

## Cahier des clauses techniques particulières

CCTP – AC25LCMSMS

# CHROMATOGRAPHE A PHASE LIQUIDE COUPLE A UN SPECTROMETRE DE MASSE EN TANDEM

## SOMMAIRE

Article 1. Contexte général .....	3
Article 2. Objet du marché.....	3
Article 3. Description fonctionnelle du besoin.....	3
Article 4. Prescriptions techniques .....	4
Article 5. Programme des tests .....	6
Article 6. Installation .....	8
Article 7. Garantie et Maintenance.....	9
Article 8. Annexes.....	10

## Article 1. Contexte général

### 1.1. Présentation de l'Ineris

#### Statut

Créé en 1990, l'INERIS (Institut National de l'Environnement Industriel et des RISques) est un Établissement Public à Caractère Industriel et Commercial (EPIC), placé sous la tutelle du Ministère de l'Écologie, de l'Énergie, du Développement Durable et de la Mer.

#### Mission

Les missions de l'Ineris est de réaliser ou faire réaliser des études et des recherches permettant de prévenir les risques que les activités économiques font peser sur la santé, la sécurité des personnes et des biens ainsi que sur l'environnement, et de fournir toute prestation destinée à faciliter l'adaptation des entreprises à cet objectif.

L'unité « Méthodes et Développements en Analyses pour l'Environnement » (ANAE) de l'Institut est positionné comme laboratoire de référence dans le domaine de l'analyse des traces de polluants dans les matrices environnementales (particules atmosphériques, sédiments, boues, eaux souterraines, eaux de surfaces et biote) que ce soit pour la mise en place de politiques réglementaires, en appui aux laboratoires de routine, ou en recherche de nouvelles méthodes en vue de les porter à la normalisation.

Dans ce cadre, cette unité a les missions suivantes :

- Aider à définir les critères de performance que doivent atteindre les laboratoires intervenant dans les différents programmes de surveillance des milieux naturels et des rejets,
- Organiser, suivre et interpréter les essais inter-laboratoires qui permettent d'évaluer les performances de ces laboratoires,
- Effectuer des recherches sur les améliorations de méthodes analytiques, en particulier suivre et porter un regard critique sur les travaux de normalisation,
- Rechercher et/ou évaluer de nouvelles méthodes d'analyse relatives aux polluants émergents,
- Rechercher des gains de productivité sur ses analyses, via l'automatisation des analyses, la rationalisation des applications sur les différents appareils disponibles...etc.,
- Améliorer les connaissances sur les présences des micropolluants dans les milieux naturels.

## Article 2. Objet du marché

Le présent marché porte sur l'acquisition, la livraison ainsi que l'installation et la mise en service d'un appareil de chromatographie à phase liquide, couplé à un spectromètre de masse en tandem incluant les solutions logicielles adaptées. Le système devra pouvoir supporter un module d'extraction sur phase solide en ligne.

Il comprend aussi la formation des utilisateurs et une garantie pièces et main d'œuvre courante et un contrat de maintenance.

## Article 3. Description fonctionnelle du besoin

L'analyse des polluants organiques polaires et semi-polaires dans les extraits matriciels à un niveau de traces est préférentiellement effectuée par des appareils de chromatographie à phase liquide (LC) couplés à des spectromètres de masse (MS). La MS est réputée pour sa sensibilité et sa sélectivité. Cependant, pour obtenir l'atteinte des niveaux d'exigences de surveillance environnementale, le détecteur doit être de type tandem afin d'obtenir de meilleures limites de détection analytique.

Les domaines d'intérêt de l'unité ANAE s'orientent de manière croissante vers la mesure des composés polaires à semi-polaires dans tous les compartiments environnementaux en ciblant notamment les familles des molécules mentionnées ci-dessous :

- Les pesticides polaires et leurs métabolites,
- Les résidus médicamenteux et leurs métabolites,

- Les composés secondaires issus de réactions chimiques et/ou photochimiques dans l'air (organosulfates, organonitrates, HuLiS, produits oxygénés...),
- Les composés perfluorés,
- Les surfactants.

Etant donné la toxicité de ces polluants même à très bas niveaux, la contrainte imposée par les normes de qualité sur les limites de quantification est très forte.

