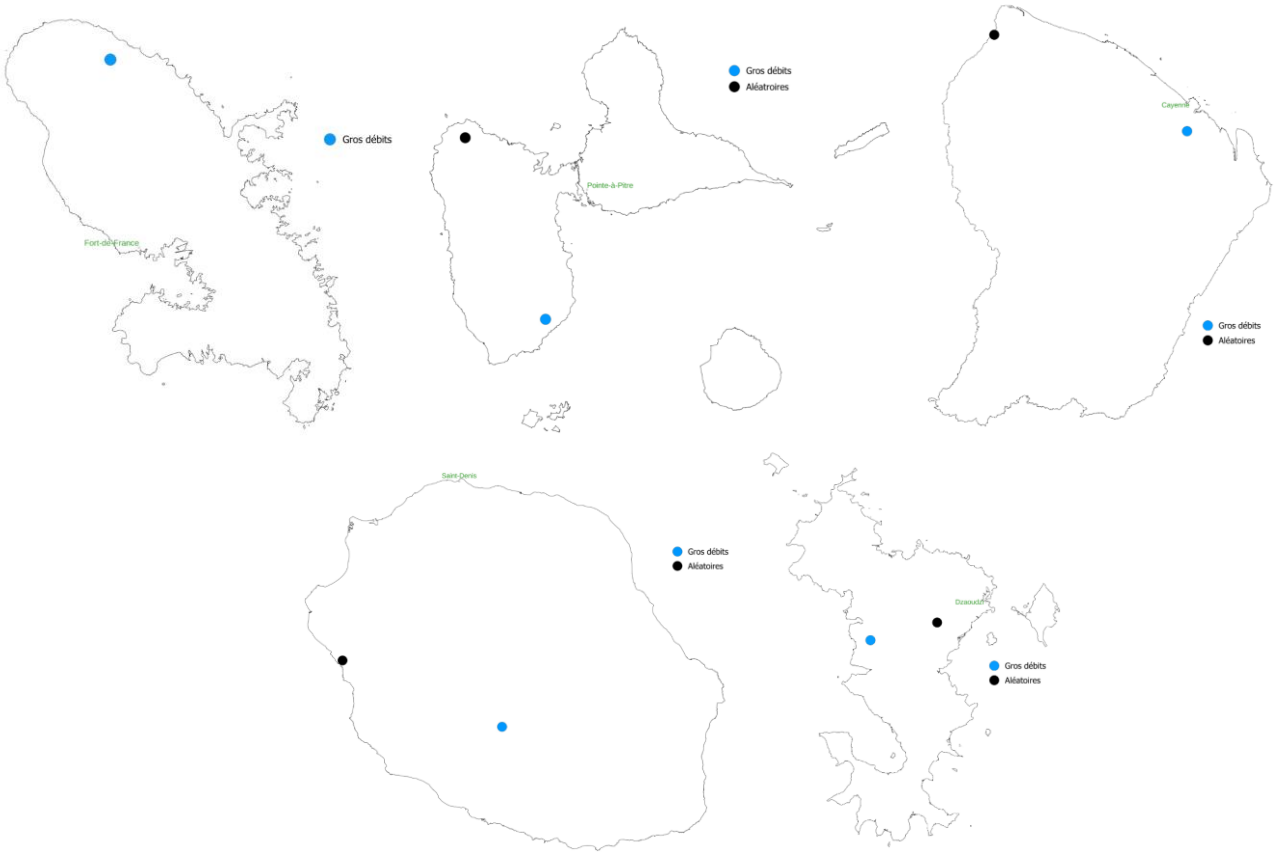


Figure 5 : Distribution géographique des eaux brutes prélevées en métropole et dans les DROM (Martinique, Guadeloupe, Guyane, Réunion, Mayotte). (GD = point bleu ; AL = point noir)

2 Résultats

2.1 Robustesse de la méthode et construction de la démarche de traitement des données

Cette analyse par SPE-online-LC-HRMS mise en œuvre pour la première fois au LHN dans le cadre d'une campagne à grande échelle, a permis de répondre à plusieurs interrogations relatives : (i) au cadre assurance qualité/contrôles qualité nécessaire à l'obtention de résultats fiables (traceurs internes, blancs, contrôles qualité) ; et (ii) à la pertinence des critères retenus pour le traitement des données (prise en compte des blancs, définition d'un seuil minimal d'intensité, critères associés aux traceurs internes, etc.), (iii) à la robustesse de ce type de méthode dans le temps.

Le comportement des différents contrôles qualité a donc été étudié pour vérifier la stabilité de la méthode sur l'ensemble des analyses, échelonnées sur 12 mois en 37 séries analytiques intégrant des qualités d'eau très variables.

2.1.1 Bilan et maitrise des blancs

2.1.1.1 Maitrise des blancs laboratoire

Le niveau de contamination a été particulièrement étudié dans les blancs analysés durant les séries analytiques. Des phénomènes de contaminations croisées entre deux analyses peuvent également exister provoquant des artefacts et possiblement des faux positifs.

Sur les 581 molécules recherchées, 130 ont été identifiées au moins une fois dans des blancs sur l'ensemble de la campagne. La fréquence de blancs positifs par rapport aux nombres de blancs injectés a été calculée par molécule détectée. Le pourcentage moyen est de 29%, le pourcentage médian de 19%. Pour 34 composés (17 pesticides, onze molécules industrielles, trois cosmétiques et trois PFAS), plus de 50% des blancs injectés sont contaminés. Cette contamination justifie l'application d'un seuil pour l'interprétation des résultats des échantillons.

Ainsi, en l'absence de consensus, un choix arbitraire pour la prise en considération des blancs dans le processus d'identification des composés a été défini. Il est basé sur le rapport entre l'intensité du signal dans l'échantillon et la moyenne + 10 fois l'écart-type des blancs injectés dans la même série analytique. Cette règle de calcul, couramment utilisée dans différents domaines analytiques pour l'analyse de traces est une approche très protectrice par rapport à un risque de faux positifs.

En fonction de la molécule, entre 0,2% et 95% des échantillons seront concernés par l'application de ce seuil. Ces résultats montrent l'importance de ce critère, dont le choix influencera nécessairement le ratio faux positifs/faux négatifs. Les molécules les plus concernées sont des pesticides utilisés comme biocides notamment dans le nettoyage des surfaces, des molécules industrielles pouvant être présentes dans le bâtiment et les équipements du laboratoire.

L'analyse des blancs a également permis de mettre en évidence un effet mémoire pour cinq molécules (telmisartan, fexofenadine, venlafaxine, propanol et acébutolol), après injection des contrôles positifs. La décision a été prise d'écarter l'ensemble des dix échantillons suivant les contrôles positifs pour chacune de ces molécules.

Ces résultats confirment l'importance des blancs dans l'obtention d'identifications fiables et robustes. L'application d'un seuil permet de réduire le nombre de faux positifs, sans exclure totalement des composés. Par ailleurs, l'application de ce critère a amené à exclure des molécules identifiées dans des échantillons dont les blancs étaient fortement contaminés et susceptibles d'induire des faux négatifs.

2.1.1.2 Maitrise des blancs terrain

Les blancs terrain permettent de mettre en évidence et d'intégrer des risques de contaminations externes des échantillons au-delà du laboratoire tels que l'effet préleveur, le matériel d'échantillonnage, l'environnement, le transport. Les blancs terrain ont été considérés comme des échantillons, suivant le même processus analytique et de traitement de données.

Ainsi, 37 composés ont été identifiés au moins une fois dans des blancs terrain, donc 35 déjà mis en évidence dans les blancs laboratoire. Les blancs terrain sont globalement peu contaminés. Sept composés sont identifiés dans plus de 5 % des blancs terrain (PFAS : DPOSA, pesticides : Dinoterbe, Prosulfocarb, biocides : DDAB-C8, BAC-C8, produits industriels : Isophorone, TCEP).

Les blancs terrain ont démontré une maîtrise globale du processus et ont pu apporter ponctuellement des informations supplémentaires sur les possibles sources de contamination des échantillons. Aussi, il a été choisi de ne pas considérer les blancs terrain dans la stratégie de traitements des données pour les échantillons.

2.1.2 Bilan des traceurs internes

Le contrôle des traceurs internes permet de vérifier l'absence de dérive instrumentale au cours des séries d'analyses et entre les séries et appréhender les effets matrice. Trois critères ont été contrôlés : i) l'erreur en masse, ii) l'erreur absolue sur le temps de rétention par rapport au temps de référence et iii) la variation de l'intensité des signaux des traceurs internes.

Les figures 6 à 8 regroupent les résultats par type d'échantillon blanc méthode, blanc terrain, échantillon réel, contrôle qualité en solvant et en matrice et par traceur.

Les critères pour l'erreur en masse et en temps de rétention ont été établis selon les seuils de tolérance consensuels ou retours d'expérience dans les réseaux experts (Schulz, W et al, 2019 ; Soulier, C et al, 2021 ; Rapport AQUAREF 2021 – BRGM RP-71775, 2021 ; Réseau de Surveillance prospective-AQUAREF BRGM/RP-70108-FR, 2020, Norme ENF ICO 21253-1).

Dans cette étude, L'erreur en masse se concentre entre -10 ppm et 10 ppm dans le cas du D_6-Chlorpyrifos-methyl, autour de -5 ppm pour le m3-PFHxS et entre -5 et 5 ppm pour les D_{10}-Carbamazepine, D_6-Metolachlor, D_6-Diuron et D_6-Omethoate. Aucune déviation n'est observée en fonction du type d'échantillon, l'erreur de masse ne semble pas être influencée par la matrice.

Les valeurs de l'erreur absolue sur les temps de rétention sont comprises entre -0,2 et 0,2 minutes pour l'ensemble des types d'injection et tous les traceurs.

Les coefficients de variation des intensités ont été calculés par série d'analyse et par type d'échantillon pour chacun des traceurs. Les résultats montrent que les coefficients de variation sont en général inférieurs à 40%, pour tous les traceurs ; c'est-à-dire du même ordre de grandeur que ceux observés par des analyses ciblées par chromatographie en phase liquide couplée à la spectrométrie de masse. Quelques exceptions existent, particulièrement pour le m3-PFHxS dans les contrôles positifs (solvant et matrice) et pour le D_6-Chlorpyrifos-methyl dans les blancs. Plusieurs phénomènes peuvent expliquer ces variations plus importantes : dérive instrumentale, effets matrices, problématique d'intégration automatique des signaux.

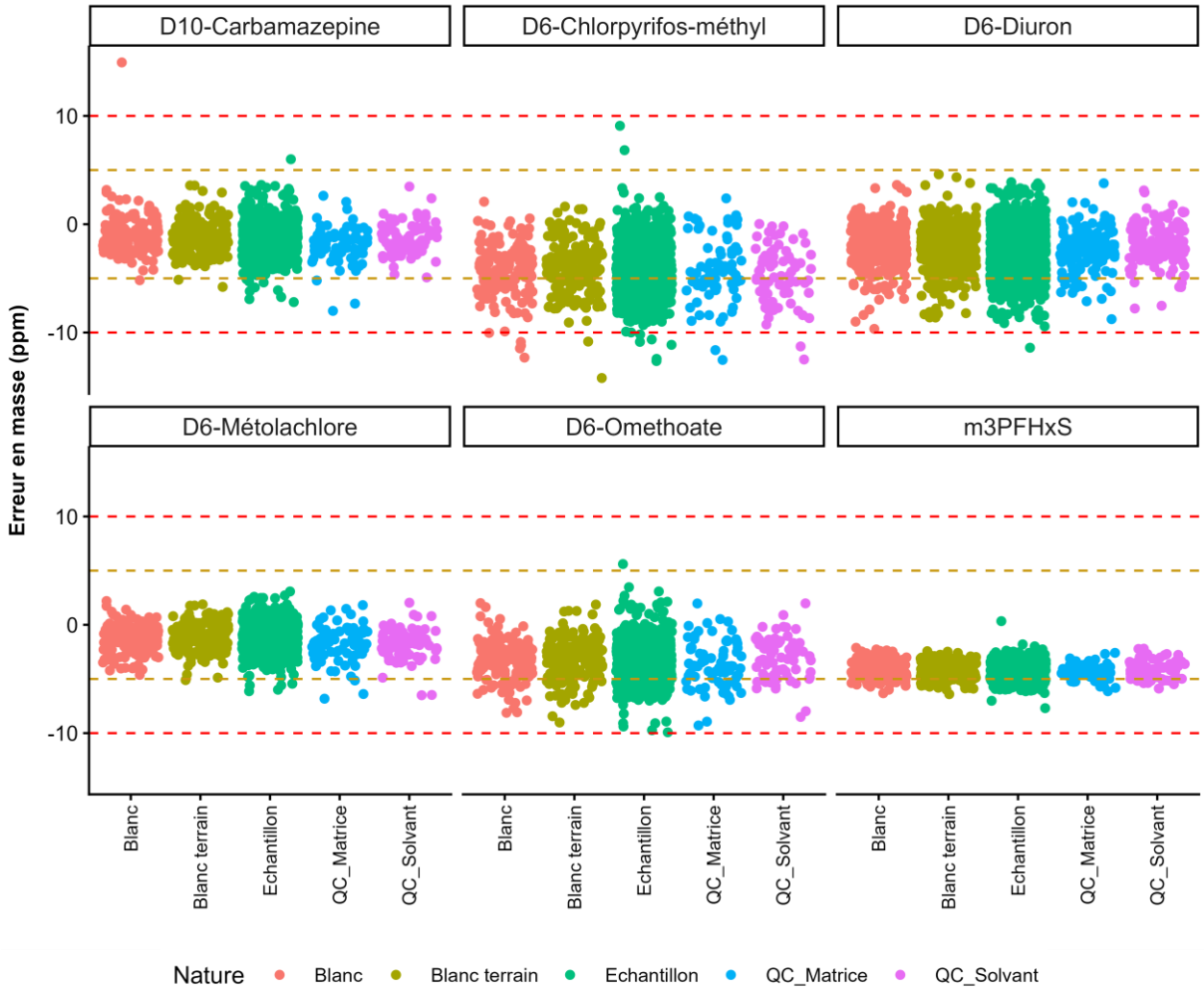


Figure 6 : Bilan des valeurs de l'erreur en masse (ppm) pour chaque traceur interne et par type d'échantillon. QC : Contrôle qualité.

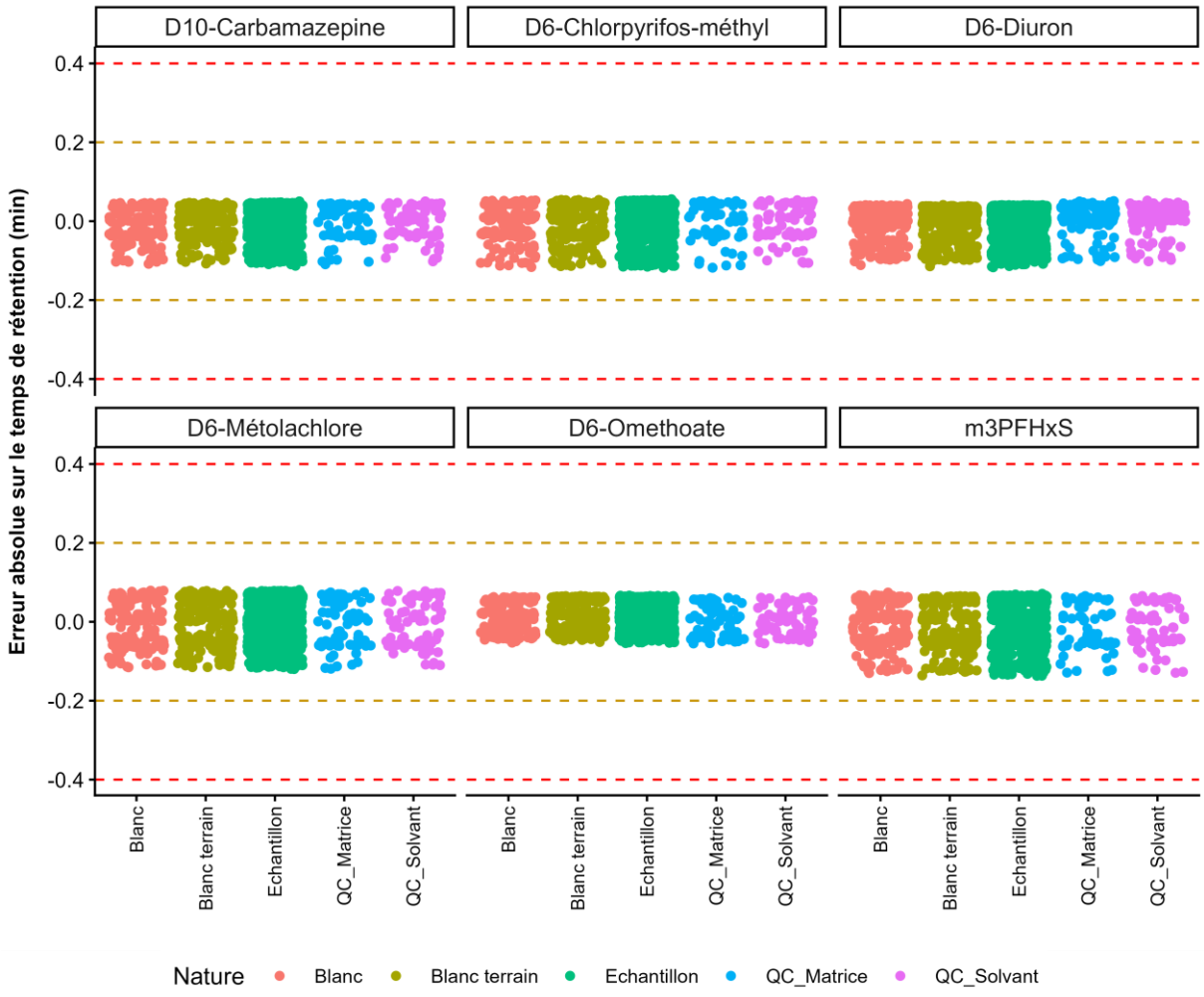


Figure 7 : Bilan des valeurs de l'erreur absolue sur le temps de rétention (min) pour chaque traceur interne par type d'échantillon. QC : Contrôle qualité.

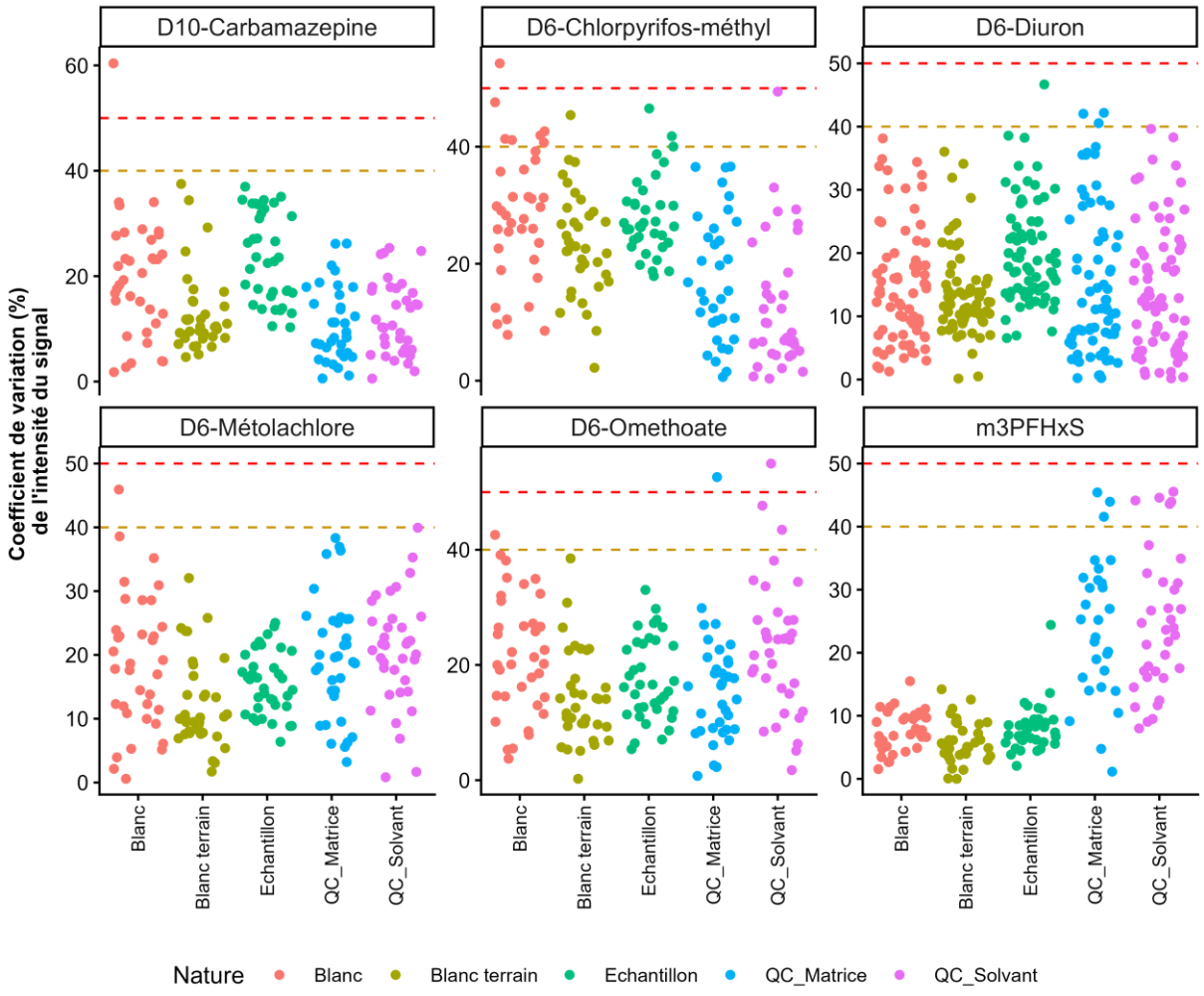


Figure 8 : Bilan des valeurs de coefficient de variation (%) de l'intensité du signal sur une séquence par traceur interne et par nature de l'échantillon. QC : Contrôle qualité.

Le tableau 1 regroupe pour chaque traceur interne : le coefficient de variation de l'intensité du signal du traceur interne et les coefficients de variation médian des séries, l'erreur médiane en masse et l'erreur absolue médiane sur le temps de rétention.

Tableau 1 : Coefficients de variation de l'intensité, médianes de l'erreur en masse (ppm) et de l'erreur absolue (min) sur l'ensemble des séries par traceur interne

Traceurs internes	Coefficient de variation sur l'ensemble des séries (%)	Coefficient de variation médian (%)	Médiane de l'erreur en masse (ppm)	Médiane de l'erreur absolue sur le temps de rétention (min)
Mode d'ionisation positif				
D_{10}-Carbamazepine	39	32	-1,4	-0,01
D_6-Chlorpyrifos-methyl	47	32	-3,9	<0,01
D_6-Diuron	44	31	-1,3	0,01
D_6-Metolachlor	40	23	-1,3	-0,01
D_6-Omethoate	51	29	-3,2	<0,01
Mode d'ionisation négatif				
D_6-Diuron	41	17	-2,6	-0,01
$^{13}C_3$-PFHxS	24	13	-4,2	-0,02

L'erreur en masse médiane est comprise entre -5 et 5 ppm, l'erreur absolue sur le temps de rétention entre -0,02 et 0,01 min et les coefficients de variation des intensités sur l'ensemble des séries entre 24% et 51%. Le coefficient de variation médian est lui compris entre 13% et 32%.

Ces résultats confirment une bonne stabilité au cours du temps de la méthode SPE-online-LC-HRMS sur les 3 critères considérés et constituent un prérequis important pour le bon déroulement des travaux. Dans le cas des approches suspectes et non ciblées, les traceurs internes sont essentiels à la qualification de la maitrise et du bon déroulement de la série analytique : prérequis essentiel aux traitements des données.

2.1.3 Bilan des contrôles positifs

L'objectif des contrôles positifs a été de vérifier le maintien des performances de la méthode de mesure et des traitements des données (identification) tout au long de la campagne pour une liste représentative de composés préétablis.

De la même manière que les traceurs internes, l'erreur en masse et l'erreur absolue sur le temps de rétention ont été retenus. De plus, le pourcentage de composés détectés par rapport au nombre ajouté dans les contrôles positifs a été calculé.

Sur l'erreur en masse, plus de 94% des valeurs en solvant et 90% des valeurs en matrice, se situent entre -5 et 5 ppm. Moins de 0,5% des valeurs peuvent être considérés comme hors limites (>10 ppm ou <-10 ppm). Pour l'erreur sur les temps de rétention, plus de 97% des valeurs en solvant et 94% des valeurs en matrice, se situent entre -0,2 et 0,2 minutes. Moins de 3% des valeurs sont situées hors de ces bornes en solvant, et entre 3% et 5% en matrice. Ces valeurs

supérieures à ±0,2 minutes peuvent s'expliquer d'une part, par une dérive analytique, et d'autre part, par des effets matrices dans les contrôles positifs en matrice. Suite à ces résultats, le critère du temps de rétention a été adapté pour tenir compte de ces effets matrices. Le critère est ainsi considéré satisfait pour un écart inférieur à ±0,2 min par rapport à la référence de la BDD ou de ±0,4 min s'il y a présence de 3 fragments ou plus. En effet, l'intégration de multiples fragments dans le critère conforte la robustesse du critère hors des bornes de 0,2 minutes, et évite les faux positifs.

Les figures 9 à 11 présentent les résultats obtenus pour chacun de ces critères. Pour les contrôles positifs en solvant, entre 97% et 99% des composés sont retrouvés selon le niveau de concentration, 95% en matrice quel que soit le niveau de concentration. Deux contrôles positifs en matrice sont ≤70%, dans deux séries différentes traduisant une perte de sensibilité transitoire de l'instrument associée ou un effet de matrice sévère.

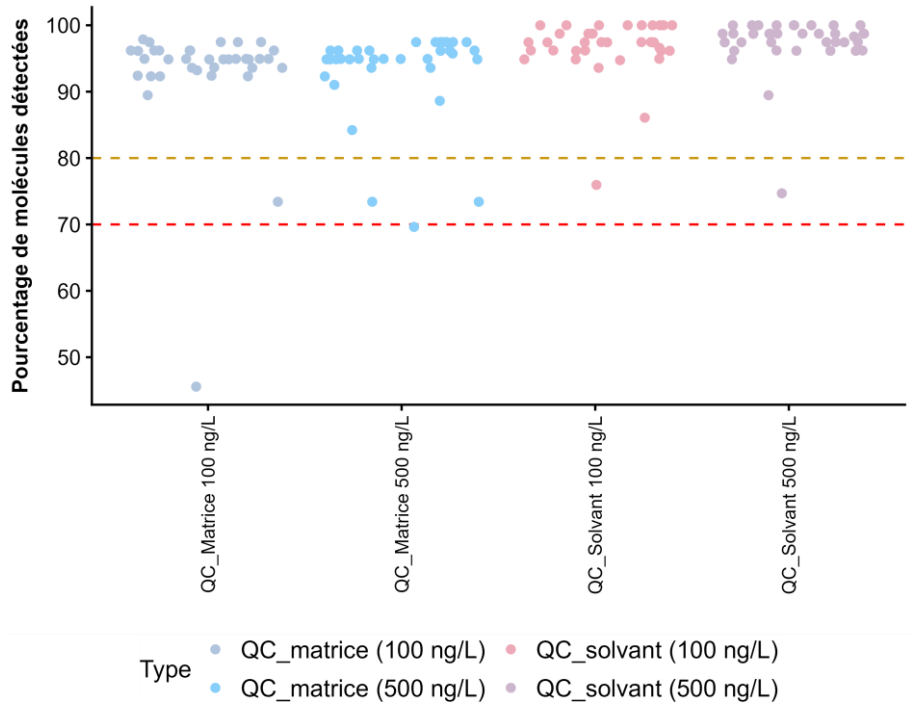


Figure 9 : Bilan du pourcentage de molécules identifiées par type de contrôle positif. QC : Contrôle qualité.

