



HAL
open science

Réactions d'ionisation sélectives pour la détection de composés organiques volatils présents à l'état de trace dans l'air

Christophe Dehon, Helene Mestdagh, Michel Heninger, Joël Lemaire

► **To cite this version:**

Christophe Dehon, Helene Mestdagh, Michel Heninger, Joël Lemaire. Réactions d'ionisation sélectives pour la détection de composés organiques volatils présents à l'état de trace dans l'air. 24e Journées françaises de spectrométrie de masse (JFSM) Spectrométrie de masse et analyse protéomique (SMAP), Sep 2007, Pau, France. Livre des abstracts. hal-04216457

HAL Id: hal-04216457

<https://hal.science/hal-04216457>

Submitted on 24 Sep 2023

HAL is a multi-disciplinary open access archive for the deposit and dissemination of scientific research documents, whether they are published or not. The documents may come from teaching and research institutions in France or abroad, or from public or private research centers.

L'archive ouverte pluridisciplinaire **HAL**, est destinée au dépôt et à la diffusion de documents scientifiques de niveau recherche, publiés ou non, émanant des établissements d'enseignement et de recherche français ou étrangers, des laboratoires publics ou privés.

Réactions d'ionisation sélectives pour la détection de composés organiques volatils présents à l'état de trace dans l'air.



Christophe Dehon¹, Helene Mestdagh¹, Michel Heninger³, Joël Lemaire¹

1. Laboratoire de Chimie Physique, Bât. 350, Université Paris-Sud, Orsay, France
3. AlyXan, Bat 207 B, Université Paris Sud, Orsay, France.



Spectromètre de masse FTICR transportable

Dans un Spectromètre FTICR les ions sont piégés par un champ magnétique intense et homogène

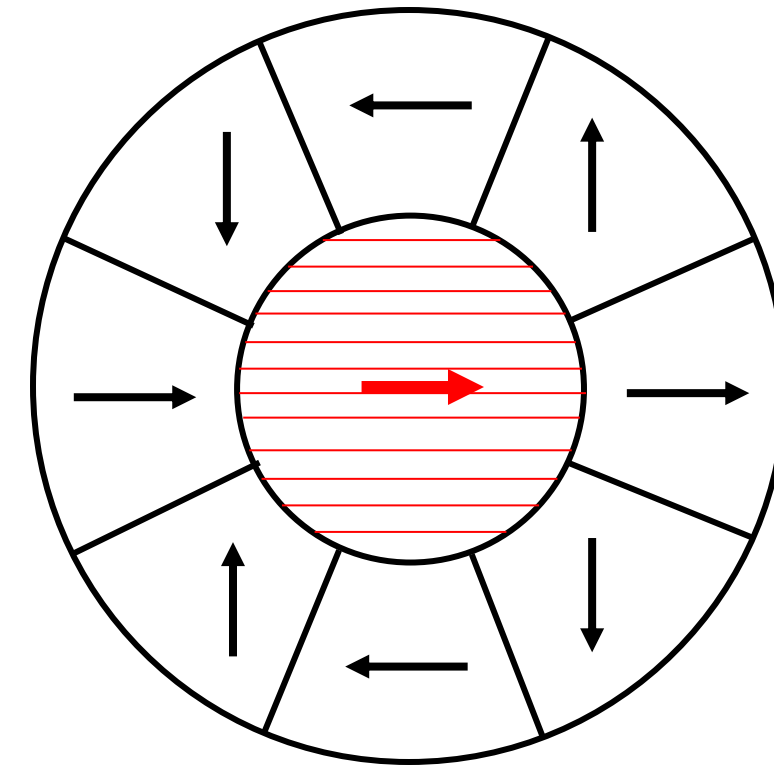
Avantages de l'utilisation d'un aimant permanent :

- compacité : (60 x 80 x 120) cm - poids raisonnable : moins de 150 kg - transportabilité
- Aucune alimentation électrique requise pour l'aimant, pas de fluide de refroidissement,
- Aucune maintenance pour l'aimant

Design de l'aimant : Cylindre de Halbach

- Champ magnétique nominal : 1.1 Tesla
- Bonne Homogénéité du champ : variation < 10⁻³ dans la cellule

Resolution en masse de 70000 @ 131 uma obtenue avec cette configuration.