Ainsi, il est nécessaire pour l'Ineris de disposer d'un appareil qui puisse permettre la quantification de molécules organiques à l'état de traces dans les milieux environnementaux. L'instrument analytique devra donc être équipé d'un spectromètre de masse de type tandem en incluant deux quadripôles et une cellule de collision afin de permettre la fragmentation des composés analysés et d'atteindre ainsi une meilleure sensibilité.

Une étape séparative est indispensable pour pouvoir, dans la mesure du possible, identifier séparément les molécules. Afin d'obtenir un pouvoir résolutif maximal, un appareil de chromatographie liquide à ultra haute pression est exigée.

Les données obtenues étant complexes, une solution logicielle complète de pilotage de l'instrument et de retraitement des données devra être fournie.

## Article 4. Prescriptions techniques

### 4.1. Performances instrumentales attendues

#### 4.1.1. Partie Chromatographie

Le candidat proposera un système UHPLC présentant *a minima* les caractéristiques suivantes : Système de chromatographie liquide comprenant :

- Une pompe binaire
- Un système de dégazage
- Un injecteur allant de 1 à plusieurs centaines de  $\mu\text{L}$
- Un passeur d'échantillon thermostaté
- Un four à colonne chromatographique (pouvant contenir au moins deux colonnes qui peuvent être sélectionnées automatiquement)

#### 4.1.2. Partie Spectrométrie de masse

Les caractéristiques requises *a minima* pour ce type de spectromètre sont les suivantes :

- Analyseur de type spectromètre de masse en tandem (deux quadripôles et une cellule de collision doivent être inclus).
- Source d'ionisation Electrospray (ESI), pouvant fonctionner en mode positif et négatif. L'alternance entre les deux modes doit être possible et rapide dans une même séquence d'injection ( $< 20\text{ms}$ ). Possibilité de nettoyage de la source à pression atmosphérique sans arrêter le système. Une source d'ionisation par ionisation chimique à pression atmosphérique (APCI) sera également proposée. Le changement de source doit être simple à réaliser.
- Détecteur basé sur un photomultiplicateur.
- Protocole d'infusion piloté par le logiciel permettant de définir les paramètres optimaux de détection.
- Système de pompage permettant d'assurer le vide primaire nécessaire au bon fonctionnement du spectromètre de masse. La pompe primaire sera placée dans un caisson antibruit équipé de systèmes de ventilation, inclus dans la prestation.
- Un générateur de gaz nécessaire au fonctionnement du spectromètre de masse devra être fourni.
- Vitesses de balayage compatibles avec le système UHPLC proposé (*a minima*  $20\,000\text{ Da/s}$ )
- Gamme de mesure de l'analyseur quadripolaire au minimum de 10 à  $2000\text{ uma}$ . Le spectromètre de masse devra fonctionner selon divers modes : balayage en mode « Multiple Reaction Monitoring » ou MRM, balayage Q1 ou Q3, balayage des ions produits, balayage des ions précurseurs, balayage en perte de neutre...
- Large gamme dynamique permettant de quantifier sur des larges plages de concentrations dans les domaines d'application précédemment décrits.

## **4.2. Informatique**

### **4.2.1. Matériel**

- Un ordinateur pour le pilotage de l'appareil et le retraitement des données permettant de traiter les échantillons sans transférer les données (voir Annexe 1 : Cas des ordinateurs destinés au pilotage d'instruments de laboratoires). Cet ordinateur devra être équipé d'un système d'exploitation Windows 10 LTSC.
- Un second ordinateur pour le retraitement des données sera proposé en option dans le cas où les logiciels de traitement de données auraient besoin d'une grande capacité de RAM pour fonctionner (afin de ne pas dédier le premier ordinateur en traitement lors d'une autre série analyses).
- Une solution de protection des données de type « double mirroring ».
- Fourniture de 2 écrans plats 24 pouces minimum par ordinateur.
- Le matériel devra satisfaire aux prérequis techniques et sécurité des systèmes d'information (voir Annexe 1).
- Les ordinateurs devront être couverts par le contrat de maintenance.