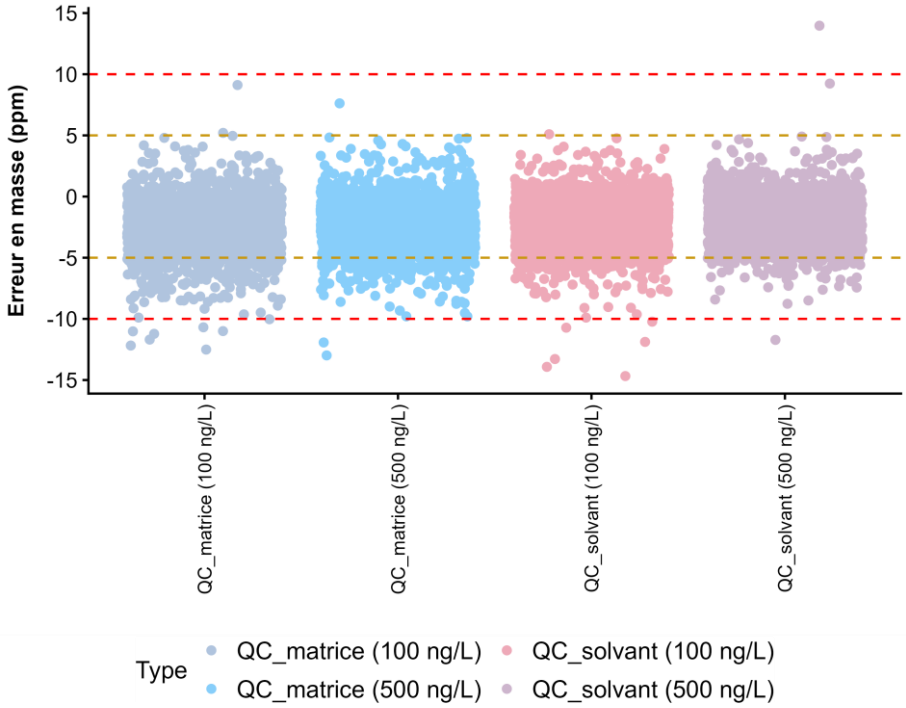


Figure 10 : Bilan des valeurs de l'erreur en masse (ppm) par type de QC. QC : Contrôle qualité.

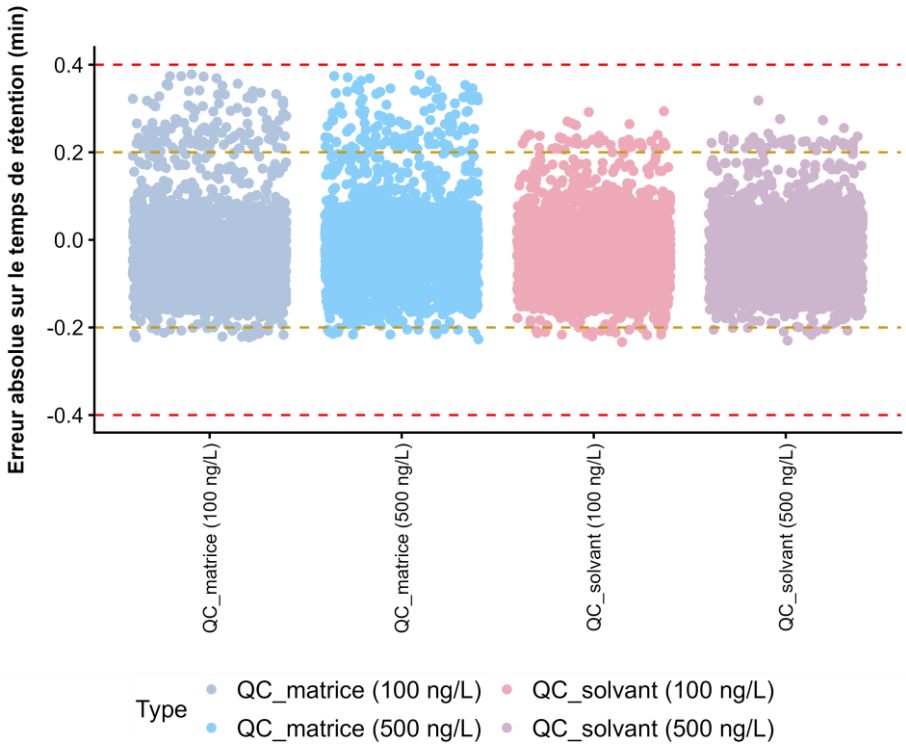


Figure 11 : Bilan des valeurs de l'erreur absolue sur le temps de rétention (min) par type de QC. QC : Contrôle qualité.

Le tableau 2 résume les médianes par type de contrôle positif pour les trois critères. Ainsi, le pourcentage médian de molécules identifiées est de 95% en matrice et supérieur à 97% en solvant. L'erreur en masse médiane est comprise en -2,4 ppm et -2,0 ppm. L'erreur absolue médiane sur les temps de rétention est comprise entre -0,03 et -0,02 minutes.

Tableau 2 : Médianes du pourcentage de molécules identifiées, de l'erreur en masse (ppm) et de l'erreur absolue (min) sur l'ensemble de la campagne par traceur interne

Contrôles positifs	Pourcentage médian de molécules identifiées	Médiane de l'erreur en masse (ppm)	Médiane de l'erreur absolue sur le temps de rétention (min)
Contrôle matrice – 100 ng/L	95	-2.4	-0.03
Contrôle matrice – 500 ng/L	95	-2.2	-0.02
Contrôle solvant – 100 ng/L	97	-2.1	-0.03
Contrôle solvant – 500 ng/L	99	-2.0	-0.03

L'ensemble de ces résultats permet de démontrer la stabilité dans le temps de la méthode SPE-online-LC-HRMS et sa robustesse dans un domaine de concentration pertinent. Des effets matrices ont été relevés pour les contrôles réalisés sur des échantillons naturels dopés. Ceux-ci restent néanmoins limités. Les résultats des traceurs internes présentés en 2.1.2 sont cohérents avec les performances relevées pour les contrôles positifs. Par ailleurs, ces résultats ont permis d'affiner les critères mis en œuvre dans la stratégie d'identification appliquée aux échantillons de la campagne.

2.1.4 Bilan des réplicats

Pour chaque échantillon et blanc terrain, les analyses ont été réalisées en duplicat. En l'absence de cadre harmonisé ou normé, un critère d'acceptation sur le coefficient de variation entre les deux replicats a donc été défini dans cette étude. Un seuil de variation maximal de 30% a été appliqué après application des autres critères (erreur en masse, erreur en temps de rétention et seuil des blancs). Afin de limiter le risque de faux positifs si un composé a été identifié dans un seul réplicat, alors le résultat est exclu. Après application de ce seuil, 32% des résultats ont été exclus. Cette valeur met en évidence l'importance de ce critère et l'enjeu de la détermination du seuil de tolérance vis-à-vis du risque faux positif/faux négatif. Ce seuil doit néanmoins être adapté en fonction de la stabilité de la méthode, du mode de préparation d'échantillon et du mode d'injection, un critère trop strict risquant de mener à un nombre trop important de faux négatifs.

2.1.5 Conclusion sur la robustesse de l'approche et définition de la stratégie de traitement des données

2.1.5.1 Conclusions

Une méthode d'analyse par SPE en ligne associée à la chromatographie en phase liquide couplée à la spectrométrie de masse haute résolution a été validée et mise en œuvre dans une campagne de surveillance exploratoire à grande échelle. En l'absence de cadre harmonisé ou normatif, afin de s'assurer de la production et l'exploitation de résultats fiables, un cadre d'assurance qualité et de contrôle qualité exigeant a été mis en place. Ces contrôles qualité sont de plusieurs natures : blancs, traceurs internes, contrôles positifs, replicats d'analyse. Ils ont permis d'une part de vérifier la maitrise et la robustesse de la méthode au cours du temps et d'autre part de définir et d'adapter la démarche d'identification des composés aux objectifs de cette étude et du présent rapport.

Le bilan de l'analyse des trois types de blancs a mis en évidence une contamination par certains composés et a confirmé l'importance de ce contrôle qualité. L'application d'un seuil minimal de signal que les échantillons doivent satisfaire permet de prendre en compte ces contaminations et ne retenir que les échantillons contaminés au cours de la méthode. Les bilans des traceurs internes et des contrôles positifs ont mis en évidence la stabilité de la méthode au cours de la campagne. L'erreur en masse et sur les temps de rétention sont globalement situés dans les bornes de valeurs souhaitées, au regard des exigences attendues. Plus de 95 % des molécules dopées dans les contrôles positifs ont été identifiées au cours de la méthode, y compris en matrice et à une faible concentration. La réplication de l'analyse a également illustré son intérêt avec l'élimination de 32% des résultats d'analyse, dont la variabilité a été jugée trop importante.

L'ensemble de ces résultats montrent que la méthode fonctionne, qu'elle est maitrisée et exploitable.

L'approche a cependant des limites qu'il convient de mentionner.

Cette nouvelle approche n'est pas universelle et la méthode d'extraction des échantillons joue un rôle essentiel sur le type de composés présents dans l'extrait. Le choix de la SPE-online a été effectué dans un compromis entre la sensibilité et les contraintes du laboratoire. Ce choix assumé entraine la perte de certains composés, notamment les plus polaires, restreignant le champ d'application aux composés moyennement polaires et plutôt apolaires.

Plusieurs actions ont été entreprises pour la réduction prioritaire des faux positifs, au détriment possible des faux négatifs. Un seuil minimal d'intensité de la réponse (pic du composé) a été appliqué. Des composés ont été exclus quand les blancs ont été considérés comme trop contaminés. Il est donc important de se rappeler que c'est une approche de compromis, dans les choix effectués qui vont influencer les résultats finaux.

Le but de l'étude présenté dans ce rapport n'est pas de donner des résultats quantitatifs mais se borne à ce stade à l'identification des composés. Par conséquent, aucune conclusion ne peut être émise sur les niveaux de concentration.

En conclusion, le retour d'expérience s'avère positif quant à la robustesse de la méthode. Les prérequis analytiques, les critères qualité et les points de vigilances ont été établis et éprouvés pour la validation et la stratégie de traitement des données.

2.1.5.2 Stratégie de traitements des données

La stratégie de traitements des données présentée dans ce rapport est issue d'une première approche avec une volonté de privilégier la limitation des faux positifs au détriment possible des faux négatifs. Des critères stricts ont été appliqués pour suivre cet objectif et sont assumés dans le cadre de cette étude pour ne conserver que l'information la plus robuste, et non pas des composés dont la fiabilité est discutable. Il a donc été décidé de n'exploiter dans ce rapport que les résultats présentant des indices de confiance élevés (≤ au niveau 2b). Dans un second temps, ces travaux pourront être poursuivis par des stratégies complémentaires au-delà de l'analyse de suspects par BDD interne effectuée ici.

Sur la base du retour d'expérience, les critères d'identification suivants ont été retenus :

- Erreur en masse en masse ≤ 10 ppm,
- Temps de rétention ±0,2 min par rapport à la référence de la BDD ou ±0,4 min si présence de 3 fragments ou plus,
- Intensité de la réponse (pic) dans l'échantillon > moyenne blancs + 10 écart-type (dans la série analytique).
- Coefficient de variation des duplicatas <30%,
- Intensité de la réponse (pic) moyenne > seuil prédéfini (1000). Ce critère a été intégré en raison de l'utilisation d'une intégration automatique des pics chromatographiques, susceptible d'intégrer le bruit de fond et donc d'engendrer des faux positifs en l'absence d'un seuil. Les pics ayant des réponses proches du seuil ont été vérifiés manuellement.
- Attribution d'un niveau de confiance 1 ou 2B.

Le niveau de confiance attribué a été défini en cohérence avec la note de recommandation d'Aquaref (Rapport AQUAREF 2022 –BRGM/RP-71775-FR).

Le logigramme résumant les étapes avant restitution des résultats est présenté en figure 12.

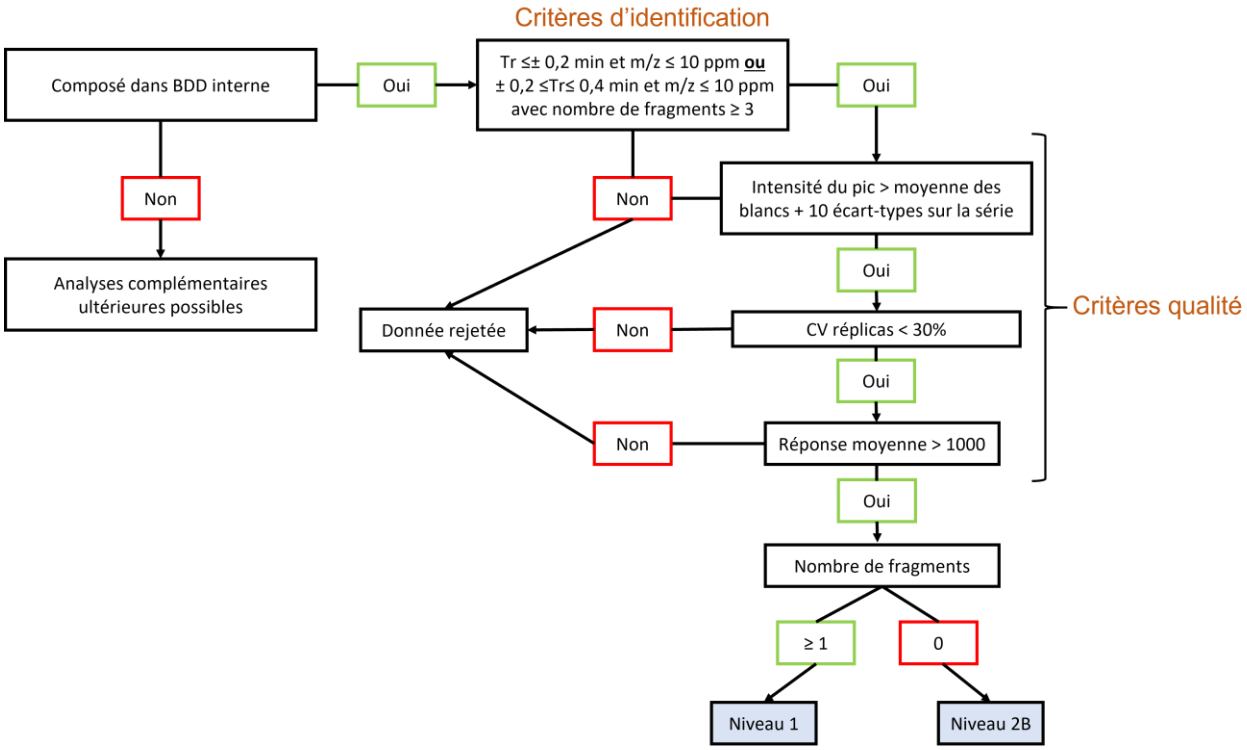


Figure 12 : Logigramme pour le traitement des données obtenues par la méthode SPE-online-LC-HRMS par échantillon et par composé. L'attribution du niveau de confiance est basée sur le rapport AQUAREF 2022 –BRGM/RP-71775-FR.

Il est important de souligner que les résultats présentés dans ce rapport ne mentionnent que les molécules identifiées dans les échantillons analysés. Le non-respect des critères d'identification ne signifie pas l'absence de la molécule dans l'échantillon.

2.2 Apports de l'approche sur la connaissance de la contamination des ressources et EDCH

Par souci de lisibilité, seuls les composés ayant une fréquence d'identification globale >1% ont été présentés dans la suite du rapport. Un niveau de confiance a été attribué à chaque composé sur la base des niveaux de confiance présentés dans la figure 12. Le niveau de confiance prédominant dans plus de 50 % des échantillons a été assigné au composé.

2.2.1 Eaux Brutes

Dans les échantillons analysés au cours de la campagne, aucun composé de type explosif, cosmétique, toxinique ou produit naturel n'a été identifié selon les critères mis en place.

Sur les 581 composés présents dans la base au moment du lancement de l'exploitation, 93 ont été identifiés, selon les critères et niveaux de confiance définis (niveau 1 et 2B), dans les 206 échantillons d'eaux brutes soit 16%. Parmi ces composés :

- 59 pesticides (18 de niveau 1, 41 de niveau 2B), soit 16% des 372 pesticides recherchés.
- 21 pharmaceutiques (8 de niveau 1, 13 de niveau 2B), soit 23% des 89 pharmaceutiques recherchés.

- six PFAS (niveau 2B) correspondant à 11% des 57 PFAS recherchés.
- quatre molécules d'usage domestique (niveau 2B), soit 33% des 12 molécules recherchées.
- trois composés industriels (niveau 2B), équivalent à 9% des 35 composés industriels recherchés.

Le niveau de confiance global majoritaire est le niveau 2B (72% des composés) et peut s'expliquer par des réponses trop faibles pour produire des fragments détectables et/ou des composés difficiles à fragmenter. C'est le cas par exemple pour les PFAS.

La figure 13 présente le nombre de composés identifiés par usage/classe chimique selon le type de ressources (ESO/ESU) et la nature des points (GD/AL p.m. « gros débit » et « aléatoire »). Le nombre de composés identifiés est similaire pour les eaux souterraines et les eaux de surface, à l'exception des pharmaceutiques plus fréquemment détectés dans les eaux superficielles. La vulnérabilité des eaux de surface notamment aux rejets de stations d'épuration (STEU) est susceptible d'expliquer cet écart. En effet, plusieurs études ont montré auparavant le rejet de multiples substances pharmaceutiques par les STEU (Bijlsma et al. 2021; Chaber-Jarlachowicz et al. 2025; Chiffre et al. 2016; Loos et al. 2013; Lopez-Herguedas et al. 2022; Martínez-Alcalá et al. 2021; Tisler et al. 2025; Ulvi et al. 2022; Wiest et al. 2018) . Le type de point (AL ou GD) n'a pas d'influence sur la diversité des composés identifiés.

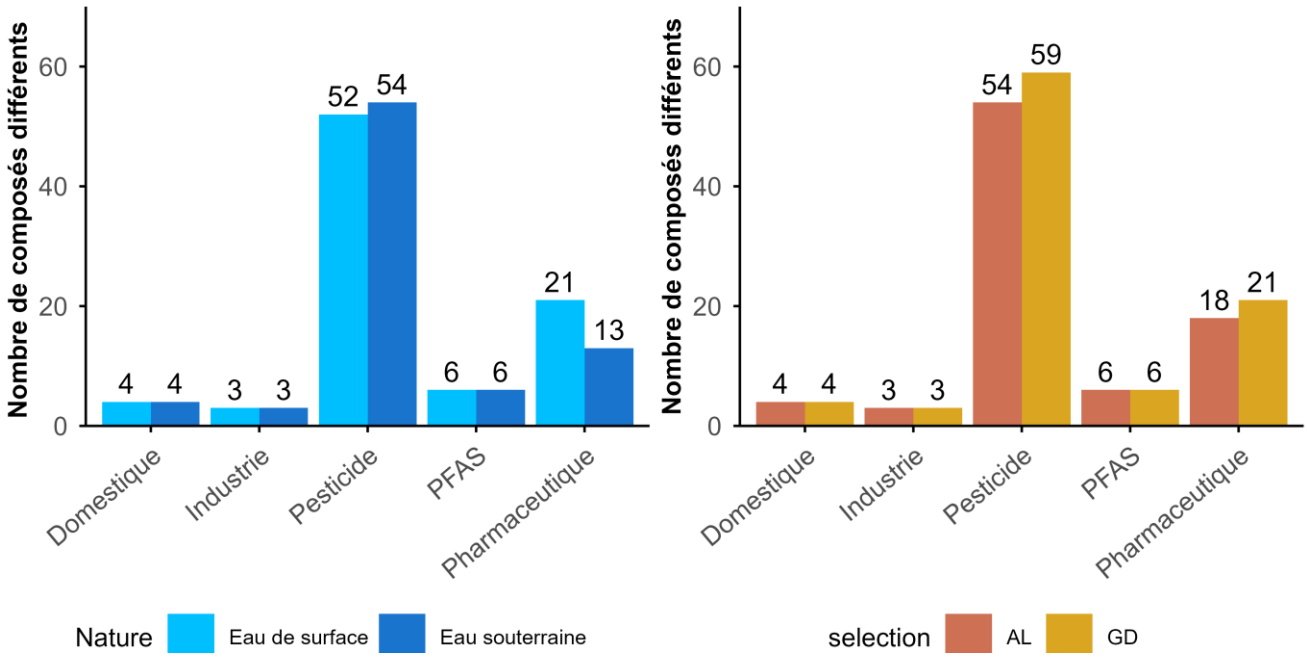


Figure 13 : Nombre de molécules distinctes par usage ou classe chimique, selon la ressource en eau brute (ESU, ESO) ou le type de site/point sélectionné (AL, GD).

Aucune molécule n'a été identifiée selon les critères en vigueur dans 26% des ESO et dans 13% des ESU. Pour les échantillons positifs, le nombre de composés identifiés s'étend d'un à 30 en ESO et d'un à 53 en ESU. Pour toutes les classes de composés, les eaux de surface présentent des fréquences d'échantillons positifs plus importantes que les eaux souterraines (figure 14). C'est le cas en particulier pour les classes d'usages domestiques, industrielles et pharmaceutiques, illustrant la plus forte vulnérabilité des eaux superficielles à ces classes de composés.

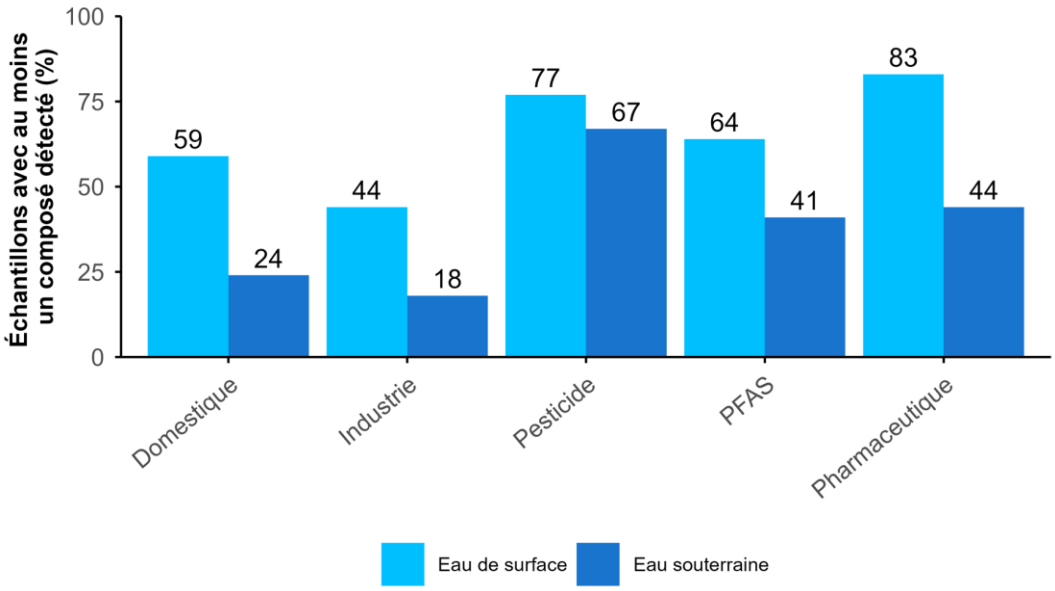


Figure 14 : Pourcentages d'échantillons où au moins un composé a été identifié, par famille de contaminants et par type de ressources

La distribution des fréquences d'identification par usage selon le type de ressource et le critère de sélection (AL ou GD) est représenté en figure 15. Pour les eaux de surface, la distribution est assez semblable pour les différentes familles à l'exception de la classe domestique pour laquelle les fréquences d'identification apparaissent plus importantes pour les GD. Cette différence pourrait s'expliquer par le fait que les points GD correspondent généralement à des milieux plus fortement anthropisés. Dans les eaux souterraines, la différence de contamination entre les familles de composés est plus marquée, en particulier pour les PFAS, les composés industriels et les pharmaceutiques. Pour les pesticides et les composés domestiques les points AL et GD apparaissent assez similaires.

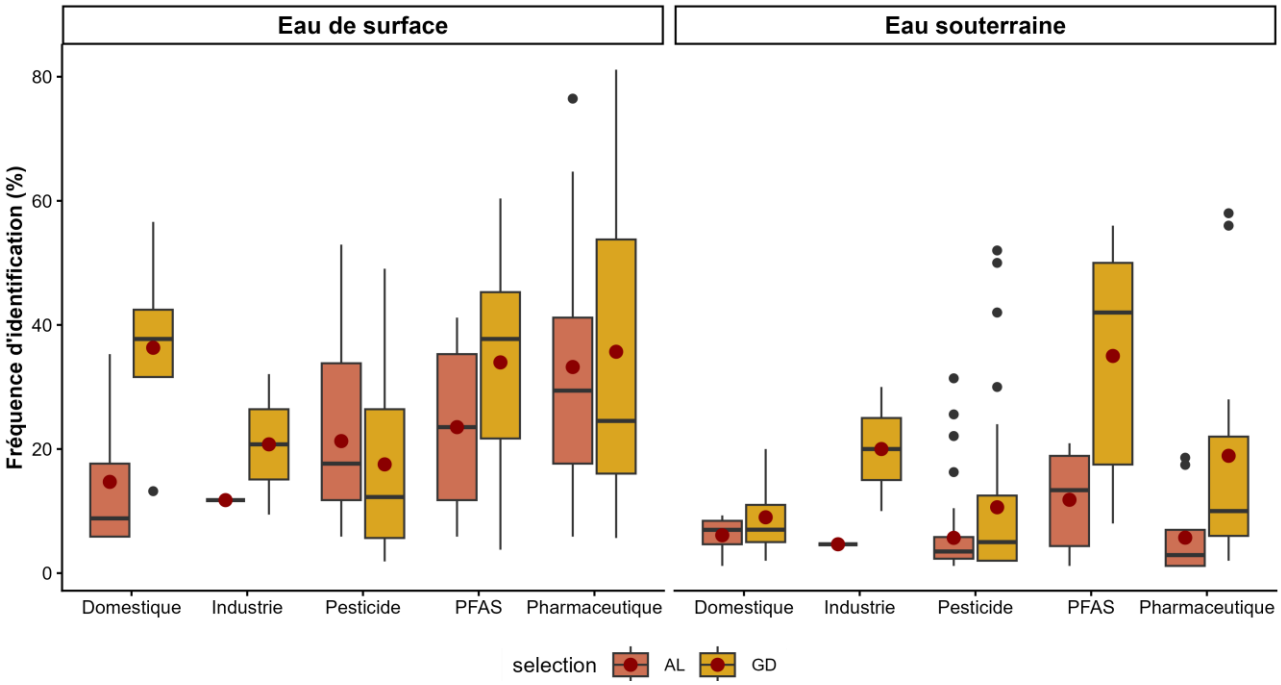


Figure 15 : Boites à moustaches du nombre de composés par intervalles de fréquence d'identification (%) et distributions des fréquences d'identification (%) par molécule et par type d'eau. ESO : eau souterraine, ESU : eau de surface.

Les composés pour lesquels des fréquences d'identification sont supérieures à 5% sont présentés en figure 16. Dans trois cas, des couples d'isomères ont été identifiés. Il s'agit du 2-hydroxypropazine et du 2-hydroxyterbuthylazine, du 4-méthylbenzotriazole et du 5-méthylbenzotriazole ainsi que de la propazine et de la sebuthylazine. Pour ces trois cas, les composés n'ont pu être séparés par la méthode chromatographique, et ont donc les mêmes temps de rétention. De plus, le nombre de fragments spécifiques s'est révélé insuffisant pour les discriminer. En cas de besoin, une méthode plus spécifique en cherchant à séparer ces isomères pourrait être développée en intégrant si possible des fragments discriminants.

