

## Offre de poste : Proposition de thèse de doctorat

### Développement et conception d'un nouvel outil analytique pour la prédiction de l'oxydation et de la photo dégradation des polluants émergents dans l'eau

### Informations générales

Référence de l'offre : <https://theses.doctorat-bretagneoire.fr/3mg/campagne-2024>

Lieu : Laboratoire CEISAM – UMRS CNRS 6230 Nantes

Date de publication : 23 septembre 2024

Type de contrat : Nantes Université – Ministère de l'enseignement Supérieur et de la Recherche

Durée : 36 mois à partir de la date d'embauche

Date d'embauche prévue : Entre début Octobre à fin novembre

Quotité du travail : plein temps 100%

Rémunération : entre 2100 et 2300€ par mois (un complément de rémunération mensuel est possible en fonction du nombre d'heures effectuées dans le cadre d'un contrat doctoral (enseignement))

Niveau d'études souhaité : Master / Ecole d'ingénieur

Expérience souhaitée : Stages dans un labo de recherche

### Mission

Nous attendons de la personne recrutée une implication significative dans le projet de recherche : mise au point de procédures analytique (HPLC/MS/NMR) et optimisation de dispositifs d'analyses fonctionnant en mode flux et en ligne. Des procédés durables de préparation d'échantillons facilement transférables à une utilisation industrielle de l'analyse (haut débit) seront particulièrement privilégiés. Le/la doctorant.e sera également encouragé.e à présenter ses résultats dans des manifestations nationales et internationales (conférences, ateliers, séminaires) pendant la période de doctorat. Des formations seront également proposées et choisies par le/la doctorant.e en fonction des besoins et de l'avancement du projet de thèse.

### Activités

Le projet est interdisciplinaire et combine la spectrométrie de masse (MS), HPLC, RMN, électrochimie, photochimie et la conception d'outils analytiques. Les objectifs sont d'identifier et de quantifier une série de polluants émergents (résidus médicamenteux) y compris leurs

#### CEISAM

[www.ceisam.univ-nantes.fr](http://www.ceisam.univ-nantes.fr)

Faculté des Sciences et Techniques

Université de Nantes

2 Rue de la Houssinière,

BP 92208 T : +33 (0)2 76 64 51 49

UMR CNRS 6230

produits de dégradation. Les cellules électrochimiques et photochimiques seront utilisées pour élucider les voies de dégradation d'une série d'une famille d'espèces chimiques à l'aide d'outils analytiques classiques (MS, RMN, HPLC). Ensuite, la cellule électrochimique/photochimique sera intégrée en ligne avec HPLC/MS ou RMN et les performances analytiques seront optimisées dans diverses conditions expérimentales. L'utilisation d'un plan d'expérience sera également explorée lors de la phase d'optimisation du projet résultant.

## Compétences

Nous recherchons un.e candidat.e motivé.e . Il doit s'intéresser à la chimie à l'interface de l'enjeu environnemental et sociétal. Le/la candidat.e doit être titulaire d'un master en chimie organique biochimie ou en chimie analytique (ou autre diplôme équivalent) et être capable de travailler de manière autonome sur son projet de thèse. Le/la doctorant.e doit être capable de travailler en collaboration avec d'autres membres des laboratoires partenaires.

## Contexte

Les polluants émergents issus de l'activité humaine font l'objet d'études internationales approfondies. Les impacts de ces polluants sur la santé et l'environnement ne sont que partiellement connus. De nombreuses espèces chimiques ne sont soumises à aucune réglementation en raison d'un manque d'information suffisante sur leurs concentrations dans l'environnement et leurs toxicités potentielles. Ce projet de thèse s'inscrit dans un contexte scientifique, économique et sociétal actuel. L'avancement des connaissances sur ces nouvelles substances permet donc d'élaborer des réglementations. D'une part, le sort des polluants émergents dans l'environnement fait l'objet d'une attention croissante de la part des autorités, et d'autre part la prédiction de leur mécanisme de dégradation (parfois les produits de dégradation sont plus toxiques que les molécules mères) devrait permettre la mise en place de méthodes de tri à haut débit en vue de leur classement dans la liste des substances chimiques à surveiller.

## Informations complémentaires

CV + Motivation letter will be addressed attached with a single PDF file to : [mohammed.boujtita@univ-nantes.fr](mailto:mohammed.boujtita@univ-nantes.fr) and [estelle.lebegue@univ-nantes.fr](mailto:estelle.lebegue@univ-nantes.fr) – Potential candidate will be invited to an online interview.

### Références en lien avec le projet

1- Using electrochemistry coupled to high resolution mass spectrometry for simulation of environmental degradation of recalcitrant fungicide carbendazim. Talanta 2021, 221, 121448.

### CEISAM

[www.ceisam.univ-nantes.fr](http://www.ceisam.univ-nantes.fr)

Faculté des Sciences et Techniques

Université de Nantes

2 Rue de la Houssinière,

BP 92208 T : +33 (0)2 76 64 51 49

UMR CNRS 6230

- 2- Electrochemistry-coupled to liquid chromatography-mass spectrometry-density functional theory as a new tool to mimic the environmental degradation of selected phenylurea herbicides. *Environ. Sci.: Processes Impacts* 2021, 23(10), 1600-1611.
- 3- Simulation of the environmental degradation of diuron (herbicide) using electrochemistry coupled to high resolution mass spectrometry. *Electrochim Acta* 2020, 352, 136485.
- 4- Review of advances in coupling electrochemistry and liquid state NMR. *Talanta* 2015, 136, 155-160.
- 5- Electrochemistry-mass spectrometry to study reactive drug metabolites and CYP450 simulations. *TrAC, Trends Anal. Chem.* 2015, 70, 67-73.
- 6- In Situ Ultrafast 2D NMR Spectroelectrochemistry for Real-Time Monitoring of Redox Reactions. *Anal. Chem. (Washington, DC, U. S.)* 2015, 87, 372-375.
- 7- Advances in the electrochemical simulation of oxidation reactions mediated by cytochrome P 450. *Chem. Res. Toxicol.* 2014, 27, 1652-1668.
- 8- Bussy, U.; Tea, I.; Ferchaud-Roucher, V.; Krempf, M.; Silvestre, V.; Galland, N.; Jacquemin, D.; Andresen-Bergstrom, M.; Jurva, U.; Boujtita, M.: Voltammetry coupled to mass spectrometry in the presence of isotope <sup>18</sup>O labeled water for the prediction of oxidative transformation pathways of activated aromatic ethers: Acebutolol. *Anal. Chim. Acta* 2013, 762, 39-46.
- 9- Understanding the degradation of electrochemically-generated reactive drug metabolites by quantitative NMR. *Talanta* 2013, 116, 554-558.
- 10- Acebutolol and alprenolol metabolism predictions: comparative study of electrochemical and cytochrome P450-catalyzed reactions using liquid chromatography coupled to high-resolution mass spectrometry. *Anal. Bioanal. Chem.* 2013, 405, 6077-6085.

## CEISAM

[www.ceisam.univ-nantes.fr](http://www.ceisam.univ-nantes.fr)

Faculté des Sciences et Techniques

Université de Nantes

2 Rue de la Houssinière,

BP 92208 T : +33 (0)2 76 64 51 49

UMR CNRS 6230