### **4.2.2. Logiciel**

- Fourniture d'un logiciel unique intégré permettant le pilotage du système chromatographique dans son intégralité et du spectromètre de masse ainsi que l'acquisition et le traitement des données.
- Pour le traitement des données, le logiciel doit intégrer des fonctionnalités d'identification, de quantification, au sein de la même interface graphique sans faire appel à des logiciels tiers.
- Fourniture d'un logiciel permettant le retraitement des données à distance via le réseau interne.
- Fourniture des mises à jour logicielles pendant la durée de garantie et pendant la durée du contrat de maintenance.
- Nombre de licences minimum fournies par le titulaire pour chaque équipement : 3 pour l'acquisition des données.
- Chiffrer en option l'audit trail.

## **4.3. Formation**

Une formation à l'utilisation de l'appareil, à sa maintenance et au logiciel de pilotage, d'une durée de 2 jours minimum sera réalisée à l'installation sur le site de l'Ineris pour 5 personnes. Cette formation permettra de fournir une prise en main de l'appareil.

Les personnes formées devront être capable à l'issue de cette formation de pouvoir utiliser l'appareil, d'avoir une connaissance basique sur sa maintenance, de créer des méthodes, mettre en place des séquences analytiques. Ils devront être également capables de pouvoir utiliser les logiciels de traitement de données. Cette formation devra inclure une partie spéciation, avec la mise en place de méthodes d'analyses prêtes à l'emploi.

L'ensemble des fonctionnalités et toutes les instructions nécessaires à l'utilisation et à la maintenance de l'instrument seront décrits dans une documentation en français.

Le candidat joint à son offre le contenu et les modalités de réalisation de l'offre de formation.

Le candidat proposera une formation complémentaire pour 5 personnes sur le site de fournisseur après quelques mois d'utilisation du LC-MS/MS.

Cette formation complémentaire visera notamment à :

- Approfondir la maîtrise des outils notamment logiciels,
- Maîtriser l'entretien et la maintenance des appareils.

Le nombre d'heures devra être précisé pour chaque formation.

Le candidat fournira également dans sa réponse à cet appel d'offres, la documentation en français de la formation qu'il propose.

## **4.4. Listes des livrables attendus**

### **4.4.1. Comparabilité des offres**

Pour faciliter la comparaison des offres, celles-ci devront faire apparaître des prix séparés pour :

- La partie chromatographie à phase liquide,
- La partie spectrométrie de masse en tandem,
- La partie informatique (hardware et software),
- L'installation,
- Les formations,
- Le support après-vente.

En option :

- L'audit-trail
- La source APCI

### **4.4.2. Cadre de réponse technique**

Les exigences techniques sont décrites dans le tableau Excel intitulé :

#### **CRT - F25LCMSMS.**

Pour le matériel sous les onglets :

- « LC »
- « MSMS »
- « Système ».

Pour la partie informatique sous l'onglet : « Informatique » et pour la partie maintenance et support sous l'onglet « SAV ».

Les réponses du candidat aux exigences techniques seront obligatoirement renseignées dans le fichier Excel joint au dossier de consultation des entreprises sous format native.

### **4.4.3. Support technique**

Le candidat fournira dans le cadre de sa réponse technique :

- Les effectifs de son laboratoire d'applications (au niveau Français et Européen), particulièrement le nombre de personnel compétent sur les solutions matérielles et logicielles fournies dans cette offre
- La liste des laboratoires équipés par son matériel dans le domaine de l'analyse environnementale (au niveau Français et Européen)
- Les protocoles de contrôle métrologique qu'il préconise pour son matériel
- Les modalités du soutien technique qu'il propose au client en termes de développement de méthodes. Il est attendu que le candidat pourra apporter un accompagnement sur la mise en œuvre et l'utilisation des logiciels particulièrement sur la thématique environnementale (matrice milieux aquatiques, air, écotoxicologique, sols).

## **Article 5. Programme des tests**

### **5.1. Analyse des échantillons**

L'offre technique du candidat comprendra les résultats d'analyse de quatre flacons. Le contenu de ces flacons est identique pour tous les candidats.

Les échantillons pourront être retirés à compter de la date de publication du DCE et jusqu'à la clôture du présent marché.

Aucun échantillon ne pourra être fourni aux candidats après cette date.

Les résultats attendus seront impérativement fournis par les candidats dans leur mémoire technique.

## 5.2.Modalités de retraits des échantillons

Les échantillons sont à retirer à l'INERIS à l'adresse suivante :

**INERIS  
PARC TECHNOLOGIQUE ALATA  
60550 VERNEUIL EN HALATTE – France**

Il est recommandé de contacter l'Ineris (Ahmad El-Masri au 03.44.55.64.51 ou sur [ahmad.el-masri@ineris.fr](mailto:ahmad.el-masri@ineris.fr)) afin de fixer un rendez-vous pour le retrait des échantillons.