Les composés ayant les fréquences d'identification les plus élevées (>15%) proviennent des 5 classes d'usage/classes chimiques, 11 d'entre eux ont des fréquences supérieures à 30%. Il s'agit du couple 2-hydroxy-propazine/terbuthylazine, de l'atrazine (33%) et de ces deux métabolites désethylatrazine (35,4%) et 2-hydroxyatrazine (34%), du lamotrigine (45,1%), du tramadol (35%), de la carbamazépine (43,2%), de l'irbesartan (34%) ainsi que du PFHxS (41,3%), du PFOS (34%) et du PFBS (31,6%). Les pesticides identifiés concernent à la fois des SA interdites et autorisées. 26 métabolites de pesticides ont été identifiés sur les 59 pesticides identifiés lors de cette campagne. Les résultats des pesticides les plus identifiés sont cohérents avec les bilans du contrôle sanitaire des eaux (Base SISE-eaux) et ceux de la campagne nationale de 2023 (Anses 2023). Pour les produits pharmaceutiques (molécules actives), certaines classes thérapeutiques à usage courant sont fréquemment identifiées : les sartans (irbesartan, telmisartan, losartan), des bêtabloquants (aténolol, acébutolol, propanolol et sotalol), des antihistaminiques (cétirizine, fexofenadine), des anti-inflammatoires non stéroïdiens (kétoprofène, acide niflumique). Les fréquences d'identification relevées sont à mettre en perspective des propriétés physico-chimiques des molécules et des quantités prescrites et consommées en France (Open-medic 2024). Les composés cétirizine, ketoprofène, oxazépam, tramadol et venlafaxine font partie des 50 molécules les plus vendues sur la base du nombre de boites délivrées en 2024, alors que l'irbesartan et la lamotrigine sont classés dans les rangs 50-100 (Open-medic 2024 – ACT5). Ces données n'expliquent pas entièrement les fréquences d'identification observées et peuvent être liées aux propriétés physico-chimiques intrinsèques des composés, et notamment la persistance dans les milieux. Le sucralose, identifié dans 25,7% des eaux brutes, est un édulcorant largement utilisé comme additif dans des produits transformés et disponibles directement à la vente. Les autres composés domestiques fréquemment identifiés sont la caféine (16,5%), et la théobromine (14,1%). La théobromine est un composant du cacao, du chocolat ainsi qu'un métabolite minoritaire de la caféine. Concernant les molécules industrielles, la 1H-benzotriazole a été identifiée dans 6,8% des eaux brutes. Elle est couramment employée dans de multiples usages, tels que : additif anticorrosif dans les liquides de refroidissement, antigivrant et fluides hydrauliques, agent de formulation de détergents, photo stabilisant ou encore intermédiaire de réaction. De même, les 4 et 5-méthylbenzotriazole sont utilisés pour le même type d'application et sont en outre des produits de transformation du 1H-benzotriazole.

La plupart des composés identifiés ne sont pas des molécules émergentes inconnues et ont déjà fait l'objet de campagnes nationales (Anses 2011a, 2023, 2025, 2026), ou de surveillance prospective (Base ADES, Naïades). Toutefois, certains composés sont à souligner, car ils sont peu ou pas recherchés à ce jour et ne bénéficient pas de données de surveillance élargies. Il s'agit par exemple d'un métabolite du S-métolachlore, le SYN542490, des pharmaceutiques lamotrigine, cétirizine et fexofénadine, des produits industriels 4 et 5-méthylbenzotriazole, 2-(4-Diethylamino-2-hydroxybenzoyl)benzoic acid et du sucralose.

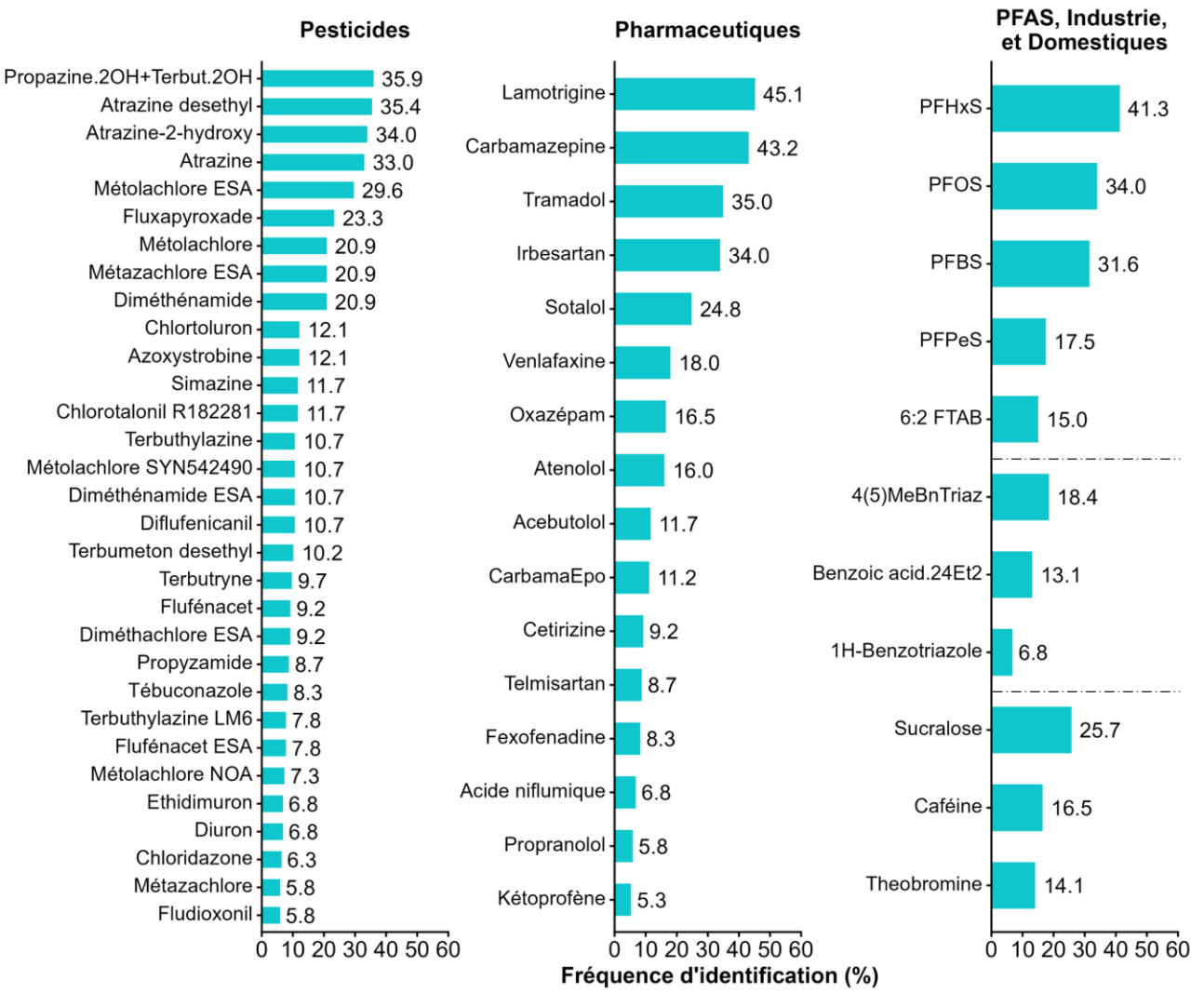


Figure 16 : Fréquence d'identification supérieure à 5%, des composés identifiés dans les eaux brutes par usage et selon le niveau de confiance. Benzoic.24Et2 : 2-(4-Diethylamino-2-hydroxybenzoyl)benzoic acid, 4(5)MeBnTriaz : 4 (ou 5)-methyl-1H-benzotriazole.

Pour chaque composé, les fréquences d'identification ont été comparées selon la nature de la ressource d'eau brute : eau souterraine ou eau de surface (figures 17 à 19).

Les quatre molécules dites domestiques ont une fréquence d'identification plus élevée dans les eaux de surface que dans les eaux souterraines (de 11% à 51% contre 1% à 12% respectivement). Cette observation pourrait s'expliquer par le contact direct des eaux de surface avec des sources de pollution continues et diffuses, via les rejets de stations d'épuration et les ruissellements urbains. Pour les PFAS, la distribution entre eaux souterraines et eaux de surface est moins tranchée, le PFPeS, et le PFHpS sont plus souvent observés dans les eaux souterraines. Le 1H-benzotriazole et le 4 ou 5-methylbenzotriazole ont une répartition équilibrée entre les deux ressources en eaux. Le 2-(4-Diethylamino-2-hydroxybenzoyl)benzoic acid (Benzoic.24Et2) est très majoritairement identifié dans les eaux de surface.

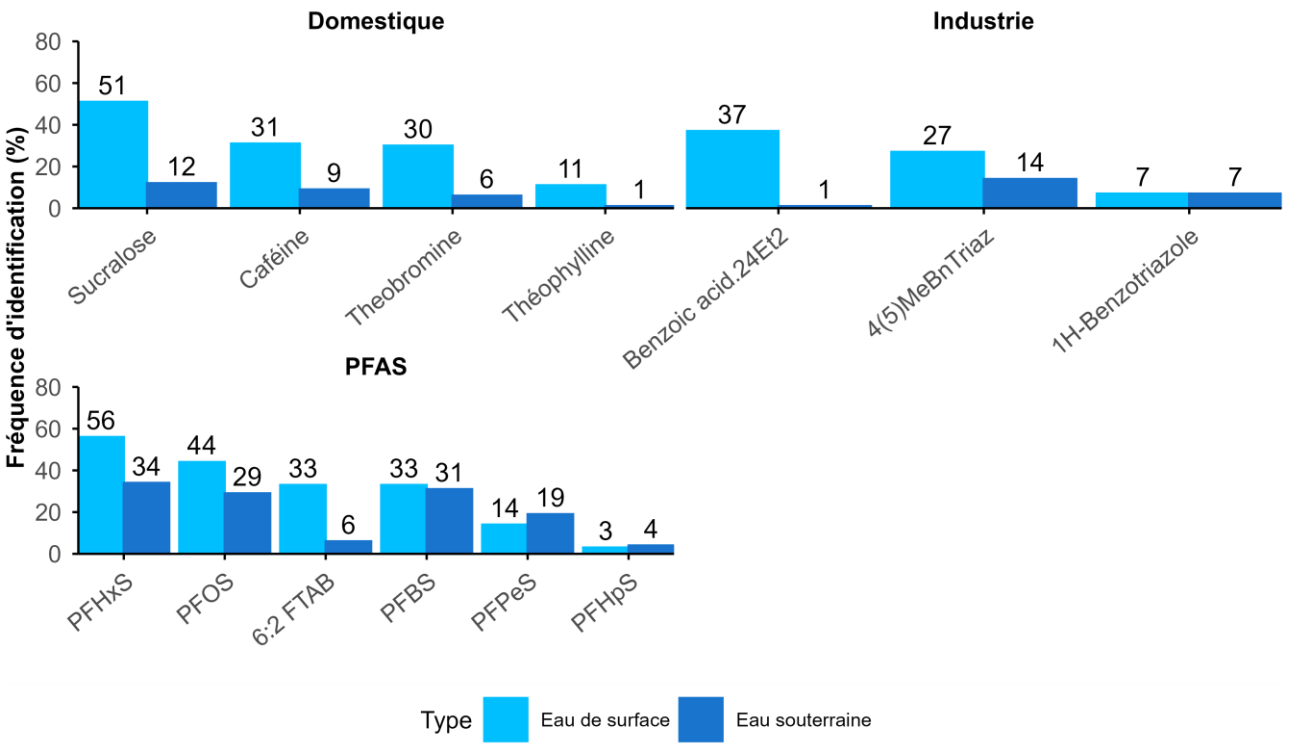


Figure 17 : Fréquence d'identification (%) par molécule et par type d'eau pour les molécules aux usages définis comme comestibles, PFAS et dans l'industrie. Benzoic.24Et2 : 2-(4-Diethylamino-2-hydroxybenzoyl)benzoic acid, 4(5)MeBnTriaz : 4 (ou 5)-methyl-1H-benzotriazole.

Concernant les pharmaceutiques, la différence entre les types d'eau est particulièrement marquée, avec une fréquence d'identification beaucoup plus importante dans les eaux de surface pour l'ensemble des molécules à l'exception de la clindamycine. Dans les eaux de surface, 10 molécules ont des fréquences supérieures à 30% et 6 au-dessus de 50% (irbesartan, sotalol, carbamazépine, tramadol, lamotrigine et venlafaxine). Dans les eaux souterraines, seules deux molécules ont une fréquence supérieure à 30% : la carbamazépine et la lamotrigine. Ces deux molécules sont toutes deux des antiépileptiques et/ou utilisées dans les troubles bipolaires, dont les structures diffèrent mais qui s'avèrent toutes deux persistantes dans les eaux. Deux métabolites de la carbamazépine ont été identifiés : carbamazépine 10,11-epoxide et 10,11-dihydroxycarbamazepine. Ces deux molécules illustrent l'intérêt de suivre la persistance des produits de dégradation comme pour d'autres familles chimiques.

Ces résultats illustrent également la vulnérabilité des eaux de surface aux rejets de médicaments. De multiples études (Anliker et al. 2022; Chaber-Jarlachowicz et al. 2025; Choubert et al. 2015; van Dijk et al. 2023) montrent l'occurrence de composés pharmaceutiques divers (anxiolytiques, antibiotiques, anti-douleurs, bétabloquants, sartans, etc…) et leur élimination incomplète par les stations d'épuration, notamment en l'absence de traitements tertiaires.

Un seul antibiotique a été identifié (clindamycine) sur les 20 contenus dans la base et donc analysables par la méthode. Ce résultat peut s'expliquer par plusieurs hypothèses : l'absence d'antibiotiques dans les échantillons, une sensibilité moindre de la méthode analytique par rapport à d'autres composés pharmaceutiques ou de plus faibles usages et rémanence moins élevée de cette famille de composés dans l'environnement. Plus globalement, une partie des antibiotiques les plus courants se dégrade rapidement dans l'environnement, et d'autres classes posent des problèmes analytiques (avis de l'Anses, saisine n° 2016-SA-0252).

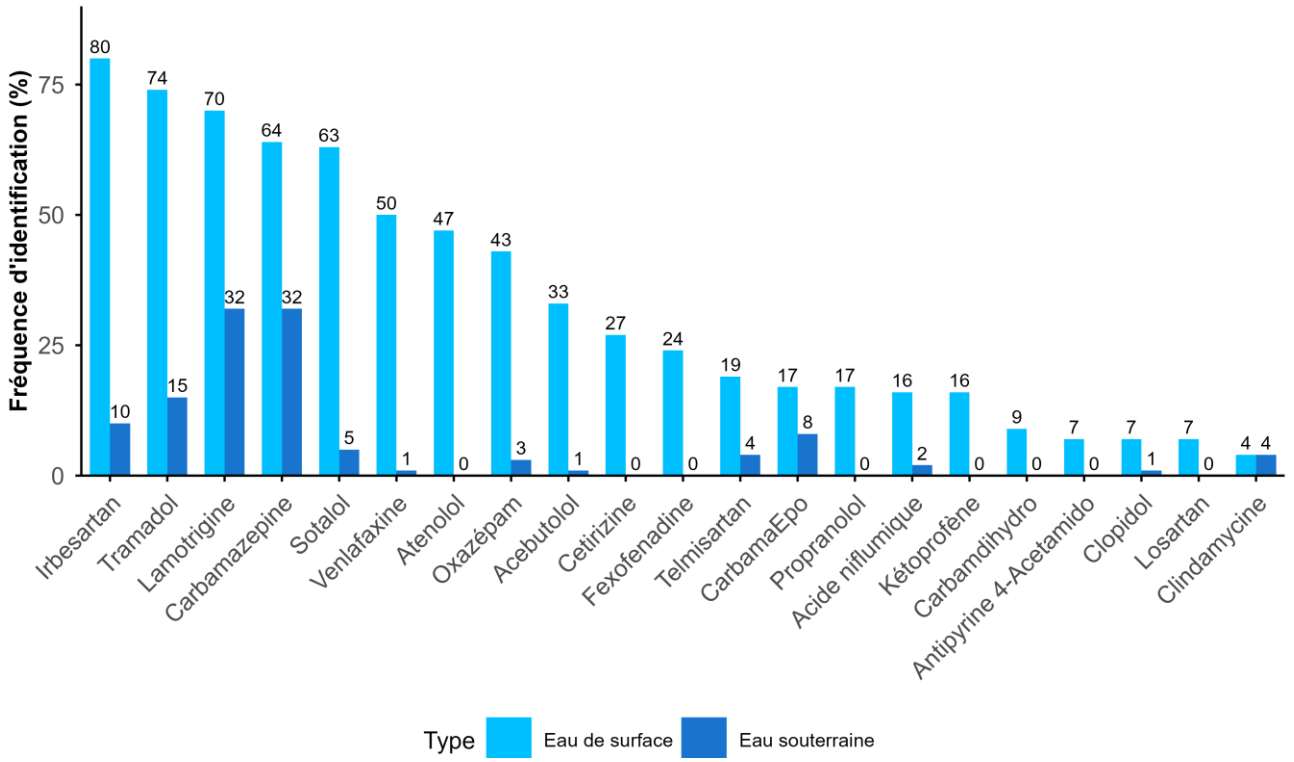


Figure 18 : Fréquence d'identification (%) par molécule et par type d'eau pour les molécules définies comme pharmaceutiques.

Pour les pesticides, les fréquences d'identification dans les eaux de surface restent majoritairement plus élevées (70%) que dans les eaux souterraines, en cohérence avec la campagne nationale de 2022 (Anses 2023). Huit composés identifiés ont été observés à des fréquences supérieures à 30%. Il s'agit du métolachlore (37,1%), métalochlore ESA (50%), fluxapyroxade (47,5%), atrazine 2-hydroxy (42,9%), désethylatrazine (38,6%), métazachlore ESA (37,1%), diméthénamide (45,7%) et du mélange isomérique propazine-2-hydroxy et/ou terbutylazine-2-hydroxy (41,4%). Certains composés sont présents exclusivement (18%) ou en majorité dans les eaux souterraines (11%). Ces cas concernent généralement des molécules interdites depuis plusieurs années. 6 pesticides dépassent les 15% de fréquence en eaux souterraines, il s'agit de l'atrazine (34,6%) et ses métabolites 2-hydroxy (29,4%) et déséthyl (35,6), du métolachlore ESA (19,1%), de la simazine (17,6%) et du duo 2-hydroxypropazine ou 2-hydroxyterbuthylazine (33,1%). Parmi les molécules ayant une fréquence >10% en ESO, 7 sur 11 sont des métabolites (64%). Ces résultats mettent également en évidence la présence d'un autre métabolite du métolachlore absent du contrôle sanitaire et non recherché lors de la campagne nationale de métabolites de pesticides : le métolachlore SYN54797, identifié à 5,7% en ESU et 4,4% en ESO. Cette molécule avait notamment été identifié dans le cadre de travaux de thèse (Marilleau), comme le SYN542490.

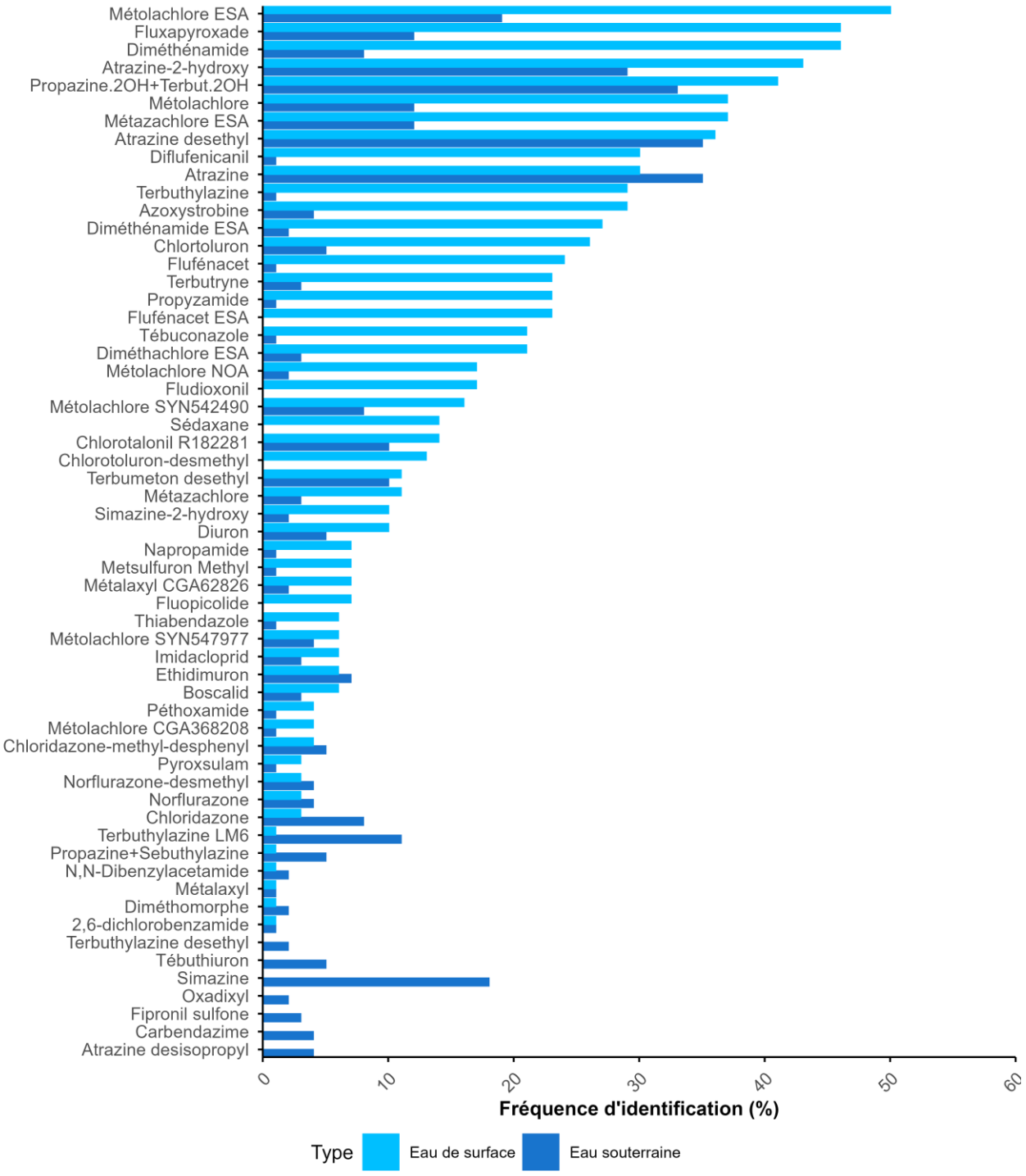


Figure 19 : Fréquence d'identification (%) par molécule et par type d'eau pour les molécules définies comme pesticides.

La répartition entre eaux de surface et eaux souterraines reste complexe à expliquer, en raison des multiples sources de contamination : rejets directs et un afflux continu dans les eaux de surfaces, ruissellement, pollutions des sols et lessivage (décharges, épandages, dépôts atmosphériques). Les mécanismes de transfert vers les eaux souterraines dépendent de nombreux facteurs : propriétés physico-chimiques, nature des sols, conditions hydriques ou encore conditions météorologiques. De plus, certaines molécules telles que les PFAS et les pesticides sont soumis à des réactions de transformation dans les sols, affectant alors la nature de la contamination des aquifères. Plusieurs études pointent le rôle de ces interactions entre eau de surface, aquifère et eau brute des molécules ciblées. (Alam et al. 2024; Baran and Gourcy 2013; Hintze et al. 2020; López-Serna et al. 2013; Sörengård et al. 2022). Les molécules identifiées ici

ne sont pas des molécules émergentes et les données collectées confirment des observations faites en ciblées (Anses 2025; aus der Beek et al. 2016; Jurado et al. 2022; Loos et al. 2010; Ng et al. 2022; Tokranov et al. 2021).

2.2.2 Eaux traitées

Dans les 202 échantillons d'eaux traitées, 79 molécules ont été identifiées au moins une fois. Parmi celles-ci :

- 53 pesticides (15 de niveau 1, 38 de niveau 2B). Soit 14% des 372 pesticides de la BDD.
- 14 pharmaceutiques (sept de niveau 1, sept de niveau 2B). Soit 16% des 89 pharmaceutiques de la BDD.
- Six PFAS (niveau 2B) correspondant à 11% des PFAS de la base.
- Quatre molécules domestiques (niveau 2B), soit 33% de la base.
- Deux composés industriels (niveau 2B), équivalent à 6% de la BDD.

Toutes ces molécules ont été également identifiées dans les eaux brutes. Au moins un composé a été identifié dans 74% des échantillons.

Les molécules ayant une fréquence d'identification >5% sont représentées dans la figure 20. L'atrazine et ses métabolites 2-hydroxy et déséthyl, le métolachlore et son métabolite (ESA), le métazachlore ESA font partie des pesticides les plus fréquemment identifiés. Concernant les pharmaceutiques, la lamotrigine (15,8%), la carbamazépine (19,3%) et son métabolite carbamazépine époxyde (5,9%) et les 2 sartans, irbesartan (14,9%) et telmisartan (8,4%) sont les molécules les plus observées. De même, les 5 PFAS majoritairement identifiés sont le PFHxS (33,2%), PFBS (31.2%), PFOS (26,7%), PFPeS (17,8%) et 6:2 FTAB (5,9%), dans le même ordre de fréquence que dans les eaux brutes.

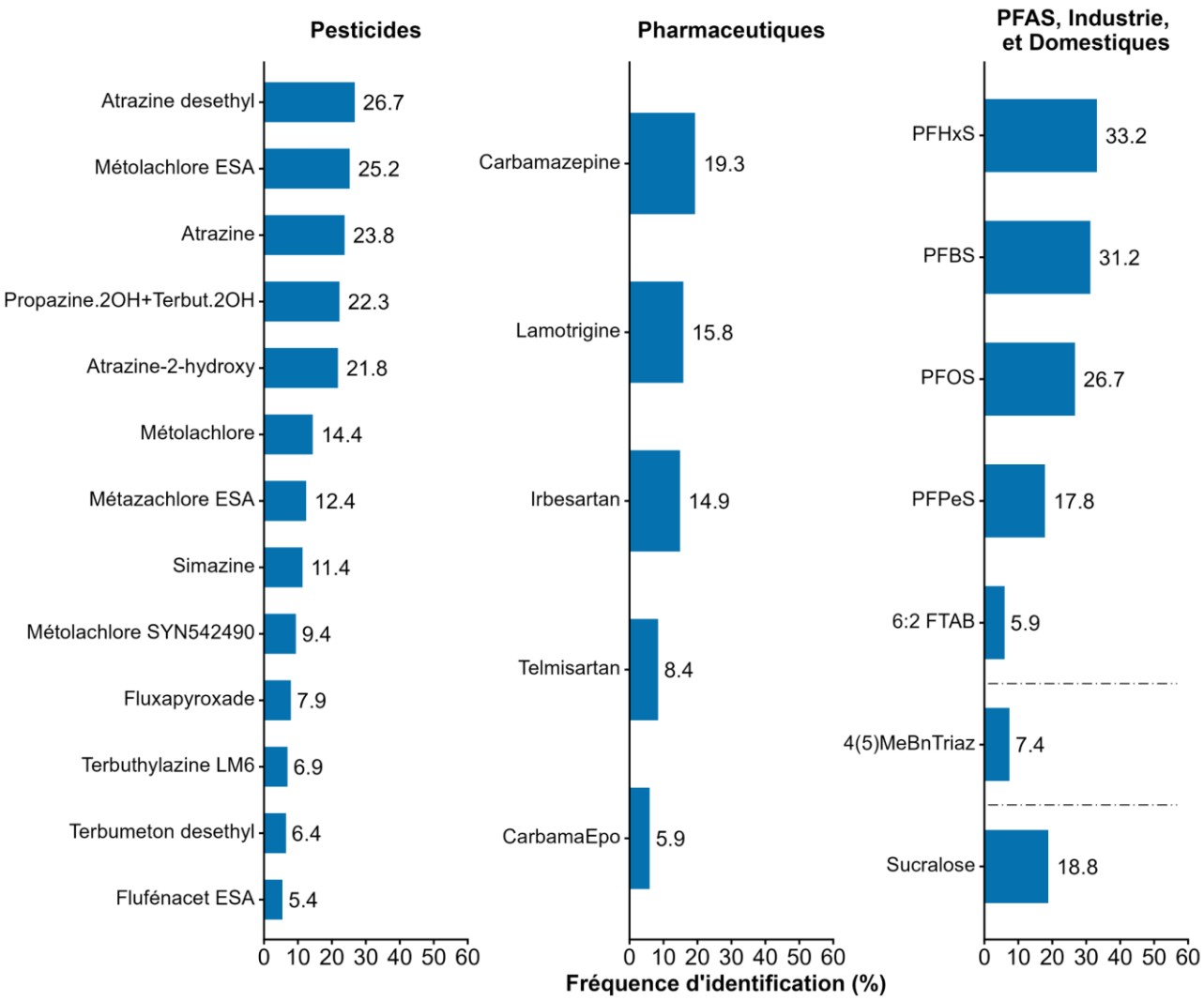


Figure 20 : Fréquence d'identification supérieure à 5%, des composés identifiés dans les eaux traitées par usage et selon le niveau de confiance.

2.2.2.1 Comparaison entre les eaux brutes et les eaux traitées

Comme illustré par la figure 21, la comparaison entre eaux brutes et eaux traitées met en évidence un nombre de composés semblable, excepté pour les pesticides et les pharmaceutiques. Entre point aléatoire et gros débit en eau traitée (figure 21), le panel de composés est équivalent, seuls les pesticides sont plus diversifiés en GD.

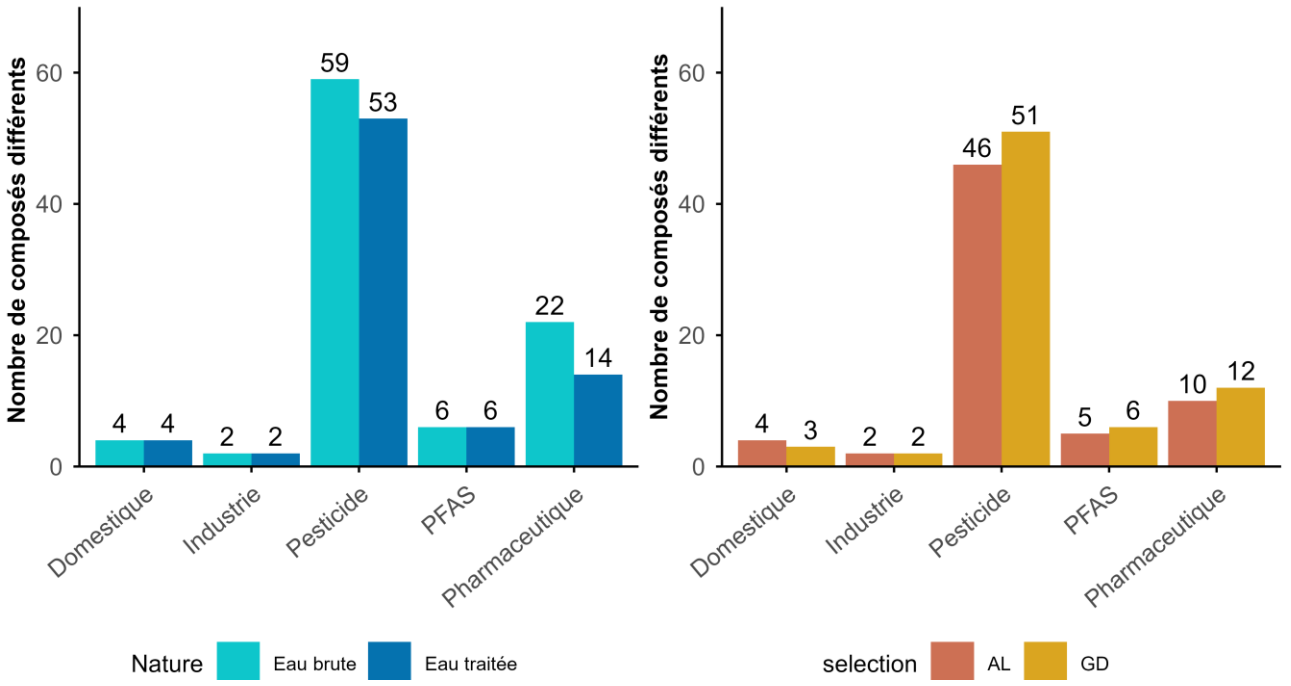


Figure 21 : Nombre de molécules distinctes par usage, selon le type d'eau (EB ou ET) ou le type de sélection (AL, GD) pour l'eau traitée.

La figure 22 appuie cette observation et montre une réduction des fréquences d'identification moyennes et médianes pour tous les composés entre eaux brutes et eaux traitées. Les pharmaceutiques et les composés domestiques présentent les écarts les plus forts, de 9,7 à 11,2% pour les moyennes et médianes. Viennent ensuite les composés industriels, tandis que les pesticides et les PFAS affichent des différences inférieures à 5%. Entre AL et GD, peu de différences sont observables pour les pesticides, au contraire des autres usages/classes chimiques dont les moyennes et médianes sont supérieures en GD.

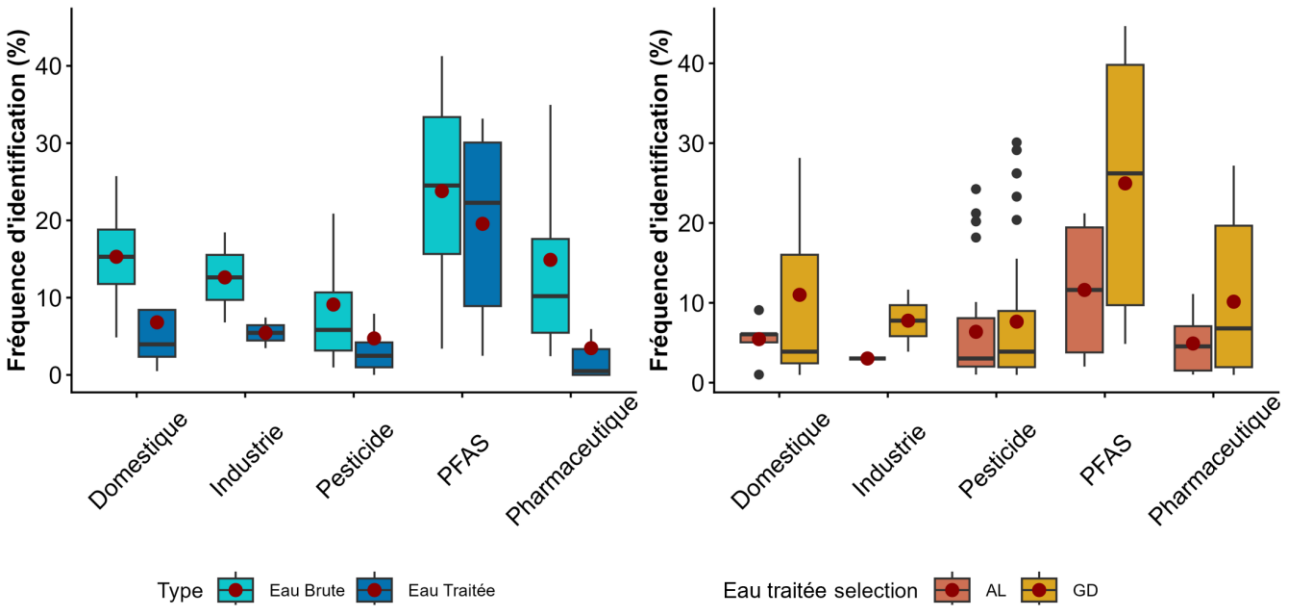


Figure 22 : Boite à moustaches des fréquences d'identification par usage et par type d'eau et boite à moustaches par type de site pour les eaux traitées. Les points rouges représentent les moyennes par usage et par type d'eau.

Pour les 202 couples eau brute / eau traitée, la proportion des composés identifiés dans les deux échantillons du couple, seulement en eau brute ou seulement en eau traitée a été calculée (figure 23). Les composés sont uniquement identifiés dans les eaux brutes pour plus de 50% des couples, à l'exception de la famille des PFAS généralement présents en eau brute et en eau traitée. Pour certains couples, des composés ne sont identifiés qu'en eaux traitées, ces cas de figures pouvant être liés à des mélanges d'eaux en amont des filières de traitement.

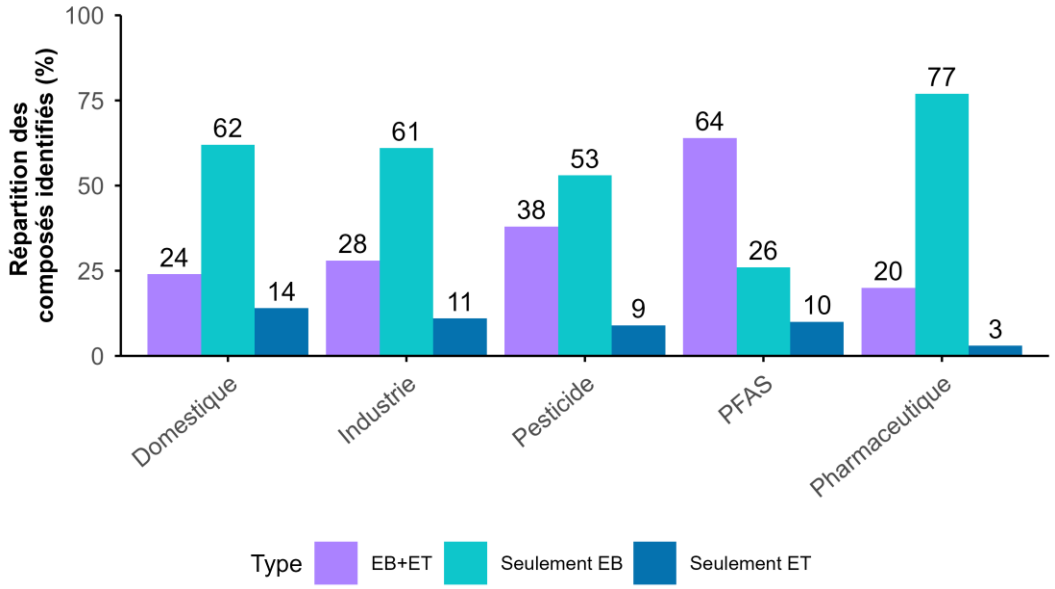


Figure 23 : Répartition des composés selon s'ils sont identifiés en EB et ET, seulement en EB ou seulement en ET.

Il est important de souligner que la seule information de présence/absence dans les eaux traitées ne suffit en aucun cas à qualifier le risque. Des données et travaux complémentaires sont nécessaires, incluant notamment le besoin de confirmer par analyses ciblées et d'acquérir des données quantitatives.

3 Conclusions

Dans le cadre de la campagne nationale 2023-2025 du LHN, une approche d'analyse non ciblée en mode suspect a été déployée pour la première fois. L'objectif de ce travail est d'une part d'évaluer la faisabilité de déployer ces nouvelles approches dans un exercice à grande échelle, d'autre part d'en discuter les avantages et les limites et *in fine* de déterminer leur plus-value à travers le déroulement d'une campagne nationale pour identifier des molécules d'intérêt de manière précoce et itérative. Ce rapport présente une première phase de l'exploitation de ces travaux qui seront complétés dans le futur.

- **S'agissant de la faisabilité de l'approche**

Une méthode d'analyse par SPE en ligne associée à la chromatographie en phase liquide couplée à la spectrométrie de masse haute résolution a été validée et mise en œuvre dans une campagne de surveillance à grande échelle : 206 eaux brutes (EB) et 202 eaux traitées (ET) échantillonnées sur une période de 12 mois en s'appuyant sur les acteurs impliqués dans le contrôle sanitaire des EDCH.

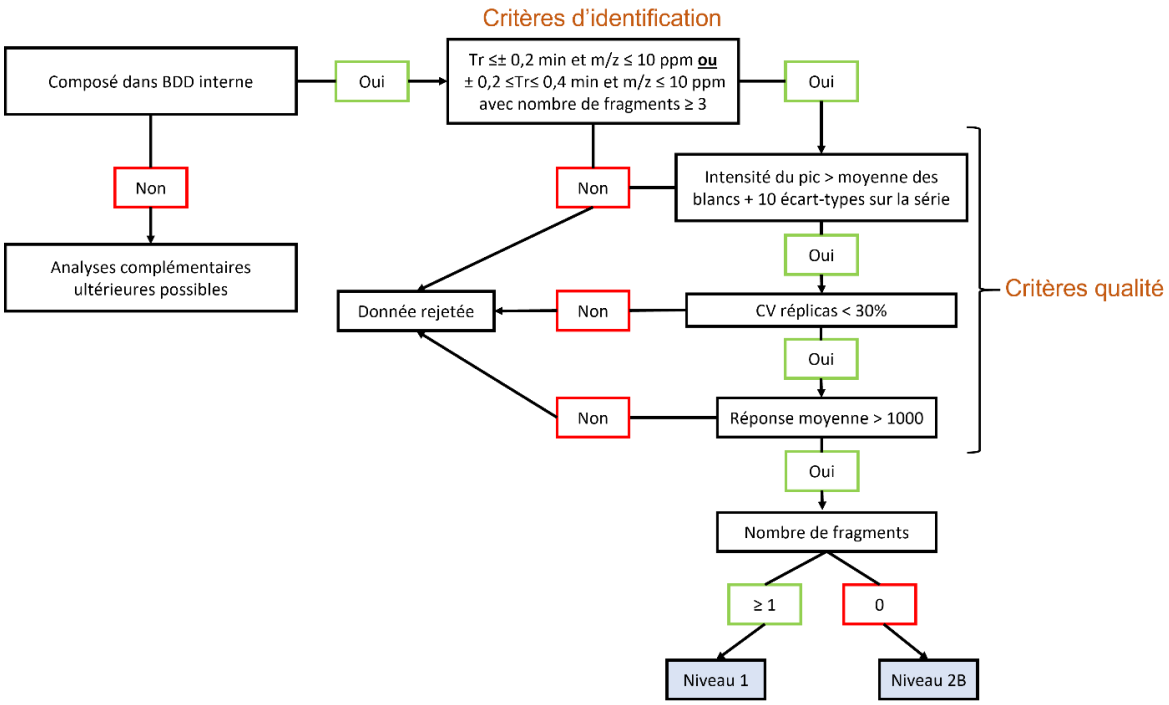
En l'absence de cadre harmonisé ou normatif, afin de s'assurer de la production et l'exploitation de résultats fiables, un cadre d'assurance qualité et de contrôle qualité exigeant a été mis en place.

L'étude des contrôles qualité a démontré la stabilité et la maitrise de la méthode sur une campagne de 12 mois représentant 37 séries analysées. Elle a également confirmé leur criticité dans la stratégie d'identification des composés.

- **S'agissant de l'enjeu de définition du cadre méthodologique**

Dans le cadre du travail présenté dans ce rapport - preuve de concept- une stratégie originale d'identification des composés a été construite et appliquée ; elle est reprise dans le logigramme ci-dessous. Elle repose sur des choix assumés i) limiter l'approche non ciblée à de l'analyse de suspect ii) restreindre l'interprétation des résultats à des données qualitatives c'est à dire l'identification de la présence non équivoque d'un composé avec un seuil de confiance élevé associé à ce niveau d'identification, iii) minimiser le risque de faux positifs.

Ainsi, le laboratoire a choisi de ne pas reporter, dans ce rapport, certaines données ou de ne pas mettre en œuvre certaines approches de traitement des données, estimant que le niveau de confiance associé n'était pas suffisant et qu'il nécessitait des travaux de consolidation.



- **S'agissant de l'amélioration des connaissances de la contamination des ressources et EDCH**

De par la cadre méthodologique - stratégie de mesure et d'identification - déployé dans cette première phase de travail, les composés identifiés ne sont pas uniquement des molécules dites émergentes ou inconnues.

Parmi les 581 composés de la base de données initiale qui constituent l'univers chimique détectable, 93 composés ont été identifiés au moins une fois dans les eaux brutes. Il s'agit de 59 pesticides, 21 pharmaceutiques, six PFAS, quatre molécules domestiques et trois composés industriels. Les fréquences d'identification sont généralement plus élevées dans les eaux de surface particulièrement pour les pharmaceutiques, les composés domestiques et certains pesticides et sont donc en cohérence avec leur plus grande vulnérabilité aux pressions anthropiques. Cependant, des fréquences d'identification plus élevées ont été observées dans les eaux souterraines notamment pour des métabolites de substances interdites et certains PFAS. Là encore ces observations sont cohérentes avec l'état de l'art et notamment les travaux qui ont pu être menés par le laboratoire dans ses précédentes campagnes.

Dans les eaux traitées, 79 composés ont été identifiés au moins une fois dont : 53 pesticides, 14 pharmaceutiques, six PFAS, quatre molécules domestiques et deux composés industriels. L'ensemble de ces molécules est commun avec les eaux brutes. Les fréquences d'identification moyennes par famille de molécules diminuent dans les eaux traitées, cette observation étant plus nuancée pour les PFAS.

Plusieurs composés, non surveillés dans le cadre du contrôle sanitaire ni lors de précédentes campagnes exploratoires ont été mis en évidence à des fréquences élevées pour la première fois. Il s'agit par exemple des métabolites du métolachlore SYN542490 et SYN547977, des composés pharmaceutiques lamotrigine, cétirizine et fexofénadine, de certains produits industriels 4 et 5-méthylbenzotriazole, 2-(4-Diethylamino-2-hydroxybenzoyl)benzoic acid et du sucralose.

Il est majeur de souligner que les informations qualitatives qui résultent de cette campagne exploratoire ne permettent pas de caractériser le danger ou de préjuger des risques sanitaires associés aux substances dont la présence a ainsi été identifiée.

Ces premiers résultats confortent le LHN dans la pertinence d'intégrer les approches d'analyse non ciblée à sa stratégie globale d'amélioration des connaissances de la contamination des ressources et EDCH, en complémentarité des approches ciblées. Les approches non ciblées ou suspect apparaissent comme extrêmement pertinentes pour identifier des signaux de manière précoce. En l'absence de cadre normalisé, l'exigence méthodologique et la rigueur scientifique inhérentes à leur bonne mise en œuvre et à l'interprétation des données générées nécessitent un degré d'expertise avancé, difficilement compatible avec leur déploiement dans la surveillance de routine. Par ailleurs l'absence d'information quantitative constitue une impossibilité à une exploitation directe des résultats en terme de conformité pour les substances faisant l'objet de limites réglementaires.

Perspectives

- **S'agissant de la poursuite de l'exploitation des empreintes chimiques de la campagne**

L'exploitation des empreintes chimiques va se poursuivre. Des signaux inconnus ou avec des niveaux de confiance insuffisants (>2B) et donc non présentés dans ce rapport dont la fréquence est significative seront investigués de manière rétrospective en mobilisant d'une part la base de données interne du laboratoire, qui est toujours en évolution, et d'autre part des bases de données externes. En parallèle, des approches de quantification pourraient être développées à titre exploratoire afin de préciser les niveaux d'occurrence en vue de soutenir des démarches de priorisation et de préparer de futurs travaux de campagne de surveillance, grâce notamment à l'exploitation des signaux des traceurs internes. Cet axe de développement apparait particulièrement important au regard de la diversité des sensibilités observées pour les différentes molécules qui sont susceptibles d'affecter les fréquences d'identification mises en évidence. L'enrichissement de la base de données interne et l'intégration de nouveaux standards analytiques, issus notamment de signaux faibles ou sur une base bibliographique permettra d'acquérir de premières informations en retraitant les données brutes de la campagne nationale avant le lancement de travaux complémentaires. Enfin des approches de comparaison d'empreintes chimiques des couples eaux brutes-eaux traitées pourraient être investiguées afin de faire émerger des sous-produits de traitement ou métabolites.

- **S'agissant de la poursuite des développements méthodologiques par analyses non ciblées**

En capitalisant sur les retours d'expériences de cette campagne et les échanges au sein des réseaux experts, le LHN - s'inscrivant dans un processus continu d'amélioration de la fiabilité des résultats et de comparabilité des données- va poursuivre ses développements méthodologiques : d'une part sur le plan analytique en développant des approches analytiques permettant d'étendre ses capacités de détection vers des composés mobiles et plus polaires, d'autre part en consolidant le cadre d'assurance qualité et de contrôle qualité à déployer dans la mise en œuvre et enfin en améliorant ses pipelines de traitement des données.

Au sein de l'Anses, des travaux sont engagés pour faciliter la reconnaissance de ces nouvelles approches, leur interopérabilité dans un objectif de pouvoir améliorer la fiabilité des données produites au service d'une part d'une meilleure caractérisation des exposomes et d'autre part de l'identification précoce des signaux sanitaires d'intérêt dans une approche de santé globale.

A l'extérieur, le laboratoire pourra partager son retour d'expérience au sein de groupes experts nationaux et internationaux notamment dans le cadre des travaux de normalisation et harmonisation qui sont engagés.

- **S'agissant de la poursuite de l'acquisition de connaissances**

En exploitant les résultats de cette campagne et en capitalisant sur les futurs développements qu'il engage, le LHN en lien avec la Direction générale de la santé et la direction de l'évaluation des risques de l'Anses pourra définir le cadre d'une future campagne d'analyse de l'occurrence de composés émergents dans les ressources et EDCH en déployant comme il l'a fait en 2023-2025 une double approche : analyse ciblée quantitative sur une liste socle de composés d'intérêt et analyse non ciblée pour acquérir de nouvelles empreintes chimiques.

Date de validation du rapport : Mars 2026

4 Bibliographie

4.1 Publications

Alam, Md Shahin, Alireza Abbasi, and Gang Chen. 2024. "Fate, distribution, and transport dynamics of Per- and Polyfluoroalkyl Substances (PFASs) in the environment." *Journal of Environmental Management* 371. https://doi.org/10.1016/j.jenvman.2024.123163

Anliker, Sabine, Sergio Santiago, Kathrin Fenner, and Heinz Singer. 2022. "Large-scale assessment of organic contaminant emissions from chemical and pharmaceutical manufacturing into Swiss surface waters." *Water Research* 215. https://doi.org/10.1016/j.watres.2022.118221

Anses. (2011a). Rapport sur la campagne nationale d'occurrence des composés alkyls perfluorés dans les eaux destinées à la consommation humaine. Anses. Maisons-Alfort, 120 p.

Anses. (2011b). Rapport sur la campagne nationale d'occurrence des résidus de médicaments dans les eaux destinées à la consommation humaine -Ressources en eaux brutes et eaux traitées. Anses. Maisons-Alfort, 36 p.

Anses. (2013). Rapport sur la campagne nationale d'occurrence de polluants émergents dans les eaux destinées à la consommation humaine : Perchlorates et Nitrosamines. Anses. Maisons-Alfort, 56 p. .

Anses. (2018). Rapport de l'Anses relatif à une Campagne nationale de mesures de l'occurrence de polluants émergents dans les eaux destinées à la consommation humaine (haloacétonitriles, trihalométhanes iodés, halocétones, chloropicrine, alkylphénols, bisphénols). Anses. Maisons-Alfort, 72 p.

Anses. (2019). Rapport de l'Anses relatif à des campagnes nationales de mesures de l'occurrence de chrome hexavalent et chrome total dans les eaux destinées à la consommation humaine. Anses. Maisons-Alfort, 41 p.

Anses. (2020). Rapport révisé de l'Anses relatif à la Campagne nationale de mesures de l'occurrence de composés émergents dans les eaux destinées à la consommation humaine : acides haloacétiques – chlorates – phtalates - Rouxiella chamberiensis, campagne 2016-2017. Anses. Maisons-Alfort, 52 p.

Anses. (2023). Rapport de l'Anses relatif à la campagne nationale de mesure de l'occurrence de composés émergents dans les eaux destinées à la consommation humaine - Pesticides et métabolites de pesticides - Résidus d'explosifs - 1,4-dioxane - Campagne 2020-2022. Anses. Maisons-Alfort, 85 p.

Anses. (2025). Campagne nationale de mesure de l'occurrence de composés émergents dans les eaux destinées à la consommation humaine - PFAS et US-PFAS Anses. Maisons-Alfort, 60 p.