Une fiche récapitulative du contenu de chaque flacon et des expériences à réaliser sur chacun d'eux sera remise au transporteur, en même temps que les échantillons.

## 5.3.Protocole de test des échantillons

L'Ineris a défini un protocole de tests sur la base de solutions et d'extraits matriciels dopés par des molécules choisies. Ces échantillons préparés par l'Ineris, seront au nombre de 5 :

- 1) Flacon 1 : Une solution de composés perfluorés à 10 ng/mL dans le méthanol (liste en annexe 2). Indiquer les MRM suivis. Cette solution pourra être diluée pour déterminer les performances de l'instrument (condition de dilution libre). Ces composés seront injectés 20 fois à un niveau correspondant à 10 fois le bruit de fond avec un volume d'injection fixe de 20 µL. Les aires et les écarts types obtenus seront rendus sur le suivi de l'ion moléculaire. Les blancs système (injection du méthanol) pour les différents composés seront à rendre.
- 2) Flacon 2 : Une solution d'hydrocarbures aromatiques polycycliques (HAP) et dérivés à 1 µg/mL dans l'acétonitrile (liste en annexe 3). Indiquer les MRM suivis. Cette solution pourra être diluée pour déterminer les performances de l'instrument (condition de dilution libre). Ces composés seront injectés 20 fois à un niveau correspondant à 10 fois le bruit de fond, avec un volume d'injection fixe de 20 µL. Les aires et les écarts types obtenus seront rendus sur le suivi de l'ion moléculaire. Les blancs système pour les différents composés seront à rendre.
- 3) Flacon 3 : Un échantillon réel dilué à 50% dans le méthanol avec certains de ces composés perfluorés sera également fourni. Le candidat devra rendre les aires et les concentrations déterminées pour ces composés avec 10 injections, avec un volume d'injection fixe de 20µL. Les résultats sont à rendre en étalonnage externe.
- 4) Flacon 4 : Un extrait de prélèvement atmosphérique contenant des HAP dérivés est fourni. Le candidat devra rendre les aires et les concentrations déterminées pour ces composés avec 10 injections, avec un volume d'injection fixe de 20 µL. Les résultats sont à rendre en étalonnage externe.

## 5.4.Présentation des résultats

La réponse du candidat à ce programme de tests devra être jointe à son offre commerciale et comporter à minima :

- Les conditions LC utilisées pour chaque expérience (colonnes, paramètres de la colonne, débits, températures, phase mobile, ...)
- Les conditions spectrométriques (transitions utilisées, énergies de source et de collision, dwell time, ...)

Les paramètres suivants seront également indiqués :

- Le volume d'échantillon injecté
- Si l'échantillon a été dilué au préalable ou lors de l'injection
- Les temps de rétention
- Les aires mesurées sans lissage
- La hauteur des pics
- Le rapport signal/bruit en *peak to peak*
- La concentration déterminée par le modèle
- Si l'intégration a été modifiée manuellement
- Les gammes de linéarité (avec le  $r^2$  et la pondération)

Pour les essais de répétabilité, l'écart type sur :

- Les temps de rétention
- Les aires pour chaque injection

Pour toutes les expériences, les chromatogrammes représentatifs (sans lissage) seront à fournir.

## **Article 6. Installation**

### **6.1. Déploiement**

Le soumissionnaire devra expliciter sa méthode d'accompagnement lors du déploiement.

Cette proposition décrira :

- Le planning et l'organisation de l'installation
- La formation des personnels du laboratoire
- L'accompagnement dans la démarche de validation de méthodes notamment en fournissant les documents et les outils nécessaires.

Le soumissionnaire devra proposer un calendrier de déploiement et une méthode de gestion de projet, ce document sera inclus dans son offre.

Une visite de pré installation est obligatoire afin de vérifier la capacité du service à accueillir l'instrument. A l'issue de cette visite, le soumissionnaire précisera sa capacité ou non à installer l'instrument sans travaux sur le réseau électrique et/ou sur les réseaux informatiques.