Anses. (2026). Rapport AST - Campagne nationale de mesure de l'occurrence de composés émergents dans les eaux destinées à la consommation humaine - Pesticides dans le cadre de l'étude EAT3 - Campagne 2024-2025. Anses. Maisons-Alfort, 44 p.

aus der Beek, Tim, Frank-Andreas Weber, Axel Bergmann, Silke Hickmann, Ina Ebert, Arne Hein, and Anette Küster. 2016. "Pharmaceuticals in the environment—Global occurrences and perspectives." *Environmental Toxicology and Chemistry* 35 (4). https://doi.org/10.1002/etc.3339

Baran, Nicole, and Laurence Gourcy. 2013. "Sorption and mineralization of S-metolachlor and its ionic metabolites in soils and vadose zone solids: Consequences on groundwater quality in an alluvial aquifer (Ain Plain, France)." *Journal of Contaminant Hydrology* 154. https://doi.org/10.1016/j.jconhyd.2013.07.009

Bijlsma, Lubertus, Elena Pitarch, Eddie Fonseca, María Ibáñez, Ana María Botero, Javier Claros, Laura Pastor, and Félix Hernández. 2021. "Investigation of pharmaceuticals in a conventional wastewater treatment plant: Removal efficiency, seasonal variation and impact of a nearby hospital." *Journal of Environmental Chemical Engineering* 9 (4). https://doi.org/10.1016/j.jece.2021.105548

Black, Gabrielle, Charles Lowe, Tarun Anumol, Jessica Bade, Kristin Favela, Yong-Lai Feng, Ann Knolhoff, Andrew McEachran, Jamie Nuñez, Christine Fisher, Kathy Peter, Natalia Soares Quinete, Jon Sobus, Eric Sussman, William Watson, Samanthi Wickramasekara, Antony Williams, and Tom Young. 2023. "Exploring chemical space in non-targeted analysis: a proposed ChemSpace tool." *Analytical and Bioanalytical Chemistry* 415 (1). https://doi.org/10.1007/s00216-022-04434-4

Chaber-Jarlachowicz, Paulina, Barbara Gworek, and Radosław Kalinowski. 2025. "Removal efficiency of pharmaceuticals during the wastewater treatment process: Emission and environmental risk assessment." *PLOS ONE* 20 (9). https://doi.org/10.1371/journal.pone.0331211

Chiffre, Axelle, François Degiorgi, Audrey Buleté, Loïc Spinner, and Pierre-Marie Badot. 2016. "Occurrence of pharmaceuticals in WWTP effluents and their impact in a karstic rural catchment of Eastern France." *Environmental Science and Pollution Research* 23 (24). https://doi.org/10.1007/s11356-016-7751-5

Choubert, J. M., C. Crétollier, A. Tahar, H. Budzinski, M. Esperanza, L. Dherret, K. Le Ménach, N. Noyon, Cecile Miege, and Marina Coquery. 2015. "Quels micropolluants peut-on éliminer par les procédés extensifs de traitement des eaux usées domestiques ?" *TSM. Techniques Sciences Méthodes – Génie urbain, génie rural* (3). https://doi.org/10.1051/tsm/201503051

Ciccarelli, Davide, Saer Samanipour, Helena Rapp-Wright, Stefan Bieber, Thomas Letzel, Jake W. O'Brien, Tim Marczylo, Timothy W. Gant, Paolo Vineis, and Leon P. Barron. 2025. "Bridging knowledge gaps in human chemical exposure via drinking water with non-target screening." *Critical Reviews in Environmental Science and Technology* 55 (3). https://doi.org/10.1080/10643389.2024.2396690

Hintze, Simone, Gaétan Glauser, and Daniel Hunkeler. 2020. "Influence of surface water – groundwater interactions on the spatial distribution of pesticide metabolites in groundwater." *Science of The Total Environment* 733. https://doi.org/10.1016/j.scitotenv.2020.139109

Hollender, Juliane, Emma L. Schymanski, Lutz Ahrens, Nikiforos Alygizakis, Frederic Béen, Lubertus Bijlsma, Andrea M. Brunner, Alberto Celma, Aurelie Fildier, Qiuguo Fu, Pablo Gago-Ferrero, Ruben Gil-Solsona, Peter Haglund, Martin Hansen, Sarit Kaserzon, Anneli Kruve, Marja Lamoree, Christelle Margoum, Jeroen Meijer, Sylvain Merel, Cassandra Rauert, Pawel Rostkowski, Saer Samanipour, Bastian Schulze, Tobias Schulze, Randolph R. Singh, Jaroslav Slobodnik, Teresa Steininger-Mairinger, Nikolaos S. Thomaidis, Anne Togola, Katrin Vorkamp, Emmanuelle Vulliet, Linyan Zhu, and Martin Krauss. 2023. "NORMAN guidance on suspect and non-target screening in environmental monitoring." *Environmental Sciences Europe* 35 (1). https://doi.org/10.1186/s12302-023-00779-4

Jurado, Anna, Estanislao Pujades, Marc Walther, and M. Silvia Diaz-Cruz. 2022. "Occurrence, fate, and risk of the organic pollutants of the surface water watch List in European groundwaters: a review." *Environmental Chemistry Letters* 20 (5). https://doi.org/10.1007/s10311-022-01441-w

Loos, Robert, Raquel Carvalho, Diana C. António, Sara Comero, Giovanni Locoro, Simona Tavazzi, Bruno Paracchini, Michela Ghiani, Teresa Lettieri, Ludek Blaha, Barbora Jarosova, Stefan Voorspoels, Kelly Servaes, Peter Haglund, Jerker Fick, Richard H. Lindberg, David Schwesig, and Bernd M. Gawlik. 2013. "EU-wide monitoring survey on emerging polar organic contaminants in wastewater treatment plant effluents." *Water Research* 47 (17). https://doi.org/10.1016/j.watres.2013.08.024

Loos, Robert, Giovanni Locoro, Sara Comero, Serafino Contini, David Schwesig, Friedrich Werres, Peter Balsaa, Oliver Gans, Stefan Weiss, Ludek Blaha, Monica Bolchi, and Bernd Manfred Gawlik. 2010. "Pan-European survey on the occurrence of selected polar organic persistent

pollutants in ground water." *Water Research* 44 (14). https://doi.org/10.1016/j.watres.2010.05.032

Lopez-Herguedas, N., B. González-Gaya, N. Castelblanco-Boyacá, A. Rico, N. Etxebarria, M. Olivares, A. Prieto, and O. Zuloaga. 2022. "Characterization of the contamination fingerprint of wastewater treatment plant effluents in the Henares River Basin (central Spain) based on target and suspect screening analysis." *Science of The Total Environment* 806. https://doi.org/10.1016/j.scitotenv.2021.151262

López-Serna, Rebeca, Anna Jurado, Enric Vázquez-Suñé, Jesus Carrera, Mira Petrović, and Damià Barceló. 2013. "Occurrence of 95 pharmaceuticals and transformation products in urban groundwaters underlying the metropolis of Barcelona, Spain." *Environmental Pollution* 174. https://doi.org/10.1016/j.envpol.2012.11.022

Manz, Katherine E., Anna Feerick, Joseph M. Braun, Yong-Lai Feng, Amber Hall, Jeremy Koelmel, Carlos Manzano, Seth R. Newton, Kurt D. Pennell, Benjamin J. Place, Krystal J. Godri Pollitt, Carsten Prasse, and Joshua A. Young. 2023. "Non-targeted analysis (NTA) and suspect screening analysis (SSA): a review of examining the chemical exposome." *Journal of Exposure Science & Environmental Epidemiology* 33 (4). https://doi.org/10.1038/s41370-023-00574-6

Martínez-Alcalá, Isabel, José Manuel Guillén-Navarro, and Agustin Lahora. 2021. "Occurrence and fate of pharmaceuticals in a wastewater treatment plant from southeast of Spain and risk assessment." *Journal of Environmental Management* 279. https://doi.org/10.1016/j.jenvman.2020.111565

Merel, S., T. Ducrocq, and C. Miège. (2023). Retour d'expérience sur l'essai inter-laboratoire Norman de 2019 couplant l'échantillonnage passif à l'analyse non ciblée. Paris: Aquaref, 37 p.

Newton, Seth R., Rebecca L. McMahen, Jon R. Sobus, Kamel Mansouri, Antony J. Williams, Andrew D. McEachran, and Mark J. Strynar. 2018. "Suspect screening and non-targeted analysis of drinking water using point-of-use filters." *Environmental Pollution* 234. https://doi.org/10.1016/j.envpol.2017.11.033

Ng, Kelsey, Nikiforos Alygizakis, Andreas Androulakakis, Aikaterini Galani, Reza Aalizadeh, Nikolaos S. Thomaidis, and Jaroslav Slobodnik. 2022. "Target and suspect screening of 4777 per- and polyfluoroalkyl substances (PFAS) in river water, wastewater, groundwater and biota samples in the Danube River Basin." *Journal of Hazardous Materials* 436. https://doi.org/10.1016/j.jhazmat.2022.129276

Nika, Maria-Christina, Nikiforos Alygizakis, Olga S. Arvaniti, and Nikolaos S. Thomaidis. 2023. "Non-target screening of emerging contaminants in landfills: A review." *Current Opinion in Environmental Science & Health* 32. https://doi.org/10.1016/j.coesh.2022.100430

Orlando-Véliz, Dana, Rocío Inés Bonansea, Manuel García-Vara, Varvara Nikolopoulou, and Miren López de Alda. 2025. "Evaluation of Three Sample Preparation Methods for LC-HRMS Suspect Screening of Contaminants of Emerging Concern in Effluent Wastewater." *Analytical Chemistry* 97 (47). https://doi.org/10.1021/acs.analchem.5c01659

Schulz, Wolfgang. (2019). Use of non-target screening by means of LC-ESI-HRMS in water analysis. Mülheim an der Ruhr (Germany): Water Chemistry Society, 73 p.

Schymanski, Emma L., Junho Jeon, Rebekka Gulde, Kathrin Fenner, Matthias Ruff, Heinz P. Singer, and Juliane Hollender. 2014. "Identifying Small Molecules via High Resolution Mass Spectrometry: Communicating Confidence." *Environmental Science & Technology* 48 (4). https://doi.org/10.1021/es5002105

Schymanski, Emma L., Heinz P. Singer, Jaroslav Slobodnik, Ildiko M. Ipolyi, Peter Oswald, Martin Krauss, Tobias Schulze, Peter Haglund, Thomas Letzel, Sylvia Grosse, Nikolaos S. Thomaidis, Anna Bletsou, Christian Zwiener, María Ibáñez, Tania Portolés, Ronald de Boer, Malcolm J. Reid, Matthias Onghena, Uwe Kunkel, Wolfgang Schulz, Amélie Guillon, Naïke Noyon, Gaëla Leroy, Philippe Bados, Sara Bogialli, Draženka Stipaničev, Pawel Rostkowski, and Juliane Hollender. 2015. "Non-target screening with high-resolution mass

spectrometry: critical review using a collaborative trial on water analysis." *Analytical and Bioanalytical Chemistry* 407 (21). https://doi.org/10.1007/s00216-015-8681-7

Sörengård, Mattias, Sofia Bergström, Philip McCleaf, Karin Wiberg, and Lutz Ahrens. 2022. "Long-distance transport of per- and polyfluoroalkyl substances (PFAS) in a Swedish drinking water aquifer." *Environmental Pollution* 311. https://doi.org/10.1016/j.envpol.2022.119981

Soulier, Coralie, Virginie Boiteux, Patrick Candido, Emilie Caupos, Mathilde Chachignon, Guillaume Couturier, Xavier Dauchy, Marie-Hélène Devier, Mar Esperanza, Aurélie Fildier, Caroline Gardia-Parege, Robin Guibal, Julien Le Roux, Gaëla Leroy, François Lestremau, Sophie Lissalde, Naike Noyon, Anne Piram, Emmanuelle Vulliet, and Christelle Margoum. 2021. "La spectrométrie de masse haute résolution pour la recherche de micropolluants organiques dans l'environnement." *Techniques Sciences Méthodes – Génie urbain, génie rural* (6). https://doi.org/10.36904/tsm/202106043

Tisler, Selina, Kristoffer Kilpinen, Jason Devers, Mafalda Castro, Mathias B. Jørgensen, Geeta Mandava, Johan Lundqvist, Nina Cedergreen, and Jan H. Christensen. 2025. "Mapping Emerging Contaminants in Wastewater Effluents through Multichromatographic Platform Analysis and Source Correlations." *Environmental Science & Technology* 59 (11). https://doi.org/10.1021/acs.est.5c01139

Togola, A., C. Guillemain, F. Lestremau, C. Coureau, C. Margoum, and C. Soulier. (2020). Applicabilité de la technique de "screening non ciblé" pour la surveillance prospective. Rapport final. Paris: BRGM, 118 p.

Togola, A., S. Lardy-Fontan, C. Soulier, C. Margoum, C. Guillemain, and F. Lestremau. (2022). Critères QA/QC pour le traitement suspect d'analyses non ciblées : note de recommandations. Paris: Aquaref, 24 p.

Togola, A., F. Lestremeau, C. Coureau, and C. Soulier. (2020). Acquisition des données de screening environnemental dans le cadre du réseau de surveillance prospective. Paris: Aquaref, 29 p.

Tokranov, Andrea K., Denis R. LeBlanc, Heidi M. Pickard, Bridger J. Ruyle, Larry B. Barber, Robert B. Hull, Elsie M. Sunderland, and Chad D. Vecitis. 2021. "Surface-water/groundwater boundaries affect seasonal PFAS concentrations and PFAA precursor transformations." *Environmental Science: Processes & Impacts* 23 (12). https://doi.org/10.1039/D1EM00329A

Ulvi, Arzu, Senar Aydın, and Mehmet Emin Aydın. 2022. "Fate of selected pharmaceuticals in hospital and municipal wastewater effluent: occurrence, removal, and environmental risk assessment." *Environmental Science and Pollution Research* 29 (50). https://doi.org/10.1007/s11356-022-21131-y

van Dijk, Joanke, Stefan C. Dekker, Stefan A. E. Kools, and Annemarie P. van Wezel. 2023. "European-wide spatial analysis of sewage treatment plants and the possible benefits to nature of advanced treatment to reduce pharmaceutical emissions." *Water Research* 241. https://doi.org/10.1016/j.watres.2023.120157

Wickham, Hadley, Mara Averick, Jennifer Bryan, Winston Chang, Lucy D'Agostino McGowan, Romain François, Garrett Grolemund, Alex Hayes, Lionel Henry, and Jim Hester. 2019. "Welcome to the Tidyverse." Journal of open source software 4 (43). https://doi.org/10.21105/joss.01686

Wiest, Laure, Teofana Chonova, Alexandre Bergé, Robert Baudot, Frédérique Bessueille-Barbier, Linda Ayouni-Derouiche, and Emmanuelle Vulliet. 2018. "Two-year survey of specific hospital wastewater treatment and its impact on pharmaceutical discharges." *Environmental Science and Pollution Research* 25 (10). https://doi.org/10.1007/s11356-017-9662-5

4.2 Autres ressources

Naïdes : données sur la qualité des eaux de surface. Consulté le 5 mars 2026. https://naiades.eaufrance.fr/acces-donnees#/physicochimie

Ades, eaufrance : Portail national d'accès aux données sur les eaux souterraines. Consulté le 5 mars 2026. https://ades.eaufrance.fr/

R Core Team (2025). R: A Language and Environment for Statistical Computing. R Foundation for Statistical Computing, Vienna, Austria. https://www.R-project.org/

Packages R (site du CRAN) :

Ooms J (2025). _writexl: Export Data Frames to Excel 'xlsx' Format. doi:10.32614/CRAN.package.writexl. https://doi.org/10.32614/CRAN.package.writexl>, R package version 1.5.4, https://CRAN.R-project.org/package=writexl.

Wickham H, François R, Henry L, Müller K, Vaughan D (2023). dplyr: A Grammar of Data Manipulation. doi:10.32614/CRAN.package.dplyr. https://doi.org/10.32614/CRAN.package.dplyr, R package. version 1.1.4, https://CRAN.R-project.org/package=dplyr.

Wickham H, Bryan J (2025). readxl: Read Excel Files.doi:10.32614/CRAN.package.readxl. https://doi.org/10.32614/CRAN.package.readxl, R package version 1.4.5, https://CRAN.R-project.org/package=readxl.

Wilke C (2025). cowplot: Streamlined Plot Theme and Plot Annotations for 'ggplot2'. doi:10.32614/CRAN.package.cowplot. https://doi.org/10.32614/CRAN.package.cowplot, R package version 1.2.0, https://CRAN.R-project.org/package=cowplot.

Wickham H, Vaughan D, Girlich M (2024). tidyr: Tidy Messy Data. doi:10.32614/CRAN.package.tidyr.https://doi.org/10.32614/CRAN.package.tidyr, R package version 1.3.1, https://CRAN.R-project.org/package=tidyr.

Wickham H (2025). _stringr: Simple, Consistent Wrappers for Common String Operations_. doi:10.32614/CRAN.package.stringr. https://doi.org/10.32614/CRAN.package.stringr, R package version 1.6.0, https://CRAN.R-project.org/package=stringr.

ANNEXES

Annexe 1 : Saisine - Instruction N°DGS/EA4/2023/52 du 31 août 2023

Bulletin officiel Santé - Protection sociale - Solidarité n° 2023/18 du 29 septembre 2023 *Page 18*

MINISTÈRE
DE LA SANTÉ
ET DE LA PRÉVENTION
Liberté
Égalité
Fraternité

INSTRUCTION N° DGS/EA4/2023/52 du 31 août 2023 relative à la campagne nationale exploratoire de mesures de paramètres émergents (alkyls per- et polyfluorés (PFAS), pesticides, empreinte chimique) dans les eaux brutes et les eaux fournies par un réseau de distribution public

Le ministre de la santé et de la prévention

à

Mesdames et Messieurs les directeurs généraux
des agences régionales de santé (ARS)

Copie à :

Mesdames et Messieurs les préfets de région

Référence	NOR : SPRP2309510J (numéro interne : 2023/52)
Date de signature	31/08/2023
Emetteurs	Ministère de la santé et de la prévention Direction générale de la santé
Objet	Campagne nationale de mesures de paramètres émergents (alkyls per- et polyfluorés (PFAS), pesticides, empreinte chimique) dans les eaux brutes et les eaux fournies par un réseau de distribution public.
Commande	Rôle des ARS dans le cadre de la campagne nationale.
Actions à réaliser	- Sélection de certains points d'intérêt ; - Réalisation des prélèvements d'échantillons d'eau par l'ARS ou le laboratoire agréé pour le contrôle sanitaire des eaux (selon les pratiques habituelles) ; - Information des personnes responsables de la production ou de la distribution d'eau ; - Import des données dans le système d'information ; - Adaptation du programme de contrôle sanitaire si besoin.
Echéance	30 novembre 2023
Contact utile	Sous-direction de la prévention des risques liés à l'environnement et à l'alimentation Bureau de la qualité des eaux Nathalie FRANQUES Tél. : 01 40 56 69 18 Mél. : nathalie.franques@sante.gouv.fr

Nombre de pages et annexes	6 pages + 3 annexes (6 pages) Annexe 1 – Liste prévisionnelle des paramètres analysés Annexe 2 – Informations techniques sur les campagnes nationales Annexe 3 – Modèle de courrier d'information des personnes responsables de la production ou de la distribution d'eau
Résumé	La présente instruction a pour principaux objectifs de : - présenter les modalités de mise en œuvre de la campagne d'analyses réalisée par le Laboratoire d'hydrologie de Nancy (LHN) de l'Agence nationale de sécurité sanitaire de l'alimentation, de l'environnement et du travail (Anses), en 2023 et 2024, concernant la recherche dans les eaux brutes et les eaux fournies par un réseau de distribution public d'alkyls per- et polyfluorés (PFAS), de pesticides et d'empreinte chimique non ciblée par chromatographie en phase liquide couplée à de la spectrométrie de masse haute résolution (LC HRMS), pour une recherche *a posteriori* de composés d'intérêt tels que des résidus de médicaments ; - préciser le rôle des ARS dans le cadre de cette campagne.
Mention Outre-mer	Ces dispositions s'appliquent aux Outre-mer, à l'exception de la Polynésie française, de la Nouvelle-Calédonie, de Wallis et Futuna, de Saint-Barthélemy, de Saint-Martin, de Saint-Pierre-et-Miquelon, des Terres australes et antarctiques françaises et de Clipperton.
Mots-clés	Eau destinée à la consommation humaine, qualité de l'eau, analyse, polluants.
Classement thématique	Santé environnementale
Textes de référence	- Directive 2020/2184 du 16 décembre 2020 relative à la qualité des eaux destinées à la consommation humaine ; - Code de la santé publique (CSP), notamment ses articles L. 1321-1 à L. 1321-10, L. 1322-1 à L. 1322-14, R. 1321-1 à R. 1321-63, R. 1321-69 à R. 1321-97 et R. 1322-1 à R. 1322-44-23.
Circulaire / instruction abrogée	NOTE D'INFORMATION N° DGS/EA4 du 10 janvier 2020 relative à la campagne nationale de mesures de paramètres émergents (pesticides, métabolites de pesticides, résidus d'explosifs, 1,4 dioxane) dans les eaux brutes et les eaux fournies par un réseau de distribution public.
Circulaire / instruction modifiée	Néant
Rediffusion locale	Néant
Validée par le CNP le 31 août 2023 - Visa CNP 2023-73	
Document opposable	Oui
Déposée sur le site Légifrance	Non
Publiée au BO	Oui
Date d'application	Immédiate

2

Dans le cadre du programme de travail de l'Agence nationale de sécurité sanitaire de l'alimentation, de l'environnement et du travail (Anses) sur les polluants dans les eaux, la Direction générale de la santé (DGS) a confié au Laboratoire d'hydrologie de Nancy (LHN), l'organisation d'une nouvelle campagne nationale de mesures de paramètres émergents pour la période 2023-2024, afin de recueillir des données de contamination des ressources en eaux et des eaux traitées, de disposer de données d'occurrence robustes pour l'évaluation de l'exposition de l'humain à ces composés via les EDCH, voire de faire évoluer la programmation des contrôles sanitaires.

Des échantillons d'eaux brutes et d'eaux fournies par un réseau de distribution public seront analysés. Afin de limiter la charge de travail, le nombre de prélèvements et les frais associés, plusieurs familles de composés seront analysées lors de la même campagne d'échantillonnage. Les molécules retenues sont listées en annexe 1 : il s'agit en particulier des alkyls per- et polyfluorés (PFAS) et des pesticides. La campagne sera complétée par une campagne d'empreinte chimique non ciblée par chromatographie en phase liquide couplée à de la spectrométrie de masse haute résolution (LC HRMS), pour une recherche *a posteriori* de composés d'intérêt tels que des résidus de médicaments.

La présente instruction expose les principales modalités de mise en œuvre de cette campagne et précise le rôle des agences régionales de santé (ARS) dans ce cadre.

I. Organisation générale de la campagne d'échantillonnage

Le plan d'échantillonnage élaboré par le LHN est semblable à celui retenu pour les précédentes campagnes de mesures ayant concernées notamment les alkylphénols, certains composés alkylés poly et perfluorés, les phtalates, les nitrosamines, les pesticides et leurs métabolites, les résidus d'explosifs ou le 1,4 dioxane. Il s'appliquera à tous les départements français, y compris aux départements et aux régions d'Outre-mer. Les informations techniques sur ces campagnes sont précisées en annexe 2.

Environ 400 sites, voire davantage, seront échantillonnés selon les règles suivantes :

- Le captage fournissant le plus gros débit dans chaque département : ces captages seront sélectionnés par le LHN sur la base des informations enregistrées dans la base de données SISE-Eaux d'alimentation (système d'information en Santé-environnement sur les eaux) ;
- Un captage tiré au sort de manière aléatoire par le LHN dans chaque département à partir de la base de données SISE-Eaux d'alimentation ;
- Le cas échéant, un ou plusieurs captages d'intérêt sélectionnés dans chaque département par l'ARS avec l'appui du LHN si besoin. La sélection des points d'intérêt varie en fonction de la nature des polluants recherchés et des critères définis ci-après.

Les prélèvements seront effectués par les ARS ou le laboratoire agréé chargé du contrôle sanitaire des eaux et les analyses seront réalisées par le LHN (flacons fournis par le LHN).

Conformément à la politique qualité du LHN, les résultats d'analyses seront rendus sous accréditation COFRAC lorsque des paramètres, pour la matrice et la méthode d'analyse, sont inclus dans les portées d'accréditation du laboratoire (N° accréditation : 1-2255 : portée disponible www.cofrac.fr).

II. Validation des points de prélèvements et organisation pratique

II.1. Validation des points de prélèvements

Un fichier pré-rempli avec les installations retenues pour la campagne (captage fournissant le plus gros débit et captage tiré au sort de manière aléatoire par département) et quelques sites d'intérêt proposés est mis à disposition des ARS *via* le RESE (Rubriques : Eau destinée à la consommation humaine / Connaissance des risques sanitaires / Campagnes nationales de mesures de substances émergentes dans les eaux).

Les ARS sont invitées à compléter le document :

- En ajoutant, pour chaque département :
  - le(s) captage(s) d'intérêt le cas échéant vis-à-vis des composés alkylés poly et perfluorés (nom et code installation Sise Eaux d'alimentation) ;
  - le captage d'intérêt vis-à-vis des pesticides (nom et code installation Sise Eaux d'alimentation) ;
- En validant ou corrigeant, pour chaque captage (plus gros débit et aléatoire), la station de traitement correspondante (nom et code SISE-Eaux) ;
- En identifiant, pour chaque captage d'intérêt, la station de traitement correspondante (nom et code SISE-Eaux) ;
- En précisant l'organisme en charge des prélèvements (ARS ou laboratoire agréé pour le contrôle sanitaire des eaux) ainsi que l'adresse de livraison des colis.

Ces informations sont à renseigner au plus tard le 30 novembre 2023.

II.2. Planning de prélèvements

Le planning sera établi par le LHN puis diffusé sur le RESE sur la page dédiée à cette campagne (Rubriques : Eau destinée à la consommation humaine / Connaissance des risques sanitaires / Campagnes nationales de mesures de substances émergentes dans les eaux). Afin de faciliter le déroulement de la campagne, les organismes réalisant les prélèvements pourront s'inscrire sur un planning partagé en fonction de leurs disponibilités et pourront en cas de besoin adapter les créneaux pour répondre aux demandes ponctuelles des ARS.

Le LHN enverra les flaconnages nécessaires à chaque ARS ou au laboratoire agréé pour le contrôle sanitaire des eaux (si l'ARS lui a demandé de réaliser les prélèvements). Les modalités de prélèvement seront précisées dans une fiche et la collecte des flacons remplis sera organisée par le LHN. Les mesures de la température de l'eau, du chlore libre/total et du pH devront également être systématiquement effectuées sur le terrain.

Les prélèvements démarreront début 2024 pour une durée approximative de 10 mois.

III. Information des collectivités concernées

Une fois la(les) période(s) de prélèvement fixée(s) avec le LHN, les ARS sont invitées à informer la personne responsable de la production ou de la distribution d'eau. A cet effet, un modèle de courrier, à adapter localement, est proposé en annexe 3.

IV. Modalités de réalisation des analyses

Les analyses sont réalisées conformément aux dispositions du LHN. Certaines molécules font l'objet d'une accréditation par le COFRAC (N° accréditation 1-2255 portée disponible sur www.cofrac.fr.

Au moment de la rédaction de la présente instruction, les méthodes d'analyses sont en cours de développement. Les performances analytiques (limites de quantification et incertitudes de mesure) seront communiquées aux ARS avant le démarrage de la campagne.

En cas d'anomalie lors de la réception des échantillons ou lors du déroulement des analyses, le LHN prendra l'initiative de poursuivre ou non les analyses en fonction de l'exploitabilité des résultats. En cas de résultats non exploitables (délai d'analyses dépassé, interférences, etc.), les résultats sont susceptibles d'être rendus sous la forme N.M. (non mesuré). Le cas échéant, de nouveaux prélèvements pourront être proposés si l'absence de résultat est susceptible d'impacter la représentativité de cette campagne nationale (objectif d'un minimum de 95% de résultats disponibles par rapport au plan d'échantillonnage).

Après analyse, les échantillons sont conservés pour vérification éventuelle dans la limite de la stabilité de ces molécules, puis ils sont éliminés.

V. Analyses de confirmation

Au cours de cette campagne, le LHN proposera aux ARS de procéder à des analyses de confirmation, lorsque des difficultés analytiques ou des valeurs atypiques auront été relevées dans le cadre de la campagne exploratoire.

Les concentrations en eau traitée ci-dessous pourront, par exemple, conduire à solliciter des analyses de confirmation :

- Alkyls per- et polyfluorés (PFAS) :

Pour la somme des 20 PFAS visés par la nouvelle réglementation : concentration > 60 ng/L.
Pour les autres PFAS : seuls les échantillons avec les concentrations les plus élevées feront l'objet d'un recontrôle (critères à préciser en cours de campagne).

- Pesticides : concentration par molécule individuelle > 0,1 µg/L ou pour la somme > 0,5 µg/L.

VI. Diffusion et prise en compte des résultats

Il est prévu que :

- Un tableau de données soit élaboré et transmis à la DGS par l'Anses dans les 6 mois suivant la réception du dernier échantillon ;
- Plusieurs points d'étapes puissent être organisés tout au long de la campagne (au démarrage, en cours et à l'achèvement) avec la DGS et/ou les ARS ;
- Un rapport de synthèse (résultats agrégés et anonymisés) soit rédigé et publié sur le site de l'Anses ;
- Les résultats soient fournis aux ARS sous un format intégrable à la base de données du ministère chargé de la santé ;
- Les résultats soient également disponibles sous forme de rapport d'analyse avec une convention de preuve pour transmission informatique.

La question du statut réglementaire des analyses effectuées dans le cadre de la présente campagne, et des éventuelles suites à donner au niveau local à ces résultats, relève de la responsabilité des ARS, en lien avec la DGS. L'Anses est informée des situations où de telles suites sont susceptibles de conduire à une médiatisation qui interviendrait avant la finalisation ou la publication de son rapport.

Les ARS doivent tenir compte des résultats de la campagne nationale pour adapter au besoin la programmation du contrôle sanitaire, en application de l'article R. 1321-17 du CSP.

Enfin, le LHN tient à disposition la procédure relative au traitement des réclamations.