Le titulaire fournira l'ensemble du matériel nécessaire à l'installation que ce soit électrique, fluide ou informatique :

- Concernant la fluide, tous manodétendeurs et tous raccords nécessaires à l'installation
- Concernant la partie électrique, les raccords nécessaires et les puissances d'alimentation
- Concernant la partie informatique, tous les besoins en mobilier dédié (colonnes informatiques) devront être couverts par l'offre du titulaire.

### **6.2. Certifications**

Les soumissionnaires devront indiquer si leur Société ou Laboratoire est certifié (joindre les justificatifs de l'Assurance Qualité).

Les soumissionnaires devront indiquer le numéro de certification du fabricant (EN/46001, EN/29001 ou ISO/9001, EN/29002 ou ISO/9002) et préciser le domaine d'application de cette certification.

### **6.3. Livraison et réception**

Le fournisseur s'engage à fournir :

- Le manuel d'utilisation de l'appareil en français avec la check-list opérateur par appareil
- Le manuel technique en français et un schéma ainsi que le catalogue des pièces détachées et les check-lists de maintenance
- Les documents de bon fonctionnement des matériels après mise en service
- Le certificat de conformité selon la norme en vigueur

Le lieu de livraison est :

**INERIS**  
**Parc Technologique ALATA**  
**BP2 – 60550 Verneuil-en-Halatte.**

Le candidat précisera dans son offre le délai de mise en service effective de l'équipement dans nos locaux sur lequel il s'engage.

- L'installation sera supervisée pour la partie instrumentation par un Ingénieur de l'unité ANAE.
- L'installation des appareils sera effectuée par le candidat retenu.
- Les matériels devront être conformes aux normes en vigueur en matière de certification.
- La manutention, ainsi que les éventuelles détériorations causées lors de la livraison et du montage de l'appareil seront à la charge du titulaire du marché.
- La réception du matériel comprend la livraison, l'installation et la formation initiale des opérateurs.
- Le matériel fera l'objet d'une réception définitive (installation, mise en service en routine, connexions informatiques opérationnelles, formation de 1er niveau et validation des méthodes) par le responsable du service et l'ingénieur responsable de la consultation.



La réception définitive est également soumise à une procédure de réception technique effectuée par le constructeur qui consiste en la vérification de la conformité de l'équipement à ses spécifications. Le constructeur indiquera dans sa réponse, la nature de ces tests de vérification de la conformité. Ces tests comprendront *a minima* la reproduction des résultats obtenus sur les échantillons fournis pour les tests de l'appel d'offre. (cf Article 5).  
Sous réserve que les résultats des tests obtenus sur les échantillons pour l'appel d'offres soient reproduits sur l'équipement installé à l'Ineris, la réception sera concrétisée par un procès-verbal de réception définitive, cosigné par le responsable de l'unité et l'ingénieur commercial responsable de cette offre.

## **Article 7. Service Après-Vente et Maintenance**

### **7.1.SAV**

Le candidat communique en réponse à l'appel-d 'offres :

- Les effectifs du Service Après-Vente ; en particulier le nombre d'ingénieur rattachés au SAV en LC/MSMS
- Les éléments de son matériel qui doivent faire l'objet d'un remplacement régulier
- La fréquence, la nature, la durée, le coût des interventions nécessaires au remplacement de ces éléments, les solutions transitoires possibles en cas de pannes bloquantes de longue durée
- Les délais des interventions sur site, dans le cas d'un contrat de maintenance et le cas contraire
- La présence d'un support SAV téléphonique ou par mail et les délais de réponse

### **7.2.Maintenance**

Au terme de la période de garantie, l'INERIS se réserve le droit de conclure ou non un contrat de maintenance avec le titulaire du marché.

Le candidat précisera la nature et le coût des différentes options de contrat de maintenance qu'il peut proposer, sachant que les exigences minimales sont :

- Une visite de maintenance préventive par an
- Pour les opérations de maintenance curative : un délai d'intervention maximum de 48 heures sauf cas de force majeure. A défaut du respect de ce délai, les pénalités mentionnées au CCAP seront appliquées.
- Le candidat fournira également la liste des pièces consommables, non couvertes par les contrats de maintenance, avec le tarif correspondant affecté d'une remise.

Pour le cas où l'INERIS choisirait de ne pas souscrire de contrat de maintenance, préciser :

- Le coût horaire du déplacement du SAV
- Le délai d'intervention moyen.

## Article 8. Annexes

### 8.1. Annexe 1 – Prérequis techniques et sécurité des systèmes d'information

Afin de préserver l'intégrité du Système d'Information et garantir au maximum sa sécurité contre les attaques externes et internes, il est primordial d'appliquer les bonnes pratiques de sécurité informatique de l'entreprise. L'ensemble des règles en vigueur en matière de sécurité informatique à l'Ineris est détaillé dans la PSSI<sup>1</sup> (Politique de Sécurité des Systèmes d'Information) et dans la charte informatique.

Tous les matériels, logiciels et processus associés fournis par le prestataire doivent donc respecter les principes définis et dont les principaux sont exposés ci-dessous.

Les principaux prérequis à respecter pour accéder au réseau informatique de l'Ineris sont les suivants :

- Pas d'utilisation, sur une machine, de comptes avec droits d'administration (en cas de besoin de déroger à cette règle, l'Ineris dispose d'une surcouches logicielle permettant la gestion de la granularité des droits sur des applicatifs définis)
- Utilisation d'un antivirus à jour (McAfee Endpoint Security)
- Intégration à l'annuaire Active Directory de l'Ineris – application des paramètres de sécurité des postes de l'Ineris (GPO)
- Utilisation d'un certificat machine pour l'accès au réseau (norme d'authentification 802.1x)
- Respect de la politique de mots de passe<sup>2</sup>

Il est également capital de porter une attention particulière sur les points suivants :

- Mise à jour des logiciels (contrats de maintenance) ;
- Mise à jour de l'OS (gestion de l'obsolescence du système d'exploitation – montées de version de Windows 10)
- Utilisation de comptes nommés (pas de comptes génériques) ;
- Confidentialité des mots de passe ;
- Limitation au strict nécessaire et contrôle de l'utilisation des supports de stockage amovible

#### Cas des ordinateurs destinés au pilotage d'instruments de laboratoires

Pour permettre aux utilisateurs de l'Ineris de disposer des accès réseaux nécessaires à leurs travaux, les machines de pilotage doivent respecter les contraintes de sécurité définies ci-dessus.

Pour garantir le bon fonctionnement des ordinateurs de pilotage dans une configuration compatible avec les systèmes d'information de l'Ineris, il est nécessaire de procéder à la vérification du bon fonctionnement des ordinateurs de pilotage et de traitement fournis au travers du marché dans une configuration validée par la DSI de l'Ineris.

Pour cela, avant mise en service de l'instrument, :

- 1) Le Titulaire du marché envoie à l'Ineris l'ordinateur au moins 3 semaines avant la date d'installation prévue,
- 2) L'Ineris configure cette machine pour la doter des logiciels de l'Ineris et l'intégrer à son réseau ;
- 3) Si besoin, l'Ineris renvoie la machine au fournisseur pour valider la configuration avec l'instrument ;
- 4) Lors de la mise en service dans les locaux de l'Ineris, le bon fonctionnement est vérifié sur cette machine, alors conforme et intégrée au Système d'Information de l'Ineris.

---

<sup>1</sup> PSSI : Politique de Sécurité des Systèmes d'Information (DI-1353)

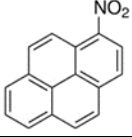
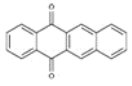
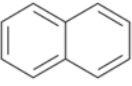
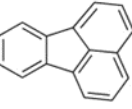
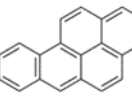
<sup>2</sup> Politique de mots de passe (DI-1365)