5

VII. Financement de ces campagnes de mesures

Sur la base de la convention entre l'Anses et la DGS, les frais d'envois et les frais d'analyses des échantillons d'eau seront pris en charge par le LHN. Seuls les frais de prélèvements, s'ils sont réalisés par le laboratoire agréé pour le contrôle sanitaire des eaux, doivent être pris en charge par les ARS.

Cette campagne exploiratoire d'analyses sera réalisée par le LHN dans le respect de la politique qualité du LHN et conformément aux exigences de la norme NF EN ISO/CEI 17025.

* * -

Vous voudrez bien me faire part, sous le présent timbre, des éventuelles difficultés rencontrées par vos services dans la contribution à ces campagnes nationales.

Vu au titre du CNP par le secrétaire général des ministères chargés des affaires sociales,

Signé

Pierre PRIBILE

Pour le ministre et par délégation :
Le directeur général de la santé,

Signé

Christian RABAUD

6

Annexe 2 : Méthode d'analyse des divers composés par SPE-Online-LC-HRMS

Objet et domaine d'application

Les analyses sont effectuées sur les eaux de ressource (eaux souterraines et eaux de surface) ainsi que sur les eaux traitées issues des stations de potabilisation.

Matériels et méthode

Avertissement : Des appellations commerciales ou fournisseurs sont mentionnées dans ce paragraphe. Ces informations sont données à l'intention des utilisateurs de la méthode et ne signifient nullement que l'Anses recommande l'emploi exclusif de ces matériels et produits.

- Réactifs et solutions étalons

Le méthanol, l'eau, l'acide formique et le formate d'ammonium utilisés pour la préparation des solutions et pour l'analyse sont de qualité ULC-MS, et sont fournis par Biosolve Chimie (Dieuze, France).

- Conditions opératoires

L'instrument analytique est composé d'un chromatographe en phase liquide couplé à un spectromètre de masse à source électrospray (ESI) combinant un quadripôle et un analyseur à temps de vol, ou ToF pour « Time of Flight » modèle Xevo G2-XS (Waters SAS, St-Quentin-en-Yvelines, France).

Les conditions opératoires de la méthode sont présentées dans le tableau 1 ci-dessous :

Tableau 1 : Résumé des conditions d'analyse en SPE Online-LC-HRMS

SPE Online	**Acquity BSM 18K I Class, Waters**
Colonne	C18 Hypersil GOLD™ 2,1x20 mm, 12 µm, ThermoScientific
Chargement	Voie A : Eau ULC/MS 100% pendant 2 min
Débit 1 mL/min	Débit 1 mL/min
UPLC®	**Acquity BSM 18K I Class, Waters**
Colonne	Acquity UPLC® BEH C18 2,1x100 mm, 1,7 µm, Waters
Mode d'élution t	Gradient
Gradient d'élution	Voie A : Eau ULC/MS à 5mM formate d'ammonium + 0.05% acide formique Voie B : Méthanol ULC/MS à 5mM formate d'ammonium + 0.05% acide formique 2% B à 98% B en 19min
Débit	0,350 mL/min
Volume d'injection	1 mL
Température de colonne	35°C
QToF	**Xevo G2XS-QToF, Waters**
Source d'ionisation	ESI (+/-)
Capillaire	1 kV
Température source	120°C

Température désolvatation	550°C
Gaz désolvatation	1000L/N_2
Mode d'acquisition	MS_E
Gamme de masse	50 à 1000 m/z

Le mode MS_E repose sur l'acquisition de deux fonctions parallèles, dans lesquelles sont enregistrés des scans alternés à différentes énergies de collision. La fonction 1 correspond à une faible énergie de collision fixée à 6 eV, tandis que la fonction 2 est acquise à haute énergie de collision, selon une rampe comprise entre 10 et 60 eV. Pour la fonction 2, l'ensemble des spectres de masse acquis à chaque énergie de collision au sein de cette rampe est combiné en un spectre de masse unique, intégrant simultanément les informations relatives aux ions précurseurs et aux ions fragments. Les deux fonctions présentent un temps de scan de 0,25 s.

Ce mode d'acquisition permet ainsi l'obtention conjointe des ions précurseurs et des ions fragments en une seule injection, sans sélection préalable de l'ion précurseur.

Il convient de préciser que, afin de corriger d'éventuelles dérives de masse lors de l'analyse des échantillons, une solution de *lock mass* constituée de leucine-enképhaline est introduite directement dans la source d'ionisation du spectromètre de masse via le capillaire de *lock spray* toutes les 15 s au cours de l'analyse. Le spectromètre de masse a été étalonné dans les deux modes d'ionisation avant chaque séquence par une solution de formate de sodium, selon les recommandations du constructeur.

- Traitement des échantillons

Les échantillons ont été prélevés dans des tubes en verre brun de 40 mL. Du thiosulfate de sodium a été ajouté dans les eaux traitées afin de stopper l'action du chlore. Ce compromis a été retenu, bien que l'on ne puisse totalement exclure une modification de la composition de l'échantillon.

Annexe 3 : Logiciels utilisés (UNIFI et R+R studio)

- Logiciel de retraitement Unifi

Les paramètres de retraitement de la méthode sont présentés dans le tableau ci-dessous :

Tableau 1 : Résumé des critères d'identification de la méthode de retraitement

PEAK DETECTION (INTENSITY THRESHOLD)	Low energy :	100 counts
	High energy	200 counts
TEMPS DE RETENTION	Tolerance	0.4 min
MASS	Tolerance	50 ppm
	Fragment tolerance	5 mDa
ADDUCTS	Positif	+H
	Negatif	- H

Les autres paramètres de la méthode sont les paramètres par défaut du logiciel.

- Logiciels open-source (R+R-studio)

Les versions 4.5.1 de R et RStudio 2024.04.2+764 ont été utilisés. Les packages suivant ont été utilisés :

Tableau 2 : Liste des packages utilisés dans R avec leur version et auteurs

Package	Version	Auteurs
writexl	1.5.4	Ooms, 2025
readxl	1.4.5	Wickham et Bryan, 2025
stringr	1.6.0	Wickham, 2025
dplyr	1.1.4	Whickam *et al*, 2023
tidyverse	2.0.0	Wickham *et al*, 2019
ggplot2	4.0.0	Wickham *et al*, 2016
cowplot	1.2.0	Wilke, 2025
tidyr	1.3.1	Wickham *et al*, 2024
RColorBrewer	1.1-3	Neuwirth, 2022
openxlsx	4.2.8.1	Schauberger et Walker, 2025

Annexe 4 : Composition des contrôles positifs en solvant et en matrice, à 100 et 500 ng/L.

Le tableau ci-dessous présente la liste des composés présents dans les solutions ayant servies à réaliser les contrôles positifs.

Tableau 1 : Composition des contrôles positifs en solvant et en matrice à 100 ng/L et 500 ng/L.

Nom du composé	Usage ou classe chimique	CAS de l'étalon analytique	Formule brute de la molécule	Masse exacte de la molécule	Mode d'ionisation	LogP
2,6-Dichlorbenzamid	Pesticide	2008-58-4	C7H5Cl2NO	188.9748	+	0.8
Atrazine	Pesticide	1912-24-9	C8H14ClN5	215.0938	+	2.6
Atrazine desethyl (DEA)	Pesticide	6190-65-4	C6H10ClN5	187.0625	+	1.5
Atrazine desisopropyl (DIA)	Pesticide	1007-28-9	C5H8ClN5	173.0468	+	1.1
Benthiavalicarb Isopropyl	Pesticide	177406-68-7	C18H24FN3O3S	381.1522	+	3.9
Boscalid	Pesticide	188425-85-6	C18H12Cl2N2O	342.0327	+	4.9
Chloridazon-methyl-desphenyl	Pesticide	17254-80-7	C5H6ClN3O	159.0199	+	-0.2
Chlortoluron	Pesticide	15545-48-9	C10H13ClN2O	212.0716	+	2.4
Dimethachlor	Pesticide	50563-36-5	C13H18ClNO2	255.1026	+	2.3
Dimethachlor CGA 369873	Pesticide	1418095-08-5	C10H13NO4S	243.0565	+	0.8
Epoxiconazole	Pesticide	133855-98-8	C17H13ClFN3O	329.0731	+	3.2
Flufenacet	Pesticide	142459-58-3	C14H13F4N3O2S	363.0665	+	3.6
Flufenacet ESA	Pesticide	947601-87-8	C11H14FNO4S	274.0549	-	1.1
Metazachlor	Pesticide	67129-08-2	C14H16ClN3O	277.0982	+	2.7
Metolachlor	Pesticide	51218-45-2	C15H22ClNO2	283.1339	+	3.1
Metolachlor ESA	Pesticide	171118-09-5	C15H23NO5S	329.1297	-	1
Metolachlor NOA	Pesticide	1418095-19-8	C14H19NO6S	329.0933	-	1.4
Oxadixyl	Pesticide	77732-09-3	C14H18N2O4	278.1207	+	1.8

Propyzamide	Pesticide	23950-58-5	C12H11Cl2NO	255.0218	+	3.2
Terbumeton-desethyl	Pesticide	30125-64-5	C8H15N5O	197.1277	+	2.1
Terbuthylazine_ LM6 (SYN545666)	Pesticide	2206682-85-9	C8H14N4O2	198.1117	+	0.1
Terbuthylazine-desethyl	Pesticide	30125-63-4	C7H12ClN5	201.0781	+	2
1H,1H,2H,2H-Perfluorodecanesulfonic acid (8:2 FTSA)	PFAS	39108-34-4	C10H5F17O3S	527.9688	-	5.3
1H,1H,2H,2H-Perfluorohexanesulfonic acid (4:2 FTSA)	PFAS	757124-72-4	C6H5F9O3S	327.9816	-	2.6
1H,1H,2H,2H-Perfluorooctane sulfonic acid (6:2 FTSA)	PFAS	27619-97-2	C8H5F13O3S	427.9752	-	3.9
3-(2-(Perfluorohexyl)ethanesulfonyl)propanoic acid (6:2 FTSO2PrA)	PFAS	2089110-04-1	C11H9F13O4S	484.0014	-	3.9
3-[[(Perfluoro-n-butyl)sulfonyl]amino]-N,N,N-trimethyl-1-propanaminium (PFBSAmS)	PFAS	-	C10H16F9N2O2S	399.0789	+	3
3-[[(Perfluoro-n-octyl)sulfonyl]amino]-N,N,N-trimethyl-1-propanaminium (PFHxSAmS)	PFAS	-	C12H15F13N2O2S	498.0647	+	4.3
5:1:2 Fluorotelomer betaine (5:1:2 FTB)	PFAS	171184-02-4	C12H13F12NO2	431.0755	+	5.1
5:3 Fluorotelomer betaine (5:3FTB)	PFAS	171184-14-8	C12H14F11NO2	413.0849	+	5
6:2 Fluorotelomer sulfonamide betaine (6:2 FTAB)	PFAS	34455-29-3	C15H19F13N2O4S	570.0858	+	4.8
6:2 Fluorotelomer thioether amido sulfonic acid (6:2 FtTAoS)	PFAS	62880-95-9	C15H18F13NO4S2	587.0470	-	4.5
N-(3-(Dimethylamino)propyl)-3,3,4,4,5,5,6,6,7,7,8,8,8-tridecafluorooctanesulphonamide N-oxide (DPOSA)	PFAS	80475-32-7	C13H17F13N2O3S	528.0752	+	4
N-(3-(Dimethylamino)propyl)tridecafluoro-1-hexanesulfonamide (AmPrFHxSA)	PFAS	50598-28-2	C11H13F13N2O2S	484.0490	+	4.3
N-[3-(Dimethylamino)propyl] perfluoro-n-butanesulfonamide (AmPrFBSA)	PFAS	68555-77-1	C9H13F9N2O2S	384.0554	+	2.9
Perfluoro(2-ethoxyethane)sulphonic acid (PFEESA)	PFAS	113507-82-7	C4HF9O4S	315.9452	-	2.4
Perfluorobutanesulfonic acid (PFBS)	PFAS	375-73-5	C4HF9O3S	299.9503	-	2.3
Perfluorodecanesulfonic acid (PFDS)	PFAS	335-77-3	C10HF21O3S	599.9311	-	6.4
Perfluorododecanesulfonic acid (PFDoDS)	PFAS	79780-39-5	C12HF25O3S	699.9247	-	7.7

Perfluoroheptanesulfonic acid (PFHpS)	PFAS	375-92-8	C7HF15O3S	449.9407	-	4.3
Perfluorohexanesulfonamide (FHxSA)	PFAS	41997-13-1	C6H2F13NO2S	398.9599	-	3.5
Perfluorohexanesulfonic acid (PFHxS)	PFAS	355-46-4	C6HF13O3S	399.9439	-	3.7
Perfluorononanesulfonic acid (PFNS)	PFAS	68259-12-1	C9HF19O3S	549.9343	-	5.7
Perfluorooctane sulfonamido ammonium (PFOSAmS)	PFAS	73149-44-7	C14H16F17N2O2S		+	5.6
Perfluorooctanesulfonic acid (PFOS)	PFAS	1763-23-1	C8HF17O3S	499.9375	-	5
Perfluoropentanesulfonic acid (PFPeS)	PFAS	2706-91-4	C5HF11O3S	349.9471	-	3
Perfluoroundecanesulfonic acid (PFUnDS)	PFAS	749786-16-1	C11HF23O3S	649.9279	-	7
Acebutolol	Pharmaceutique	37517-30-9	C18H28N2O4	336.2049	+	1.7
Alprazolam	Pharmaceutique	28981-97-7	C17H13ClN4	308.0829	+	2.1
Antipyrine (Phenazone)	Pharmaceutique	60-80-0	C11H12N2O	188.0950	+	0.4
Antipyrine 4-Acetamido	Pharmaceutique	83-15-8	C13H15N3O2	245.1164	+	0
Antipyrine 4-Formylamino	Pharmaceutique	1672-58-8	C12H13N3O2	231.1008	+	0
Antipyrine PropyPhenazone	Pharmaceutique	479-92-5	C14H18N2O	230.1419	+	1.7
Atenolol	Pharmaceutique	29122-68-7	C14H22N2O3	266.1630	+	0.2
Bezafibrate	Pharmaceutique	41859-67-0	C19H20ClNO4	361.1081	+	3.8
Bupivacaine	Pharmaceutique	18010-40-7	C18H29ClN2O	288.2202	+	3.4
Carbamazepine	Pharmaceutique	298-46-4	C15H12N2O	236.0950	+	2.5
Carbamazepine 10,11-dihydro	Pharmaceutique	3564-73-6	C15H14N2O	238.1106	+	2.3
Carbamazepine 10,11-epoxide	Pharmaceutique	36507-30-9	C15H12N2O2	252.0899	+	1.3
Cyclophosphamide	Pharmaceutique	50-18-0	C7H15Cl2N2O2P	260.0248	+	0.6
Demoxepam	Pharmaceutique	963-39-3	C15H11ClN2O2	286.0509	+	2.3
Diclofenac	Pharmaceutique	15307-79-6	C14H10Cl2NO2	295.0167	+	4.4
Erythromycin (mixture A,B,C)	Pharmaceutique	114-07-8	C37H67NO13	733.4612	+	2.7
Fenofibrate	Pharmaceutique	49562-28-9	C20H21ClO4	360.1128	+	5.2

Fenofibric Acid	Pharmaceutique	42017-89-0	C17H15ClO4	318.0659	+	3.9
Fexofenadine	Pharmaceutique	83799-24-0	C32H39NO4	501.2879	+	3
Ifosfamide	Pharmaceutique	3778-73-2	C7H15Cl2N2O2P	260.0248	+	0.9
Irbesartan	Pharmaceutique	138402-11-6	C25H28N6O	428.2325	+	4.1
Ketoprofen	Pharmaceutique	22071-15-4	C16H14O3	254.0943	+	3.1
Lamotrigine	Pharmaceutique	84057-84-1	C9H7Cl2N5	255.0079	+	1.4
Niflumic acid	Pharmaceutique	4394-00-7	C13H9F3N2O2	282.0616	+	3.7
Propranolol	Pharmaceutique	525-66-6	C16H21NO2	259.1572	+	3
Ramipril	Pharmaceutique	87333-19-5	C23H32N2O5	416.2311	+	1.4
Sotalol	Pharmaceutique	3930-20-9	C12H20N2O3S	272.1195	+	0.2
Sulfamethoxazole	Pharmaceutique	723-46-6	C10H11N3O3S	253.0521	+	0.9
Sulfamethoxazole N4-Acetyl	Pharmaceutique	21312-10-7	C12H13N3O4S	295.0627	+	0.7
Telmisartan	Pharmaceutique	144701-48-4	C33H30N4O2	514.2369	+	6.9
Tetrazepam	Pharmaceutique	10379-14-3	C16H17ClN2O	288.1029	+	3.2
Tramadol	Pharmaceutique	27203-92-5	C16H25NO2	263.1885	+	2.6
Venlafaxine	Pharmaceutique	93413-69-5	C17H27NO2	277.2042	+	2.9

Annexe 5 : Liste des composés de la base de données interne et paramètres identification associés

Nom du composé	Usage/Classe chimique du composé	n°CAS etalon analytique	Formule brute molécule	Masse monoisotopique de la molécule	Mode d'ionisation	Temps de rétention (minutes)
(2S,5S)-5-Benzyl-3,6-dioxo-2-piperazineacetic acid (Aspartame Related Compound A)	Domestique	5262-10-2	C13H14N2O4	262.0954	+ et -	7,7
(4-chloro-2-Methylphenoxy)acetic acid (2,4-MCPA)	Pesticide	94-74-6	C9H9ClO3	200.0240	-	12,22
1-(3,4-Dichlorophenyl)-3-methylurea (DCPMU)	Pesticide	3567-62-2	C8H8Cl2N2O	218.0014	+	12,46
1-(3-Phenylpropanoyl)piperidine-4-carboxylic acid	Produit industriel	147636-42-8	C15H19NO3	261.1365	-	12,13
1,3-Diphenylguanidine (DPG)	Produit industriel	102-06-7	C13H13N3	211.1109	+	8,36
11-Chloroperfluoro-3-oxaundecanesulfonic acid (11Cl-PF3OUdS)	PFAS	83329-89-9	C10HClF20O4S	631.8965	-	16,16
1H,1H,2H,2H-Perfluorodecanesulfonic acid (8:2 FTSA)	PFAS	39108-34-4	C10H5F17O3S	527.9688	-	15,48
1H,1H,2H,2H-perfluorodecylphosphate (8:2 PAP)	PFAS	438237-75-3	C10H6F17O4P	543.9732	-	15,28
1H,1H,2H,2H-Perfluorohexanesulfonic acid (4:2 FTSA)	PFAS	757124-72-4	C6H5F9O3S	327.9816	-	12,71
1H,1H,2H,2H-Perfluorooctane sulfonic acid (6:2 FTSA)	PFAS	27619-97-2	C8H5F13O3S	427.9752	-	14,66
1H,1H,2H,2H-perfluorooctyl phosphate(6:2 PAP)	PFAS	150033-29-7	C8H6F13O4P	443.9796	-	13,87
1H-Benzotriazole	Produit industriel	95-14-7	C6H5N3	119.0483	+ et -	8,11
2-((4-Methylpentan-2-yl)amino)-5-(phenylamino)cyclohexa-2,5-diene-1,4-dione (6PPD-quinone)	Produit industriel	2754428-18-5	C18H22N2O2	298.1681	+	15,15
2-(4-Diethylamino-2-hydroxybenzoyl)benzoic acid	Produit industriel	5809-23-4	C18H19NO4	313.1314	+ et -	13,7
2-(N-Ethylperfluorooctanesulfonamido)acetic acid (FOSAA-Et)	PFAS	2991-50-6	C12H8F17NO4S	584.9903	-	16,48
2-(N-ethylperfluorooctanesulfonamido)ethyl phosphate (SamPAP)	PFAS	3820-83-5	C12H11F17NO6PS	650.9773	-	15,98
2-(N-Methylperfluorooctanesulfonamido)acetic acid (FOSAA-Me)	PFAS	2355-31-9	C11H6F17NO4S	570.9746	-	16,25
2,2-Dimethyl-1,2,3-trihydroquinazolin-4-one	Pharmaceutique	77726-78-4	C10H12N2O	176.0950	+	8,31
2,4,5-trichlorophenoxyacetic acid (2,4,5-T)	Pesticide	93-76-5	C8H5Cl3O3	253.9304	-	12,93
2,4-dichlorophenoxyacetic acid (2,4-D)	Pesticide	94-75-7	C8H6Cl2O3	219.9694	-	11,95
2,6-dichlorobenzamide	Pesticide	2008-58-4	C7H5Cl2NO	188.9748	+	7,36
2-Amino-4-methoxy-6-methyl-1,3,5-triazine (MMTA)	Pesticide	1668-54-8	C5H8N4O	140.0698	+	5,92
2-Ethyl-6-methyl-2-chloroacetanilide	Pesticide	32428-71-0	C11H14ClNO	211.0764	+	11,05
2-Hydroxybenzothiazole	Produit industriel	934-34-9	C7H5NOS	151.0092	+ et -	10,49
2-Methylbenzothiazole	Produit industriel	120-75-2	C8H7NS	149.0299	+	11,93

2-Methylmercaptobenzothiazole	Produit industriel	615-22-5	C8H7NS2	181.0020	+	13,52
2-phenylphenol	Pesticide	90-43-7	C12H10O	170.0732	-	13,06
3-(2-(Perfluorohexyl)ethanesulfonyl)propanoic acid (6:2 FTSO2PrA)	PFAS	2089110-04-1	C11H9F13O4S	484.0014	-	15,26
3,4-Dichlorophenylurea (DCPU)	Pesticide	2327-02-8	C7H6Cl2N2O	203.9857	+	12,01
3,5,6-trichloro-2-pyridinol	Pesticide	6515-38-4	C5H2Cl3NO	196.9202	+	12,83
3-[[(Perfluoro-n-butyl)sulfonyl]amino]-N,N,N-trimethyl-1-propanaminium (PFBSAmS)	PFAS	-	C10H16F9N2O2S	399.0789	+	12,06
3-[[(Perfluoro-n-octyl)sulfonyl]amino]-N,N,N-trimethyl-1-propanaminium (PFHxSAmS)	PFAS	-	C12H15F13N2O2S	498.0647	+	14,08
3-benzoimidazol-1-yl-propionic acid	Pharmaceutique	14840-18-7	C10H10N2O2	190.0742	-	5,71
3H-Perfluoro-4,8-dioxanonanoic acid (Adona)	PFAS	919005-14-4	C7H2F12O4	377.9761	-	13,15
3-Iodo-2-propynylbutylcarbamate (IPBC ou iodocarb)	Produit industriel	55406-53-6	C8H12INO2	280.9913	+	12,2
3-Phenoxybenzoic acid	Pesticide	3739-38-6	C13H10O3	214.0630	-	13,97
3-Pyridinemethanol	Pharmaceutique	100-55-0	C6H7NO	109.0528	+	3,03
4,5-dichloro-2-octyl-2H-isothiazol-3-one (DCOIT)	Pesticide	64359-81-5	C11H17Cl2NOS	281.0408	+	16,17
4-amino-2,6-dinitrotoluene	XPLO	19406-51-0	C7H7N3O4	197.0437	-	11,42
4-Chlorophenylurea	Pesticide	140-38-5	C7H7ClN2O	170.0247	+	9,99
4-Hydroxy-2,2,6,6-tetramethylpiperidine	Produit industriel	2403-88-5	C9H19NO	157.1467	+	3,67
4-Methyl-1H-benzotriazol	Produit industriel	29878-31-7	C7H7N3	133.0640	+ et -	9,8
4-Nitrodiphenylamine (4-Nitro-DPA)	XPLO	836-30-6	C12H10N2O2	214.0742	+	13,74
4-Pyridoxic acid	Pharmaceutique	82-82-6	C8H9NO4	183.0532	+ et -	4,75
5,6-Dimethyl-1H-benzotriazole	Produit industriel	4184-79-6	C8H9N3	147.0796	+ et -	10,96
5:1:2 Fluorotelomer betaine (5:1:2 FTB)	PFAS	171184-02-4	C12H13F12NO2	431.0755	+	12,95
5:3 Fluorotelomer betaine (5:3FTB)	PFAS	171184-14-8	C12H14F11NO2	413.0849	+	12,85
5-Chloro-2-methyl-2H-isothiazol-3-one (CMIT)	Produit industriel	26172-55-4	C4H4ClNOS	148.9702	+	7,32
5-Chlorobenzotriazole	Produit industriel	94-97-3	C6H4ClN3	153.0094	+ et -	10,46
5H-Perfluoropentanoic acid (5H-PFPeA)	PFAS	376-72-7	C5H2F8O2	245.9927	-	8,02
5-Hydroxyflecainide	Pharmaceutique	83526-33-4	C15H19F3N2O3	332.1348	+ et -	8,66
5-Methyl-1H-benzotriazole	Produit industriel	136-85-6	C7H7N3	133.0640	+ et -	9,8
6:2 Fluorotelomer sulfonamide amine (N-AP-6:2FOSA)	PFAS	34455-22-6	C13H17F13N2O2S	512.0803	+	14,18
6:2 Fluorotelomer sulfonamide betaine (6:2 FTAB)	PFAS	34455-29-3	C15H19F13N2O4S	570.0858	+	14,25
6:2 Fluorotelomer thioether amido sulfonic acid (6:2 FtTAoS)	PFAS	62880-95-9	C15H18F13NO4S2	587.0470	-	15,81
6:2 Fluorotelomer thioether propanoic acid (6:2 FTThPrA)	PFAS	149339-57-1	C11H9F13O2S	452.0116	-	16,53
6-Chloronicotinic acid	Pesticide	5326-23-8	C6H4ClNO2	156.9931	+	8,04

7H-Perfluoro-4-methyl-3,6-dioxaoctanesulfonic acid (NAFION BP2)	PFAS	749836-20-2	C7H2F14O5S	463.9399	-	13,27
7H-Perfluoroheptanoic acid (7H-PFHpA)	PFAS	1546-95-8	C7H2F12O2	345.9863	-	11,09
9-Chloro-3-oxa-perfluorononanesulfonic acid (9CL-PF3ONS)	PFAS	73606-19-6	C8HClF16O4S	531.9029	-	15,18
Acebutolol	Pharmaceutique	37517-30-9	C18H28N2O4	336.2049	+	9,8
Acesulfame	Domestique	55589-62-3	C4H5NO4S	162.9939	-	4,45
Acetamiprid	Pesticide	135410-20-7	C10H11ClN4	222.0672	+	8,89
Acetamiprid_IM-1-4	Pesticide	120739-62-0	C7H9ClN2	156.0454	+	4,52
Acetamiprid-N-desmethyl	Pesticide	190604-92-3	C9H9ClN4	208.0516	+	8,9
Acetochlor	Pesticide	34256-82-1	C14H20ClNO2	269.1183	+	14,12
Acifluorfen	Pesticide	50594-66-6	C14H7ClF3NO5	360.9965	-	13,38
Aclonifen	Pesticide	74070-46-5	C12H9ClN2O3	264.0302	+	14,69
Alachlor	Pesticide	15972-60-8	C14H20ClNO2	269.1183	+	14,12
Alitame	Domestique	80863-62-3	C14H25N3O4S	331.1566	+	9,7
Alphachloralose	Pesticide	15879-93-3	C8H11Cl3O6	307.9621	-	9,14
Alprazolam	Pharmaceutique	28981-97-7	C17H13ClN4	308.0829	+	13,32
Altrenogest	Pharmaceutique	850-52-2	C21H26O2	310.1933	+	14,36
Ametoctradin	Pesticide	865318-97-4	C15H25N5	275.2110	+	15,46
Ametryne	Pesticide	834-12-8	C9H17N5S	227.1205	+	13,37
Ampicillin	Pharmaceutique	7177-48-2	C16H19N3O4S	349.1096	+	8,02
Anatoxine-a	Cyanotoxine	64285-06-9	C10H15NO	165.1154	+	5,2
Antipyrine (Phenazone)	Pharmaceutique	60-80-0	C11H12N2O	188.0950	+	9,11
Antipyrine 4-Acetamido	Pharmaceutique	83-15-8	C13H15N3O2	245.1164	+	8,13
Antipyrine 4-Formylamino	Pharmaceutique	1672-58-8	C12H13N3O2	231.1008	+	8,03
Antipyrine PropyPhenazone	Pharmaceutique	479-92-5	C14H18N2O	230.1419	+	12,36
Aspartame	Domestique	22839-47-0	C14H18N2O5	294.12157	-	8,54
Asulame	Pesticide	3337-71-1	C8H10N2O4S	230.0361	+	6,25
Atenolol	Pharmaceutique	29122-68-7	C14H22N2O3	266.1630	+	6,8
Atraton (Gesatamine)	Pesticide	1610-17-9	C9H17N5O	211.1433	+	10,94
Atrazine	Pesticide	1912-24-9	C8H14ClN5	215.0938	+	12,89
Atrazine desethyl (DEA)	Pesticide	6190-65-4	C6H10ClN5	187.0625	+	10,07
Atrazine desethyl desisopropyl (DEDIA)	Pesticide	3397-62-4	C3H4ClN5	145.0155	+	8,74
Atrazine desisopropyl (DIA)	Pesticide	1007-28-9	C5H8ClN5	173.0468	+	7,89
Atrazine-2-hydroxy	Pesticide	2163-68-0	C8H15N5O	197.1277	+	8,2