## 8.2. Annexe 2 – Liste des composés perfluorés

Nom	Abréviation	CAS
Acide perfluorobutanoïque	PFBA	375-22-4
Acide perfluoropentanoïque	PFPeA	2706-90-3
Acide perfluorohexanoïque	PFHxA	307-24-4
Acide perfluoroheptanoïque	PFHpA	375-85-9
Acide perfluorooctanoïque	PFOA	335-67-1
Acide perfluorononanoïque	PFNA	375-95-1
Acide perfluorodécanoïque	PFDA	335-76-2
Acide perfluoroundécanoïque	PFUnDA	2058-94-8
Acide perfluorododécanoïque	PFDoDA	307-55-1
Acide perfluorotridécanoïque	PFTriDA	72629-94-8
Acide perfluorobutanesulfonique	PFBS	375-73-5/(59933-66-3, forme hydrate))
Acide perfluoropentanesulfonique	PFPeS	2706-91-4
Acide perfluorohexane sulfonique	PFHxS	355-46-4
Acide perfluoroheptane sulfonique	PFHpS	375-92-8
Acide perfluorooctane sulfonique (molécule neutre)**	PFOS	1763-23-1
Acide perfluorononane sulfonique	PFNS	68259-12-1
Acide perfluorodecane sulfonique	PFDS	335-77-3
Acide perfluoroundécane sulfonique	PFUnDS	749786-16-1
Acide perfluorododécane sulfonique	PFDoDS	79780-39-5
Acide perfluorotridécane sulfonique	PFTriDS	791563-89-8
Acide 6,2 Fluorotélomère sulfonique	6:2 FTS	27619-97-2
Acide perfluorooctanate sulfonamide	PFOSA	754-91-6
Acide perfluorotétradécanoïque	PFTeDA	376-06-7
Acide 1H,1H,2H,2H-perfluorohexane sulfonique	4:2FTS	757124-72-4
Acide 1H,1H,2H,2H-perfluorodécane sulfonique	8:2FTS	39108-34-4
ADONA/DONA	(A)DONA	919005-14-4 (958445-44-8)
Acide dimère de l'oxyde d'hexafluoropropylène	HFPO-DA GenX	13252-13-6 (62037-80-3)
9-chlorohexadecafluoro-3-oxanonane-1-sulfonic acid (F-53B Major)	9Cl-PF3ONS	756425-58-1
Perfluorooctadecanoic acid	PFODA	16517-11-6
10:2 fluorotelomer sulfonic acid	10:2 FTS	120226-60-0

### 8.3. Annexe 3 - Liste des HAP et dérivés

- Liste des composés

Nom	Numéro CAS	Masse molaire g/mol	Formule brute	Formule développée
1-Nitropyrene	5522-43-0	247.25	C <sub>16</sub> H <sub>9</sub> NO <sub>2</sub>	
5,12-Naphthacenequinone	1090-13-7	258.3	C <sub>18</sub> H <sub>10</sub> O <sub>2</sub>	
Naphtalène	91-20-3	128.17	C <sub>10</sub> H <sub>8</sub>	
Fluoranthène	206-44-0	202.25	C <sub>16</sub> H <sub>10</sub>	
Benzo[a]pyrène	50-32-8	252.3	C <sub>20</sub> H <sub>12</sub>	

- Exemple de conditions opératoires de la littérature :

Publi	Instruments	Colonne	Conditions LC	Conditions MS	Transitions	1-nitropyrene	5,12-Naphthacenequinone	naphthalene	fluoranthene	benzo(a)pyrene
Fujiwara et al (2014)	Quattro Premier XE Micromass/UPLC acquity Waters	Waters Acquity BEH C18 (50mmx2.1mmx1.7µm) 35°C	A: MeOH 0.1%AF B: ACN 0.1%AF Débit :0.15ml/min	APCI positif Source 120°C Corona 3µA Extractor 4V N2 400°C 200Lh Collision Ar 0.2mlmin	[M+] > Fils ou [M+H]+ > Fils @ Cone V/Coll V	247 > 217 @ 19V/16V 247 > 189 @ 19V/30V 247 > 201 @ 19V/50V	258 > 202 @ 30V/20V 258 > 230 @ 30V/20V			
Wang et al (2021)	AB Sciex API4000/U3000 Thermo	Thermo Hypersil Green PAH 150mmx3mmx3µm 30°C	A: EAU B:MeOH Débit variable de 0.7 à 1 mL/min	APCI Negatif source 450°C Nenulizer current 5µA N2 curtain gas 20 psi, nebulizer 42psi,	[M+e]- ou [M-H+O]- ou [M-H]- > Fils @ DP V/EP V/CE V/CXP V	262 > 232 @ 40V/ 10V/ 30V/ 15V 247 > 217 @ 30V/ 10V/ 32V/ 15V				
Changtogn Hao, ADVION	Advion expression Compact Mass Spectrometer/Agilent 1220	Agilent Eclipse PAH 100 x 2.1mm, 3.5µm	A: Eau ultrapure B: ACN Débit : 0.20ml/min	APCI Positif MS Capillary Temperature (°C): 100 Capillary Voltage (V): 180 Source voltage offset (V): 20 Source voltage span (V): 0 Gas Temperature (°C): 400 Corona Discharge (uA): 5	[M']+			128	202	252
Takeo Sakuma, AB Sciex Publication number: 4520411-01	AB SCIEX 4000 QTRAP/UPLC NEXERA SHIMADZU	GL Science Inertsil ODS-P HP 250mm x 2.1 mm x 3µm 20°C	A: Eau ultrapure B: ACN Débit : 0.50ml/min	APCI positif MS/MS	[M']+ > fils ou [M+H]+ > Fils			128 > 78 128 > 102	202 > 150 202 > 200	252 > 224 252 > 250

Guang-Wen Lien et Al (2007)	Thermo TSQ 7000/Waters HPLC 616	Restek Pinnacle II PAH 250mm x 4.6mm x 5 µm 27°C	A: Eau ultrapure B: ACN Débit : 1ml/min	APCI positif MS/MS Capillary Temp 200°C Vaporizer temp 420°C Corona 3µA Sheath gas N2 80psi	[M] <sup>+</sup> > fils @ Col eV				202 > 150 @62 eV 202 > 174 @62 eV	252 > 224 @74 eV 252 > 200 @74 eV
O'Connell et al (2013)	Agilent 1956B/Agilent 1100	Agilent Phenyl 150mm x 3mm x 3µm 42°C	A: Eau ultrapure B: dichloromethane/MeOH 1:99 Débit : 0.5ml/min	APCI négatif MS gas temp 350°C vaporizer temp 400°C drying gas 5L/min nebulizer pressure 50psi capillary 4,5 kV corona 10µA	[M] <sup>-</sup> @ Fragmentor Voltage eV		258 @ 110 eV			
Alejandro Mandelli et Al (2023)	Quattro Premier XE Micromass/UPLC acquity Waters	Waters BEH Phenyl 100 x 2.1 mm x 1.7µm 30°C	A: Eau ultrapure + 0.1%AF B: ACN + 0.1%AF Débit : 0.15 à 0.25 ml/min	APCI positif MS/MS Source 120°C Corona 3µA Extractor 4V N2 400°C 200Lh Collision Ar 0.18ml/min	[M <sup>+</sup> ] > Fils ou [M+H] <sup>+</sup> > Fils @ Cone V/Coll V	248 > 202 @ 30V/25V 248 > 190 @ 30V/30V 248 > 218 @ 30V/16V	259 > 203 @ 10V/23V 259 > 231 @ 10V/21V 259 > 242 @ 10V/35V			

Publi	Lien
Fujiwara et Al (2014)	<a href="https://doi.org/10.1016/j.microc.2014.04.004">https://doi.org/10.1016/j.microc.2014.04.004</a>
Wang et Al (2021)	<a href="https://doi.org/10.1016/j.chroma.2020.461738">https://doi.org/10.1016/j.chroma.2020.461738</a>
Changtogn Hao, ADVION	<a href="https://theanalyticalscientist.com/fileadmin/tas/issues/App_Notes/02417-advion-app-note-supplied.pdf">https://theanalyticalscientist.com/fileadmin/tas/issues/App_Notes/02417-advion-app-note-supplied.pdf</a>
Takeo Sakuma, AB Sciex Publication number: 4520411-01	<a href="https://www.sciex.com/content/dam/SCIEX/pdf/brochures/PAH_seafood_water_QTRAP4k_4520411.pdf">https://www.sciex.com/content/dam/SCIEX/pdf/brochures/PAH_seafood_water_QTRAP4k_4520411.pdf</a>
Guang-Wen Lien et Al (2007)	<a href="https://doi.org/10.1002/rcm.3267">https://doi.org/10.1002/rcm.3267</a>
O'Connell et al (2013)	<a href="https://doi.org/10.1007/s00216-013-7319-x">https://doi.org/10.1007/s00216-013-7319-x</a>
Alejandro Mandelli et Al (2023)	<a href="https://doi.org/10.3390/foods12112205">https://doi.org/10.3390/foods12112205</a>

**Institut national de l'environnement industriel et des risques**

Parc technologique Alata • BP 2 • F-60550 Verneuil-en-Halatte

03 44 55 66 77 • [ineris@ineris.fr](mailto:ineris@ineris.fr) • [www.ineris.fr](http://www.ineris.fr)