Avobenzone	Ingrédient cosmetique	70356-09-1	C20H22O3	310.1569	+	17,58
Azamethiphos	Pesticide	35575-96-3	C9H10ClN2O5PS	323.9737	+	10,81
Azimsulfuron	Pesticide	120162-55-2	C13H16N10O5S	424.1026	+	12,3
Azithromycin	Pharmaceutique	83905-01-5	C38H72N2O12	748.5085	+	10,88
Azoxystrobine	Pesticide	131860-33-8	C22H17N3O5	403.1168	+	13,93
Beflubutamide	Pesticide	113614-08-7	C18H17F4NO2	355.1195	+	14,75
Benalaxyl	Pesticide	71626-11-4	C20H23NO3	325.1678	+	14,81
Bendiocarb	Pesticide	22781-23-3	C11H13NO4	223.0845	+	11,13
Benfuracarbe	Pesticide	82560-54-1	C20H30N2O5S	410.1875	+	15,75
Benoxacor	Pesticide	98730-04-2	C11H11Cl2NO2	259.0167	+	12,82
Bentazone	Pesticide	25057-89-0	C10H12N2O3S	240.0569	-	11,14
Bentazone-methyl	Pesticide	61592-45-8	C11H14N2O3S	254.0725	+	12,6
Benthiavalicarb Isopropyl	Pesticide	177406-68-7	C18H24FN3O3S	381.1522	+	14,36
Benzamide	Produit industriel	55-21-0	C7H7NO	121.0528	+	6,93
Benzisothiazolinone (BIT)	Produit industriel	2634-33-5	C7H5NOS	151.0092	+ et -	8,58
Benzyldimethyldecylammonium (BAC-C10)	Pesticide	965-32-2	C19H34N	276.2691	+	14,33
Benzyldimethyloctylammonium (BAC-C8)	Pesticide	959-55-7	C17H30N	248.2378	+	12,67
Bezafibrate	Pharmaceutique	41859-67-0	C19H20ClNO4	361.1081	+	14,04
Bifenazate	Pesticide	149877-41-8	C17H20N2O3	300.1474	+	14,21
Bifenox	Pesticide	42576-02-3	C14H9Cl2NO5	340.9858	+	15,39
Bis(1H,1H,2H,2H-perfluorodecyl)phosphate (8:2 diPAP)	PFAS	114519-85-6	C20H9F34O4P	989.9696	-	15,25
Bis(2-(perfluorohexyl)ethyl) phosphate (6:2 diPAP)	PFAS	407582-79-0	C16H9F26O4P	789.9823	-	17,23
Bisphenol A diglycidyl ether (BADGE)	Produit industriel	1675-54-3	C21H24O4	340.1675	+	14,65
Bisphenol S	Produit industriel	80-09-1	C12H10O4S	250.0300	+ et -	9,48
Bitertanol	Pesticide	55179-31-2	C20H23N3O2	337.1790	+	15,342
Bixafen	Pesticide	581809-46-3	C18H12Cl2F3N3O	413.0310	+	14,7
Boscalid	Pesticide	188425-85-6	C18H12Cl2N2O	342.0327	+	14,21
Boscalid_M510F01	Pesticide	661463-87-2	C18H12Cl2N2O2	358.0276	-	11,98
Brodifacoum	Pesticide	56073-10-0	C31H23BrO3	522.0831	+ et -	17,36
Bromacil	Pesticide	314-40-9	C9H13BrN2O2	260.0160	-	10,95
Bromadiolone	Pesticide	28772-56-7	C30H23BrO4	526.0780	-	15,98
Bromoxynil	Pesticide	1689-84-5	C7H3Br2NO	274.8581	-	11,84
Bromuconazole	Pesticide	116255-48-2	C13H12BrCl2N3O	374.9541	+	14,63

Bupivacaine	Pharmaceutique	18010-40-7	C18H29ClN2O	288.2202	+	11,29
Butachlor	Pesticide	23184-66-9	C17H26ClNO2	311.1652	+	16,13
Butraline	Pesticide	33629-47-9	C14H21N3O4	295.1532	+	16,65
Buturon	Pesticide	3766-60-7	C12H13ClN2O	236.0716	-	12,39
Cadusafos	Pesticide	95465-99-9	C10H23O2PS2	270.0877	+	15,31
Caffeine	Domestique	58-08-2	C8H10N4O2	194.0804	+	7,4
Carbamazepine	Pharmaceutique	298-46-4	C15H12N2O	236.0950	+	12,5
Carbamazepine 10,11-dihydro	Pharmaceutique	3564-73-6	C15H14N2O	238.1106	+	12,79
Carbamazepine 10,11-epoxide	Pharmaceutique	36507-30-9	C15H12N2O2	252.0899	+	11,15
Carbendazime	Pesticide	10605-21-7	C9H9N3O2	191.0695	+	8,2
Carbofuran	Pesticide	1563-66-2	C12H15NO3	221.1052	+	11,9
Carbofuran-3-keto	Pesticide	16709-30-1	C12H13NO4	235.0845	+	10,09
Carbofuran-3-OH	Pesticide	16655-82-6	C12H15NO4	237.1001	+	8,79
Carbophenothion	Pesticide	786-19-6	C11H16ClO2PS3	341.9739	+	16,59
Cefquinome	Pharmaceutique	84957-30-2	C23H24N6O5S2	528.1250	+	6,93
Cephalexin	Pharmaceutique	15686-71-2	C16H17N3O4S	347.0940	+	7,8
Cetirizine	Pharmaceutique	83881-52-1	C21H25ClN2O3	388.1554	+ et -	13,28
Chlorambucil	Pharmaceutique	305-03-3	C14H19Cl2NO2	303.0793	+	14,79
Chlorantraniliprole	Pesticide	500008-45-7	C18H14BrCl2N5O2	480.9708	+	12,87
Chlorbufam	Pesticide	1967-16-4	C11H10ClNO2	223.0400	+	12,11
Chloridazon	Pesticide	1698-60-8	C10H8ClN3O	221.0356	+	8,83
Chloridazon-methyl-desphenyl	Pesticide	17254-80-7	C5H6ClN3O	159.0199	+	5,7
Chlorothalonil_R182281 (SDS3701)	Pesticide	28343-61-5	C8HCl3N2O	245.9154	-	11,83
Chlorothalonil_R417888	Pesticide	1418095-02-9	C8H3Cl3N2O4S	327.8879	-	7,37
Chlorothalonil_R471811 (SYN510573)	Pesticide	-	C8H5Cl3N2O5S	345.8985	-	3,24
Chlorothalonil_R611965	Pesticide	142733-37-7	C8H4Cl3NO3	266.9257	-	6,52
Chlorothalonil_SYN507900	Pesticide	115044-73-0	C8H3Cl3N2O2	263.9260	-	5,79
Chlorothalonil-4-hydoxy	Pesticide	28343-61-5	C8HCl3N2O	245.9154	-	11,71
Chlorotoluron	Pesticide	15545-48-9	C10H13ClN2O	212.0716	+	12,72
Chlorotoluron-desmethyl	Pesticide	22175-22-0	C9H11ClN2O	198.0560	+	11,92
Chloroxuron	Pesticide	1982-47-4	C15H15ClN2O2	290.0822	+	14,01
Chlorpyrifos-ethyl	Pesticide	2921-88-2	C9H11Cl3NO3PS	348.9263	+	16,32
Chlorpyrifos-methyl	Pesticide	5598-13-0	C7H7Cl3NO3PS	320.8950	+	15,5

Chlorpyrifos-oxon	Pesticide	5598-15-2	C9H11Cl3NO4P	332.9491	+	14,31
Chlorsulfuron	Pesticide	64902-72-3	C12H12ClN5O4S	357.0299	+	11,58
Cis-Mevinphos	Pesticide	298-01-1	C7H13O6P	224.0450	+	9,59
Climbazole	Ingrédient cosmetique	38083-17-9	C15H17ClN2O2	292.0979	+	13,26
Clindamycin	Pharmaceutique	21462-39-5	C18H33ClN2O5S	424.1799	+	11,42
Clofentezine	Pesticide	74115-24-5	C14H8Cl2N4	302.0126	+	15,22
Clomazone	Pesticide	81777-89-1	C12H14ClNO2	239.0713	+	13,61
Clopidol	Pharmaceutique	2971-90-6	C7H7Cl2NO	190.9905	+	7,21
Clopyralid	Pesticide	1702-17-6	C6H3Cl2NO2	190.9541	+	5,49
Cloquintocet-Mexyl	Pesticide	99607-70-2	C18H22ClNO3	335.1288	+	16,13
Clorsulon	Pharmaceutique	60200-06-8	C8H8Cl3N3O4S2	378.9022	+ et -	8,69
Clothianidin	Pesticide	210880-92-5	C6H8ClN5O2S	249.0087	+	8,36
Clothianidin urea (TZMU)	Pesticide	634192-72-6	C6H8ClN3OS	205.0077	+	7,59
Coumaphos	Pesticide	56-72-4	C14H16ClO5PS	362.0145	+	14,87
Coumatetralyl	Pesticide	5836-29-3	C19H16O3	292.1099	+ et -	14,03
Crotamiton	Pharmaceutique	483-63-6	C13H17NO	203.1310	+	13,49
Cyanazine	Pesticide	21725-46-2	C9H13ClN6	240.0890	+	10,69
Cyanophos	Pesticide	2636-26-2	C9H10NO3PS	243.0119	+	12,34
Cyazofamid	Pesticide	120116-88-3	C13H13ClN4O2S	324.0448	+	14,56
Cybutryne	Pesticide	28159-98-0	C11H19N5S	253.1361	+	13,99
Cyclophosphamide	Pharmaceutique	50-18-0	C7H15Cl2N2O2P	260.0248	+	10,86
Cycloxydime	Pesticide	101205-02-1	C17H27NO3S	325.1712	+	14,9
Cycluron	Pesticide	2163-69-1	C11H22N2O	198.1732	+	12,43
Cyproconazol	Pesticide	94361-06-5	C15H18ClN3O	291.1138	+	14,69
Cyprodinil	Pesticide	121552-61-2	C14H15N3	225.1266	+	14,48
Cyromazine	Pesticide	66215-27-8	C6H10N6	166.0967	+	4,76
Demoxepam	Pharmaceutique	963-39-3	C15H11ClN2O2	286.0509	+	12,3
Desmetryne	Pesticide	1014-69-3	C8H15N5S	213.1048	+	11,56
Dichlofluanid	Pesticide	1085-98-9	C9H11Cl2FN2O2S2	331.9623	+	14,11
Dichlormid	Pesticide	37764-25-3	C8H11Cl2NO	207.0218	+	11,03
Dichlorprop-P	Pesticide	120-36-5	C9H8Cl2O3	233.9850	-	12,9
Dichlorvos	Pesticide	62-73-7	C4H7Cl2O4P	219.9459	+	10,89
Diclofenac	Pharmaceutique	15307-79-6	C14H10Cl2NO2	295.0167	+	14,63

Diclofop-methyl	Pesticide	51338-27-3	C16H14Cl2O4	340.0269	+	16,08
Dicyclanil	Pesticide	112636-83-6	C8H10N6	190.0967	+	6,05
Didodecyldimethylammonium (DDAB-C12)	Pesticide	3282-73-3	C26H56N	382.4413	+	17,95
Difenacoum	Pesticide	56073-07-5	C31H24O3	444.1725	+ et -	16,77
Difenoconazole	Pesticide	119446-68-3	C19H17Cl2N3O3	405.0647	+	15,45
Difethialone	Pesticide	104653-34-1	C31H23BrO2S	538.0602	-	17,63
Diflubenzuron	Pesticide	35367-38-5	C14H9ClF2N2O2	310.0321	+	14,52
Diflufenicanil	Pesticide	83164-33-4	C19H11F5N2O2	394.0741	+	15,56
Dihexadecyldimethylammonium (DDAB-C16)	Pesticide	70755-47-4	C34H72N	494.5665	+	19,5
Dimefuron	Pesticide	34205-21-5	C15H19ClN4O3	338.1146	+	12,9
Dimethachlor	Pesticide	50563-36-5	C13H18ClNO2	255.1026	+	13,42
Dimethachlor CGA 369873	Pesticide	1418095-08-5	C10H13NO4S	243.056529	+	6,95
Dimethachlor ESA	Pesticide	1231710-75-0	C13H19NO5S	301.0984	-	9,34
Dimethachlor OXA	Pesticide	1086384-49-7	C13H17NO4	251.1158	+	9,25
Dimethenamid ESA	Pesticide	205939-58-8	C12H19NO5S2	321.0705	-	10,2
Dimethenamide-P (DMTA-P)	Pesticide	163515-14-8 / 87674-68-8	C12H18ClNO2S	275.0747	+	14,03
Dimethoate	Pesticide	60-51-5	C5H12NO3PS2	228.9996	+	8,68
Dimethomorph	Pesticide	110488-70-5	C21H22ClNO4	387.1237	+	13,89
Dimethyldioctylammonium (DDAB-C8)	Pesticide	3026-69-5	C18H40N	270.3161	+	15,15
Dimethylditetradecylammonium (DDAB-C14)	Pesticide	68105-02-2	C30H64N	438.5039	+	18,77
Dimetilan	Pesticide	644-64-4	C10H16N4O3	240.1222	+	9,17
Dinitrocresol (4,6-dinitro-o-cresol)	Pesticide	534-52-1	C7H6N2O5	198.0277	-	11,54
Dinoseb	Pesticide	88-85-7	C10H12N2O5	240.0746	-	14,57
Dinotefuran	Pesticide	165252-70-0	C7H14N4O3	202.1066	+ et -	6,44
Dinoterbe	Pesticide	1420-07-1	C10H12N2O5	240.0746	-	14,83
Diphenylamine	Pesticide	122-39-4	C12H11N	169.0891	+	14,11
Diuron (Karmex)	Pesticide	330-54-1	C9H10Cl2N2O	232.0170	+	13,23
Dodecyltrimethylammonium (TMAC-C12)	Pesticide	112-00-5	C15H34N	228.2691	+	14,86
Dodine	Pesticide	2439-10-3	C15H33N3O2	287.2573	+	15,70
Enilconazole (imazalil)	Pesticide	35554-44-0	C14H14Cl2N2O	296.0483	+	12,47
Epoxiconazole	Pesticide	133855-98-8	C17H13ClFN3O	329.0731	+	14,88
Erythromycin (mixture A,B,C)	Pharmaceutique	114-07-8	C37H67NO13	733.4612	+	12,55
Ethidimuron	Pesticide	30043-49-3	C7H12N4O3S2	264.0351	+	8,39

Ethion (Diethion)	Pesticide	563-12-2	C9H22O4P2S4	383.9876	+	16,19
Ethofumesate	Pesticide	26225-79-6	C13H18O5S	286.0875	+	13,17
Ethoprophos	Pesticide	13194-48-4	C8H19O2PS2	242.0564	+	14,07
Etoxazole	Pesticide	153233-91-1	C21H23F2NO2	359.1697	+	16,85
Fenamidone	Pesticide	161326-34-7	C17H17N3OS	311.1092	+	13,38
Fenarimol	Pesticide	60168-88-9	C17H12Cl2N2O	330.0327	+	14,17
Fenbuconazole	Pesticide	114369-43-6	C19H17ClN4	336.1142	+	14,46
Fenhexamid	Pesticide	126833-17-8	C14H17Cl2NO2	301.0636	-	14,08
Fenitrothion	Pesticide	122-14-5	C9H12NO5PS	277.0174	+	13,81
Fenofibrate	Pharmaceutique	49562-28-9	C20H21ClO4	360.1128	+	16,3
Fenofibric acid	Pharmaceutique	42017-89-0	C17H15ClO4	318.0659	+	14,93
Fenoxaprop-P-Ethyl	Pesticide	71283-80-2	C18H16ClNO5	361.0717	+	15,82
Fenoxycarb	Pesticide	79127-80-3	C17H19NO4	301.1314	+	14,57
Fenpropidine	Pesticide	67306-00-7	C19H31N	273.2456	+	13,75
Fenpropimorphe	Pesticide	67564-91-4	C20H33NO	303.2562	+	14,03
Fenthion	Pesticide	55-38-9	C10H15O3PS2	278.0200	+	14,79
Fenthion-oxon	Pesticide	6552-12-1	C10H15O4PS	262.0429	+	12,87
Fenthion-oxon-sulfone	Pesticide	14086-35-2	C10H15O6PS	294.0327	+	9,32
Fenthion-oxon-sulfoxide	Pesticide	6552-13-2	C10H15O5PS	278.0378	+	9,03
Fenthion-sulfone	Pesticide	3761-42-0	C10H15O5PS2	310.0099	+	11,84
Fenthion-sulfoxide (Mesulfenfos)	Pesticide	3761-41-9	C10H15O4PS2	294.0149	+	11,53
Fenuron	Pesticide	101-42-8	C9H12N2O	164.0950	+	8,38
Fexofenadine	Pharmaceutique	83799-24-0	C32H39NO4	501.2879	+	13,14
Fipronil	Pesticide	120068-37-3	C12H4Cl2F6N4OS	435.9387	-	14,61
Fipronil-carboxamide	Pesticide	205650-69-7	C12H6Cl2F6N4O2S	453.9493	+	12,87
Fipronil-desulfinyl	Pesticide	205650-65-3	C12H4Cl2F6N4	387.9717	-	14,43
Fipronil-sulfide	Pesticide	120067-83-6	C12H4Cl2F6N4S	419.9438	-	14,77
Fipronil-sulfone	Pesticide	120068-36-2	C12H4Cl2F6N4O2S	451.9336	-	15,02
Flazasulfuron	Pesticide	104040-78-0	C13H12F3N5O5S	407.0511	+	12,86
Flecainide	Pharmaceutique	54143-55-4	C17H20F6N2O3	414.1378	-	11,24
Flocoumafen	Pesticide	90035-08-8	C33H25F3O4	542.1705	+ et -	15,32
Flonicamid	Pesticide	158062-67-0	C9H6F3N3O	229.0463	+	7,17
Florasulam	Pesticide	145701-23-1	C12H8F3N5O3S	359.0300	+	10,74

Florfenicol	Pharmaceutique	73231-34-2	C12H14Cl2FNO4S	357.0005	+	8,93
Fluazifop	Pesticide	69335-91-7	C15H12F3NO4	327.0718	+	13,15
Fluazifop-P-butyl	Pesticide	79241-46-6	C19H20F3NO4	383.1344	+	15,88
Fludioxonil	Pesticide	131341-86-1	C12H6F2N2O2	248.0397	-	13,59
Flufenacet	Pesticide	142459-58-3	C14H13F4N3O2S	363.0665	+	14,79
Flufenacet ESA	Pesticide	947601-87-8	C11H14FNO4S	275.0628	-	10,4
Flumioxazin	Pesticide	103361-09-7	C19H15FN2O4	354.1016	+	12,88
Fluopicolide	Pesticide	239110-15-7	C14H8Cl3F3N2O	381.9654	+	13,6
Fluoxastrobine	Pesticide	361377-29-9	C21H16ClFN4O5	458.0793	+	14,75
Fluoxetine	Pharmaceutique	56296-78-7	C17H18F3NO	309.1340	+	13,15
Flupyrsulfuron-methyl	Pesticide	144740-53-4	C15H14F3N5O7S	465.0566	+	14,03
Fluquinconazole	Pesticide	136426-54-5	C16H8Cl2FN5O	375.0090	+	14,03
Fluridone	Pesticide	59756-60-4	C19H14F3NO	329.1027	+	12,98
Flurochloridone	Pesticide	61213-25-0	C12H10Cl2F3NO	311.0092	+	13,87
Fluroxypyr	Pesticide	69377-81-7	C7H5Cl2FN2O3	253.9661	+	10,25
Flurtamone	Pesticide	96525-23-4	C18H14F3NO2	333.0977	+	13,99
Flusilazole	Pesticide	85509-19-9	C16H15F2N3Si	315.1003	+	15,16
Flutriafol	Pesticide	76674-21-0	C16H13F2N3O	301.1027	+	12,31
Fluxapyroxad	Pesticide	907204-31-3	C18H12F5N3O	381.0901	+	13,72
Fomesafene	Pesticide	72178-02-0	C15H10ClF3N2O6S	437.9900	-	13,29
Foramsulfuron	Pesticide	173159-57-4	C17H20N6O7S	452.1114	+	12,47
Fosthiazate	Pesticide	98886-44-3	C9H18NO3PS2	283.0466	+	11,84
Furalaxyl	Pesticide	57646-30-7	C17H19NO4	301.1314	+	13,16
Furosemide	Pharmaceutique	54-31-9	C12H11ClN2O5S	330.0077	-	10,63
Halofuginone lactate	Pharmaceutique	82186-71-8	C16H17BrClN3O3	413.0142	+ et -	11,67
Heptaminol	Pharmaceutique	543-15-7	C8H19NO	145.1467	+	5,93
Heptenophos	Pesticide	23560-59-0	C9H12ClO4P	250.0162	+	12,6
Hexa(methoxymethyl)melamine	Produit industriel	3089-11-0	C15H30N6O6	390.2227	+	12,08
Hexaconazole	Pesticide	79983-71-4	C14H17Cl2N3O	313.0749	+	15,1
Hexadecyltrimethylammonium (TMAC-C16)	Pesticide	112-02-7	C19H42N	284.3317	+	17,11
Hydrochlorothiazide	Pharmaceutique	58-93-5	C7H8ClN3O4S2	296.9645	-	5,95
Ifosfamide	Pharmaceutique	3778-73-2	C7H15Cl2N2O2P	260.0248	+	10,45
Imazamethabenz	Pesticide	100728-84-5	C15H18N2O3	274.1317	+	9,72

Imazamethabenz-methyl	Pesticide	81405-85-8	C16H20N2O3	288.1474	+	11,16
Imazamox	Pesticide	114311-32-9	C15H19N3O4	305.1376	+	9,1
Imazaquine	Pesticide	81335-37-7	C17H17N3O3	311.1270	+	11,03
Imidacloprid	Pesticide	138261-41-3	C9H10ClN5O2	255.0523	+	8,29
Imidacloprid-desnitro	Pesticide	127202-53-3	C9H11ClN4	210.0672	+	6,28
Imidacloprid-olefin	Pesticide	115086-54-9	C9H8ClN5O2	253.0367	+	8,37
Imidacloprid-urea	Pesticide	120868-66-8	C9H10ClN3O	211.0512	+	8,14
Iobitridol	Pharmaceutique	136949-58-1	C20H28I3N3O9	834.8960	+ et -	5,6
Iodosulfuron-methyl (iodosulfuron)	Pesticide	144550-06-1	C14H14IN5O6S	506.9710	+	13,39
Iohexol	Pharmaceutique	66108-95-0	C19H26I3N3O9	820.8803	+	5,69
Iothalamic acid	Pharmaceutique	2276-90-6	C11H9I3N2O4	613.7696	+	5,36
Ioxitalamic acid	Pharmaceutique	28179-44-4	C12H11I3N2O5	643.7802	+	4,91
Ioxynil	Pesticide	1689-83-4	C7H3I2NO	370.8304	-	12,67
Iprodione	Pesticide	36734-19-7	C13H13Cl2N3O3	329.0334	+	15,62
Iprovalicarb	Pesticide	140923-17-7	C18H28N2O3	320.2100	+	13,9
Irbesartan	Pharmaceutique	138402-11-6	C25H28N6O	428.2325	+	14,21
Isofenphos	Pesticide	25311-71-1	C15H24NO4PS	345.1164	+	15,26
Isophorone	Produit industriel	78-59-1	C9H14O	138.1045	+	11,06
Isoproturon	Pesticide	34123-59-6	C12H18N2O	206.1419	+	13,11
Isoproturon-desmethyl	Pesticide	34123-57-4	C11H16N2O	178.1106	+	12,17
Isoproturon-didesmethyl	Pesticide	56046-17-4	C10H14N2O	178.1106	+	11,78
Isoxaben	Pesticide	82558-50-7	C18H24N2O4	332.1736	+	13,61
Isoxadifen-ethyl	Pesticide	163520-33-0	C18H17NO3	295.1208	+	14,61
Isoxaflutole	Pesticide	141112-29-0	C15H12F3NO4S	359.0439	+	13,19
Itraconazole	Pharmaceutique	84625-61-6	C35H38Cl2N8O4	704.2393	+	16,19
Ketoconazole	Pharmaceutique	65277-42-1	C26H28Cl2N4O4	530.1488	+	13,05
ketoprofen	Pharmaceutique	22071-15-4	C16H14O3	254.0943	+	13,65
Kresoxim-methyl	Pesticide	143390-89-0	C18H19NO4	313.1314	+	14,62
Lamotrigine	Pharmaceutique	84057-84-1	C9H7Cl2N5	255.0079	+	10,02
Lasalocid A	Pharmaceutique	25999-20-6	C34H53O8	590.3819	+ et -	17,27
Lenacile	Pesticide	2164-08-1	C13H18N2O2	234.1368	+	13,03
Lenacile-KE121	Pesticide	-	C13H16N2O3	248.1161	-	9,05
Lenacile-KF313	Pesticide	1270965-07-5	C13H16N2O3	248.1161	+	10,44

Levamisol	Pharmaceutique	16595-80-5	C11H12N2S	204.0721	+	6,76
Ligustilide	Produit naturel	4431-01-0	C12H14O2	190.0994	+	13,77
Lincomycin	Pharmaceutique	859-18-7	C18H34N2O6S	406.2138	+	7,43
Linuron	Pesticide	330-55-2	C9H10Cl2N2O2	248.0119	+	13,23
Losartan	Pharmaceutique	124750-99-8	C22H22ClN6O	422.1622	-	12,81
Lufenuron	Pharmaceutique	103055-07-8	C17H8Cl2F8N2O3	509.9784	+	16,3
Maduramicin	Pharmaceutique	84878-61-5	C47H80O17	916.5396	-	17,7
Malathion	Pesticide	121-75-5	C10H19O6PS2	330.0361	+	13,58
Mecoprop	Pesticide	93-65-2	C10H11ClO3	214.0397	-	13,18
Mefenpyr diethyl	Pesticide	135590-91-9	C16H18Cl2N2O4	372.0644	+	15,62
Mefentrifluconazole	Pesticide	1417782-03-6	C18H15ClF3N3O2	397.0805	+	15,32
Melamine	Produit industriel	108-78-1	C3H6N6	126.0654	+	2,96
Meptyldinocap	Pesticide	131-72-6	C18H24N2O6	364.1634	-	17,09
Mesterolone	Pharmaceutique	1424-00-6	C20H32O2	304.2402	+	14,76
Metalaxyl	Pesticide	57837-19-1	C15H21NO4	279.1471	+	12,56
Metalaxyl CGA 108906	Pesticide	104390-56-9	C14H17NO6	295.1056	-	9,58
Metalaxyl CGA 62826	Pesticide	87764-37-2	C14H19NO4	265.1314	+	11,95
Metamitron-desamino	Pesticide	36993-94-9	C10H9N3O	187.0746	+ et -	8,6
Metamitrone	Pesticide	41394-05-2	C10H10N4O	202.0855	+	8,49
Metazachlor	Pesticide	67129-08-2	C14H16ClN3O	277.0982	+	12,24
Metazachlor-ESA	Pesticide	172960-62-2	C14H17N3O4S	323.0940	-	9,2
Metconazole	Pesticide	125116-23-6	C17H22ClN3O	319.1451	+	15,13
Methabenzthiazuron	Pesticide	18691-97-9	C10H11N3OS	221.0623	+	12,25
Methacrifos	Pesticide	62610-77-9	C7H13O5PS	240.0221	+	12,75
Methoxyfenozide	Pesticide	161050-58-4	C22H28N2O3	368.2100	+	13,96
Metobromuron	Pesticide	3060-89-7	C9H11BrN2O2	258.0004	+	12,05
Metolachlor	Pesticide	51218-45-2	C15H22ClNO2	283.1339	+	14,19
Metolachlor S-NOA	Pesticide	1418095-19-8	C14H19NO6S	329.0933	-	11,5
Metolachlor SYN542490	Pesticide	-	C15H21NO6S	343.1090	+	9,46
Metolachlor_CGA 368208	Pesticide	1173021-76-5	C11H15NO4S	257.0722	-	8,08
Metolachlor_CGA 37735	Pesticide	97055-05-5 1217465-10-5	C11H15NO2	193.1103	+	9,6
Metolachlor_CGA 49751	Pesticide	61520-54-5	C14H19NO3	249.1365	+	11,5
Metolachlor_CGA 50267	Pesticide	82508-03-0	C12H17NO2	207.1259	+	11,65

Metolachlor_SYN547977	Pesticide	693288-41-4	C15H20ClNO3	297.1132	+	12,15
Metolachlor-2-ethoxy	Pesticide	68544-97-8	C17H27NO3	293.1991	+	14,21
Metolachlor-2-hydroxy	Pesticide	131068-72-9	C15H23NO3	265.1678	+	12,92
Metolachlor-deschloro	Pesticide	126605-22-9	C15H23NO2	249.1729	+	13,86
Metolachlor-ESA	Pesticide	171118-09-5	C15H23NO5S	329.1297	-	12,27
Metolachlor-morpholinone	Pesticide	120375-14-6	C14H19NO2	233.1416	+	11,88
Metosulam	Pesticide	139528-85-1	C14H13Cl2N5O4S	417.0065	+	11,49
Metoxuron	Pesticide	19937-59-8	C10H13ClN2O2	228.0666	+	10,06
Metrafenone	Pesticide	220899-03-6	C19H21BrO5	408.0572	+	15,25
Metribuzine	Pesticide	21087-64-9	C8H14N4OS	214.0888	+	10,79
Metsulfuron Methyl	Pesticide	74223-64-6	C14H15N5O6S	381.0743	+	11,89
Microcystine LR	Cyanotoxine	101043-37-2	C49H74N10O12	994.5488	+	13,25
Molinate	Pesticide	2212-67-1	C9H17NOS	187.1031	+	13,57
Monolinuron	Pesticide	1746-81-2	C9H11ClN2O2	214.0509	+	11,66
Monuron	Pesticide	150-68-5	C9H11ClN2O	198.0560	+	10,7
Myclobutanil	Pesticide	88671-89-0	C15H17ClN4	288.1142	+	13,87
Myristyltrimethylammonium (TMAC-C14)	Pesticide	4574-04-3	C17H38N	256.3004	+	16,15
N-(3-(Dimethylamino)propyl)-3,3,4,4,5,5,6,6,7,7,8,8,8-tridecafluorooctanesulphonamide N-oxide (DPOSA)	PFAS	80475-32-7	C13H17F13N2O3S	528.0752	+	14,23
N-(3-(Dimethylamino)propyl)heptadecafluorooctanesulfonamide (AmPrFOSA)	PFAS	13417-01-1	C13H13F17N2O2S	584.0426	+	15,48
N-(3-(Dimethylamino)propyl)tridecafluoro-1-hexanesulfonamide (AmPrFHxSA)	PFAS	50598-28-2	C11H13F13N2O2S	484.0490	+	14,12
N,N,N',N'-Tetrakis(2-hydroxypropyl)ethylenediamine	Produit industriel	102-60-3	C14H32N2O4	292.2362	+	5,26
N,N-Dibenzylacetamide	Produit industriel	10479-30-8	C16H17NO	239.1310	+	13,51
N,N-Diethyl-3-methylbenzamide (DEET)	Pesticide	134-62-3	C12H17NO	191.1310	+	12,43
N,N-Dimethyl-N'-(4-methylphenyl)sulfamide (DMST)	Pesticide	66840-71-9	C9H14N2O2S	214.0776	+	11,39
N-[3-(Dimethylamino)propyl] perfluoro-n-butanesulfonamide (AmPrFBSA)	PFAS	68555-77-1	C9H13F9N2O2S	384.0554	+	12,18
Napropamide	Pesticide	15299-99-7	C17H21NO2	271.1572	+	14,14
Narasin	Pharmaceutique	55134-13-9	C43H72O11	764.5075	-	17,23
N-cyclohexylsulfamic acid	Domestique	139-05-9	C6H12NO3S	179.0616	-	6,34
Neotame	Domestique	165450-17-9	C20H30N2O5	378.2155	+ et -	12,86
N-Ethylperfluorooctanesulfonamide (FOSA-Et)	PFAS	4151-50-2	C10H6F17NO2S	526.9848	-	16,54
Niflumic acid	Pharmaceutique	4394-00-7	C13H9F3N2O2	282.0616	+	15,01

N-Methyl-2,4,6-trinitroaniline (N-Methylpicramide)	XPLO	1022-07-7	C7H6N4O6	242.0287	-	10,95
N-methylperfluorooctanesulfonamide (FOSA-Me)	PFAS	31506-32-8	C9H4F17NO2S	512.9691	-	16,26
Nonafluoro-3,6-dioxaheptanoic acid (NFDHA)	PFAS	151772-58-6	C5HF9O4	295.9731	-	11,98
Norflurazon	Pesticide	27314-13-2	C12H9ClF3N3O	303.0386	+	12,57
Norflurazon-desmethyl	Pesticide	23576-24-1	C11H7ClF3N3O	289.0230	+	12,04
Nuarimol (trimidal)	Pesticide	63284-71-9	C17H12ClFN2O	314.0622	+	13,3
Octocrylene	Ingrédient cosmetique	6197-30-4	C24H27NO2	361.2042	+	17,26
Octylisothiazolinone (OIT)	Pesticide	26530-20-1	C11H19NOS	213.1187	+	14,22
Omeprazole	Pharmaceutique	73590-58-6	C17H19N3O3S	345.1147	+	11,42
Omethoate	Pesticide	1113-02-6	C5H12NO4PS	213.0225	+	5,96
Oryzalin	Pesticide	19044-88-3	C12H18N4O6S	346.0947	-	14,33
Oxadiargyl	Pesticide	39807-15-3	C15H14Cl2N2O3	340.0381	+	15,13
Oxadiazon	Pesticide	19666-30-9	C15H18Cl2N2O3	344.0694	+	16,15
Oxadixyl	Pesticide	77732-09-3	C14H18N2O4	278.1267	+	10,47
Oxazepam	Pharmaceutique	604-75-1	C15H11ClN2O2	286.0509	+	12,56
Oxybenzone	Ingrédient cosmetique	131-57-7	C14H12O3	228.0786	+	14,38
Oxydemeton-methyl (Demeton-S-methyl-sulfoxyde)	Pesticide	301-12-2	C6H15O4PS2	246.0149	+	7,14
Oxytetracycline	Pharmaceutique	2058-46-0	C22H24N2O9	460.1482	+	8,42
Paclobutrazol	Pesticide	76738-62-0	C15H20ClN3O	293.1295	+	13,57
Paraben-isobutyl	Ingrédient cosmetique	857259	C11H14O3	194.0943	-	13,33
Paraben-methyl	Ingrédient cosmetique	99-76-3	C8H8O3	152.0473	+ et -	9,67
Paraben-propyl	Ingrédient cosmetique	-	C10H12O3	180.0786	-	12,37
Paracetamol CSR	Pharmaceutique	103-90-2	C8H9NO2	151.0633	+	6,02
Parconazole	Pharmaceutique	62973-77-7	C17H16Cl2N2O3	366.0538	+	12,06
Penconazole	Pesticide	66246-88-6	C13H15Cl2N3	283.0643	+	14,78
Pencycuron	Pesticide	66063-05-6	C19H21ClN2O	328.1342	+	15,34
Penflufen	Pesticide	494793-67-8	C18H24FN3O	317.1903	+	14,69
Penoxsulame	Pesticide	219714-96-2	C16H14F5N5O5S	483.0636	+	11,81
Perfluoro(2-ethoxyethane)sulphonic acid (PFEESA)	PFAS	113507-82-7	C4HF9O4S	315.9452	-	12,28
Perfluoro-4-methoxybutanoic acid (PFMBA)	PFAS	863090-89-5	C5HF9O3	279.9782	-	11,17
Perfluorobutanesulfonic acid (PFBS)	PFAS	375-73-5	C4HF9O3S	299.9503	-	11,68
Perfluorobutanoic acid (PFBA)	PFAS	375-22-4	C4HF7O2	213.9865	-	7,06

Perfluorodecanesulfonic acid (PFDS)	PFAS	335-77-3	C10HF21O3S	599.9311	-	16,31
Perfluorodecanoic acid (PFDA)	PFAS	335-76-2	C10HF19O2	513.9673	-	15,39
Perfluorododecanesulfonic acid (PFDoDS)	PFAS	79780-39-5	C12HF25O3S	699.9247	-	17,03
Perfluorododecanoic acid (PFDoDA)	PFAS	307-55-1	C12HF23O2	613.9609	-	16,44
Perfluoroheptanesulfonic acid (PFHpS)	PFAS	375-92-8	C7HF15O3S	449.9407	-	14,74
Perfluoroheptanoic acid (PFHpA)	PFAS	375-85-9	C7HF13O2	363.9769	-	13,9
Perfluorohexanesulfonamide (FHxSA)	PFAS	41997-13-1	C6H2F13NO2S	398.9599	-	15,18
Perfluorohexanesulfonic acid (PFHxS)	PFAS	355-46-4	C6HF13O3S	399.9439	-	13,98
Perfluorohexanoic acid (PFHxA)	PFAS	307-24-4	C6HF11O2	313.9801	-	11,97
Perfluorononanesulfonic acid (PFNS)	PFAS	68259-12-1	C9HF19O3S	549.9343	-	15,86
Perfluorononanoic acid (PFNA)	PFAS	375-95-1	C9HF17O2	463.9705	-	14,88
Perfluorooctane sulfonamide (FOSA-M)	PFAS	754-91-6	C8H2F17NO2S	498.9535	-	16,31
Perfluorooctane sulfonamido ammonium (PFOSAmS)	PFAS	73149-44-7	C14H16F17N2O2S	599.0661	+	15,45
Perfluorooctane sulfonamidoacetic acid (FOSAA)	PFAS	2806-24-8	C10H4F17NO4S	556.9590	-	16.00
Perfluorooctanesulfonic acid (PFOS)	PFAS	1763-23-1	C8HF17O3S	499.9375	-	15,34
Perfluorooctanoic acid (PFOA)	PFAS	335-67-1	C8HF15O2	413.9737	-	14,7
Perfluoropentanesulfonic acid (PFPeS)	PFAS	2706-91-4	C5HF11O3S	349.9471	-	12,2
Perfluoropentanoic acid (PFPeA)	PFAS	2706-90-3	C5HF9O2	263.9833	-	10,2
Perfluoroundecanesulfonic acid (PFUnDS)	PFAS	749786-16-1	C11HF23O3S	649.9279	-	16,17
Pethoxamid	Pesticide	106700-29-2	C16H22ClNO2	295.1339	+	14,26
Pethoxamide-MET100	Pesticide	-	C14H17NO6S	327.0777	-	9,82
Pethoxamide-MET101	Pesticide	-		309.1399	+	12,86
Pethoxamide-MET42	Pesticide	-	C16H23NO5S	341.1297	-	11,79
Phosalone	Pesticide	2310-17-0	C12H15ClNO4PS2	366.9869	+	15,17
Phosphamidon	Pesticide	13171-21-6	C10H19ClNO5P	299.0689	+	10,53
Phtalic acid (PA)	Pesticide	88-99-3	C8H6O4	166.0266	+	10,55
Picaridin	Pesticide	119515-38-7	C12H23NO3	229.1678	+	12,88
Picloram	Pesticide	1918-02-1	C6H3Cl3N2O2	239.9260	+	6,43
Picoxystrobine	Pesticide	117428-22-5	C18H16F3NO4	367.1031	+	14,53
Pinoxaden	Pesticide	243973-20-8	C23H32N2O4	400.2362	+	15,33
Pinoxaden M2 NOA 407854	Pesticide	314020-44-5	C18H24N2O3	316.1787	+	12,21
Pinoxaden M3 NOA 447204	Pesticide	2768073-70-5	C18H24N2O4	332.1736	+	12,48
Pirimiphos-Ethyl	Pesticide	23505-41-1	C13H24N3O3PS	333.1276	+	16,11

Pravastatin	Pharmaceutique	81131-70-6	C23H36O7	424.2461	-	12,68
Procymidone	Pesticide	32809-16-8	C13H11Cl2NO2	283.0167	+	14,16
Profenofos	Pesticide	41198-08-7	C11H15BrClO3PS	371.9351	+	15,83
Progesterone	Pharmaceutique	57-83-0	C21H30O2	314.2246	+	14,81
Prometon	Pesticide	1610-18-0	C10H19N5O	225.1590	+	12,26
Prometryne	Pesticide	7287-19-6	C10H19N5S	241.1361	+	13,61
Propachlor ESA	Pesticide	947601-88-9	C11H15NO4S	257.0722	+	9,04
Propachlor OXA	Pesticide	70628-36-3	C11H13NO3	207.0895	+	8,49
Propachlore	Pesticide	1918-16-7	C11H14ClNO	211.0764	+	12,27
Propamocarbe	Pesticide	24579-73-5	C9H20N2O2	188.1525	+	6,17
Propanil	Pesticide	709-98-8	C9H9Cl2NO	217.0061	+	13,3
Propaquizafop	Pesticide	111479-05-1	C22H22ClN3O5	443.1248	+	15,98
Propazine	Pesticide	139-40-2	C9H16ClN5	229.1094	+	13,11
Propazine-2-hydroxy	Pesticide	7374-53-0	C9H17N5O	211.1433	+	9,45
Propetamphos	Pesticide	31218-83-4	C10H20NO4PS	281.0851	+	14,08
Propiconazol_SYN 547889	Pesticide	-	C13H11Cl2N3O4	267.1293	+ et -	11,69
Propiconazole (Tilt)	Pesticide	60207-90-1	C15H17Cl2N3O2	341.0698	+	14,91
Propoxycarbazone	Pesticide	181274-15-7	C15H18N4O7S	398.0896	+	10,39
Propranolol	Pharmaceutique	525-66-6	C16H21NO2	259.1572	+	11,74
Propyl paraben	Ingrédient cosmetique	94-13-3	C10H12O3	180.0786	-	12,38
Propyzamide	Pesticide	23950-58-5	C12H11Cl2NO	255.0218	+ et -	13,55
Proquinazid	Pesticide	189278-12-4	C14H17IN2O2	372.0335	+	16,85
Prosulfocarb	Pesticide	52888-80-9	C14H21NOS	251.1344	+	15,94
Prosulfuron	Pesticide	94125-34-5	C15H16F3N5O4S	419.0875	+	13,22
Prothioconazole	Pesticide	178928-70-6	C14H15Cl2N3OS	343.0313	-	13,54
Pyraclostrobine	Pesticide	175013-18-0	C19H18ClN3O4	387.0986	+	15,08
Pyrazophos	Pesticide	13457-18-6	C14H20N3O5PS	373.0861	+	15,08
Pyrimethanil	Pesticide	53112-28-0	C12H13N3	199.1109	+	12,81
Pyrimicarb	Pesticide	23103-98-2	C11H18N4O2	238.1430	+	10,61
Pyrimiphos-methyl	Pesticide	29232-93-7	C11H20N3O3PS	305.0963	+	15,02
Pyriproxyfene	Pesticide	95737-68-1	C20H19NO3	321.1365	+	16,2
Pyroxsulam	Pesticide	422556-08-9	C14H13F3N6O5S	434.0620	+	11,12
Quinalphos	Pesticide	13593-03-8	C12H15N2O3PS	298.0541	+	14,53

Quinmerac	Pesticide	90717-03-6	C11H8ClNO2	221.0244	+	8,32
Quinoclamine	Pesticide	2797-51-5	C10H6ClNO2	207.0087	+	10,6
Quinoxyfene	Pesticide	124495-18-7	C15H8Cl2FNO	306.9967	+	16,35
Quizalofop-ethyl	Pesticide	76578-14-8	C19H17ClN2O4	372.0877	+	15,79
Quizalofop-p-ethyl	Pesticide	100646-51-3	C19H17ClN2O4	372.0877	+	15,29
ramipril	Pharmaceutique	87333-19-5	C23H32N2O5	416.2311	+	13,44
Ranitidine	Pharmaceutique	66357-59-3	C13H22N4O3S	314.1413	+	6,12
Rebaudioside A	Domestique	58543-16-1	C44H70O23	966.4308	-	13,78
Ricinine	Produit naturel	524-40-3	C8H8N2O2	164.0586	+	6,24
Rimsulfuron (renriduron)	Pesticide	122931-48-0	C14H17N5O7S2	431.0569	+	11,95
Saccharin	Pesticide	81-07-2	C7H5NO3S	182.9990	-	5,73
Salinomycin	Pharmaceutique	53003-10-4	C42H70O11	750.4918	+	17,81
Sebuthylazine	Pesticide	7286-69-3	C9H16ClN5	229.1094	+	13,16
Sebuthylazine-desethyl	Pesticide	37019-18-4	C7H12ClN5	201.0781	+	10,68
Secbumeton	Pesticide	26259-45-0	C10H19N5O	225.1590	+	12,26
Sedaxane	Pesticide	874967-67-6	C18H19F2N3O	331.1496	+	14,02
Simazine	Pesticide	122-34-9	C7H12ClN5	201.0781	+	10,95
Simazine-2-hydroxy	Pesticide	2599-11-3	C7H13N5O	183.1120	+	7,03
Sotalol	Pharmaceutique	3930-20-9	C12H20N2O3S	272.1195	+	6,33
Spinetoram J (major component)	Pesticide	935545-74-7	C42H69NO10	747.4921	+	15,88
Spinosyn A	Pesticide	131929-60-7	C41H65NO10	731.4608	+	15,42
Spinosyn D	Pesticide	131929-63-0	C42H67NO10	745.4765	+	15,86
Spirodiclofen	Pesticide	148477-71-8	C21H24Cl2O4	410.1052	+	16,77
Spirotetramat	Pesticide	203313-25-1	C21H27NO5	373.1889	+	14.00
Spiroxamine	Pesticide	118134-30-8	C18H35NO2	297.2668	+	13,78
Steviol glycosides	Domestique	57817-89-7	C38H60O18	804.3780	-	13,78
Sucralose	Domestique	56038-13-2	C12H19Cl3O8	396.0146	-	13,78
Sulfadiazine	Pharmaceutique	68-35-9	C10H10N4O2S	250.0524	+	7,66
Sulfamerazine	Pharmaceutique	127-79-7	C11H12N4O2S	264.0681	+	7,46
Sulfamethizole	Pharmaceutique	144-82-1	C9H10N4O2S2	270.0245	+	6,63
Sulfamethoxazole	Pharmaceutique	723-46-6	C10H11N3O3S	253.0521	+	8,86
Sulfamethoxazole N4-Acetyl	Pharmaceutique	21312-10-7	C12H13N3O4S	295.0627	+	10,05
Sulfathiazole	Pharmaceutique	72-14-0	C9H9N3O2S2	255.0136	+ et -	6,68

Sulfosulfuron	Pesticide	141776-32-1	C16H18N6O7S2	470.0678	-	12,9
Sulfoxaflor	Pesticide	946578-00-3	C10H10F3N3OS	277.0497	+	9,19
Sulfoxaflor_metabolite_X11519540	Pesticide	-	C9H10F3NO2S	253.0384	+	9,11
Sulfoxaflor_X11579457	Pesticide	946578-43-4	C9H11F3N2OS	252.0544	+	8,13
Sulfoxaflor_X11719474	Pesticide	-	C10H12F3N3O2S	295.0602	+	8,22
Tebuconazole	Pesticide	107534-96-3	C16H22ClN3O	307.1451	+	14,81
Tebufenpyrad	Pesticide	119168-77-3	C18H24ClN3O	333.1608	+	15,99
Tebutame	Pesticide	35256-85-0	C15H23NO	233.1780	+	14,15
Tebuthiuron	Pesticide	34014-18-1	C9H16N4OS	228.1045	+	11,25
Telmisartan	Pharmaceutique	144701-48-4	C33H30N4O2	514.2369	+	14,65
Tembotrione	Pesticide	335104-84-2	C17H16ClF3O6S	440.0308	+	12,42
Terbumeton	Pesticide	33693-04-8	C10H19N5O	225.1590	+	12,27
Terbumeton desethyl	Pesticide	30125-64-5	C8H15N5O	197.1277	+	10,11
Terbuthylazine	Pesticide	5915-41-3	C9H16ClN5	229.1094	+	13,47
Terbuthylazine desethyl	Pesticide	30125-63-4	C7H12ClN5	201.0781	+	11,48
Terbuthylazine desethyl-2-hydroxy	Pesticide	66753-06-8	C7H13N5O	183.1120	+	6,55
Terbuthylazine LM4 (GS40436)	Pesticide	36576-44-0	C9H15N5O3	241.1175	+	6,82
Terbuthylazine LM5 (GS16984/CGA324007)	Pesticide	309923-18-0	C7H12N4O2	184.0960	+ et -	7,29
Terbuthylazine_ LM6 (SYN545666)	Pesticide	2206682-85-9	C8H14N4O2	198.1117	+	8,13
Terbuthylazine-2-hydroxy	Pesticide	66753-07-9	C9H17N5O	211.1433	+	9,41
Terbutryn	Pesticide	886-50-0	C10H19N5S	241.1361	+	13,83
Tetraconazole	Pesticide	112281-77-3	C13H11Cl2F4N3O	371.0215	+	14,26
Tetracycline	Pharmaceutique	64-75-5	C22H24N2O8	444.1533	+	8,24
Tetramethrin	Pesticide	7696-12-0	C19H25NO4	331.1784	+	15,97
Tetrazepam	Pharmaceutique	10379-14-3	C16H17ClN2O	288.1029	+	14,47
Theobromine	Domestique	83-67-0	C7H8N4O2	180.0647	+	6,22
Theophylline	Domestique	58-55-9	C7H8N4O2	180.0647	+ et -	6,96
Thiabendazole	Pesticide	148-79-8	C10H7N3S	201.0361	+	8,36
Thiabendazole-5-hydroxy	Pesticide	948-71-0	C10H7N3OS	217.0310	+	7,46
Thiacloprid	Pesticide	111988-49-9	C10H9ClN4S	252.0236	+	9,61
Thiazafluron	Pesticide	25366-23-8	C6H7F3N4OS	240.0293	+	11,19
Thifensulfuron-methyl	Pesticide	79277-27-3	C12H13N5O6S2	387.0307	+	11,69
Thiodicarb	Pesticide	59669-26-0	C10H18N4O4S3	354.0490	+	11,87

Thiophanate ethyl	Pesticide	23564-06-9	C14H18N4O4S2	370.0769	+	12,54
Thiophanate methyl	Pesticide	23564-05-8	C12H14N4O4S2	342.0456	+	11,05
Tramadol	Pharmaceutique	27203-92-5	C16H25NO2	263.1885	+	9,71
Trenbolone	Pharmaceutique	10161-33-8	C18H22O2	270.1620	+	12,88
Triadimefone	Pesticide	43121-43-3	C14H16ClN3O2	293.0931	+	13,72
Triadimenol	Pesticide	55219-65-3	C14H18ClN3O2	295.1088	+	14,22
Triallate	Pesticide	2303-17-5	C10H16Cl3NOS	303.0018	+	16,4
Triallyl Isocyanurate	Produit industriel	1025-15-6	C12H15N3O3	249.1113	+	12,08
Triazophos	Pesticide	24017-47-8	C12H16N3O3PS	313.0650	+	13,91
Tributyl phosphate	Produit industriel	126-73-8	C12H27O4P	266.1647	+	15,85
Triclocarban	Pharmaceutique	101-20-2	C13H9Cl3N2O	313.9780	+	16,18
Tricresyl Phosphate	Produit industriel	1330-78-5	C21H21O4P	368.1177	+	16,75
Triethylphosphate	Produit industriel	78-40-0	C6H15O4P	182.0708	+	10,3
Trifloxystrobine	Pesticide	141517-21-7	C20H19F3N2O4	408.1297	+	15,54
Trifluoromethane sulfonimide (Tf2NH)	PFAS	82113-65-3	C2HF6NO4S2	280.9251	-	9,73
Tri-iso-butyl phosphate	Produit industriel	126-71-6	C12H27O4P	266.1647	+	15,72
Trimetazidine (TMZ)	Pharmaceutique	13171-25-0	C14H22N2O3	266.1630	+	7,14
Trimethoprim	Pharmaceutique	738-70-5	C14H18N4O3	290.1379	+	7,64
Trimethyl Phosphate	Produit industriel	512-56-1	C3H9O4P	140.0238	+	6,33
Trimethyloctadecylammonium (TMAC-C18)	Pesticide	112-03-8	C21H46N	312.3630	+	17,84
Trinexapac-ethyl	Pesticide	95266-40-3	C13H16O5	252.0998	+	12,47
Tri-n-pentylphosphate	Produit industriel	2528-38-3	C15H33O4P	308.2116	+	17,23
Tri-n-propyl phosphate	Produit industriel	513-08-6	C9H21O4P	224.1177	+	13,69
Tri-p-cresyl phosphate	Produit industriel	78-32-0	C21H21O4P	368.1177	+	16,76
Triphenyl phosphate	Produit industriel	115-86-6	C18H15O4P	326.0708	+	15,23
Tris(2-butoxyethyl) phosphate	Produit industriel	78-51-3	C18H39O7P	398.2433	+	16,18
Tris(2-chloroethyl) phosphate (TCEP)	Produit industriel	115-96-8	C6H12Cl3O4P	283.9539	+	11,44
Tris(pentafluoroethyl)trifluorophosphate (FAP)	PFAS	123199-69-9	C6F18P	444.9450	-	13,13
Triticonazole	Pesticide	131983-72-7	C17H20ClN3O	317.1295	+	14,41
Venlafaxin	Pharmaceutique	93413-69-5	C17H27NO2	277.2042	+	11,34
Venlafaxine-N-oxide	Pharmaceutique	1094598-37-4	C17H27NO3	293.1991	+	11,36
Warfarin	Pesticide	81-81-2	C19H16O4	308.1049	+	13,5

Notes