MICRA

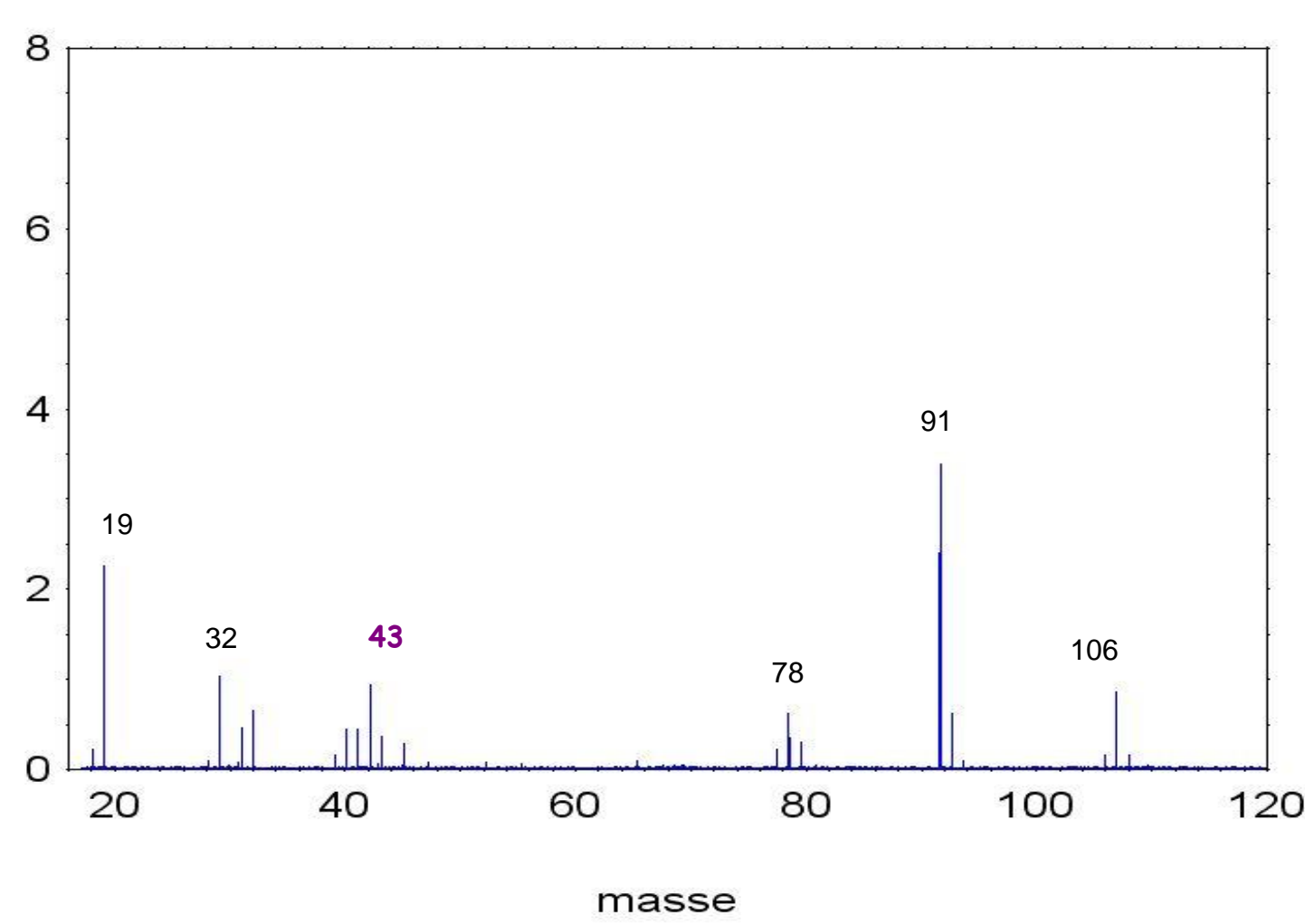
Mobile ICR Analyzer



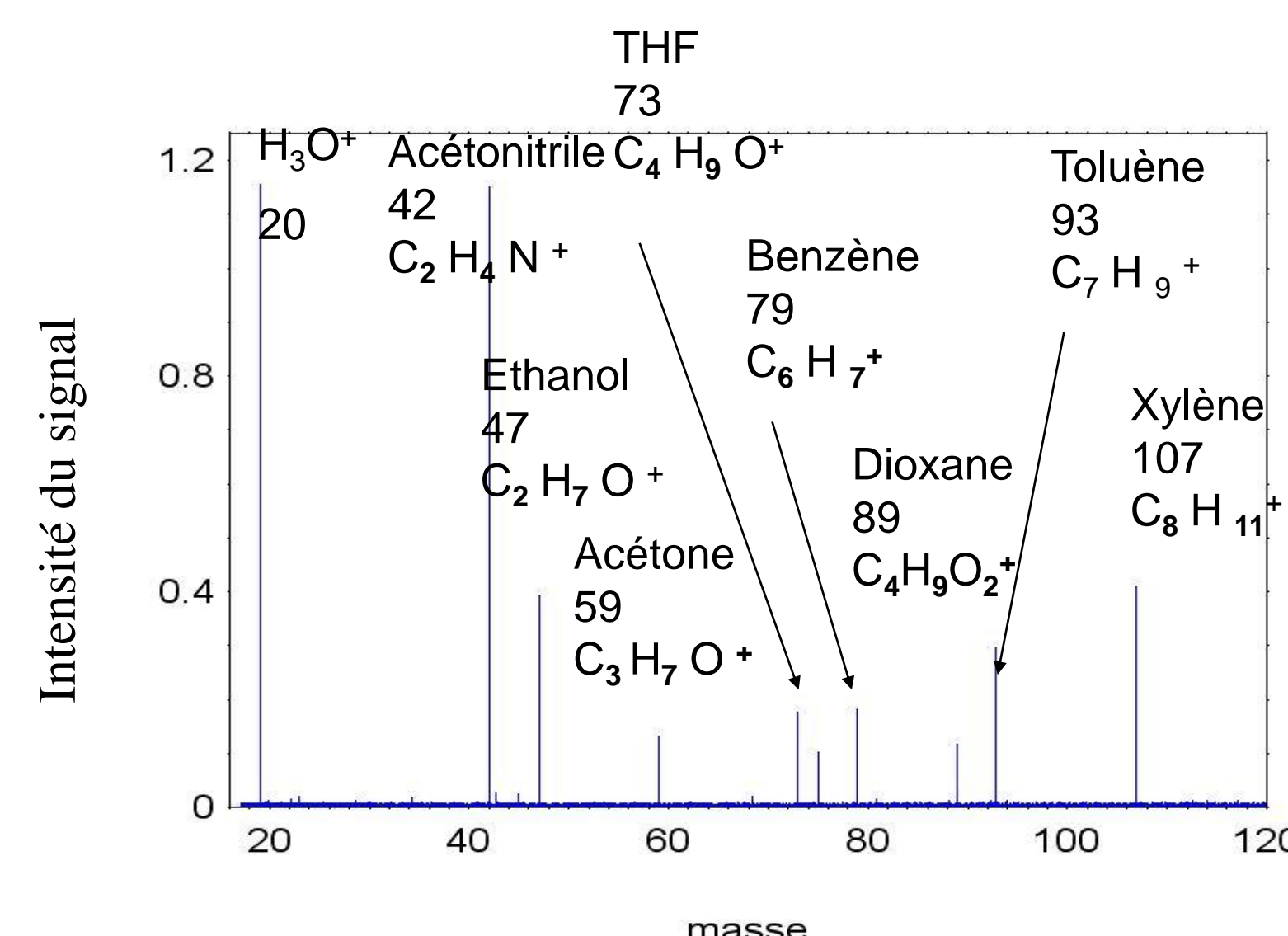
Réactivité de composés sulfurés avec des ions du diméthyléther sélectionnés en masse

Analyse d'un mélange de 8 solvants usuels : intérêt de l'ionisation chimique

Spectre obtenu par impact électronique



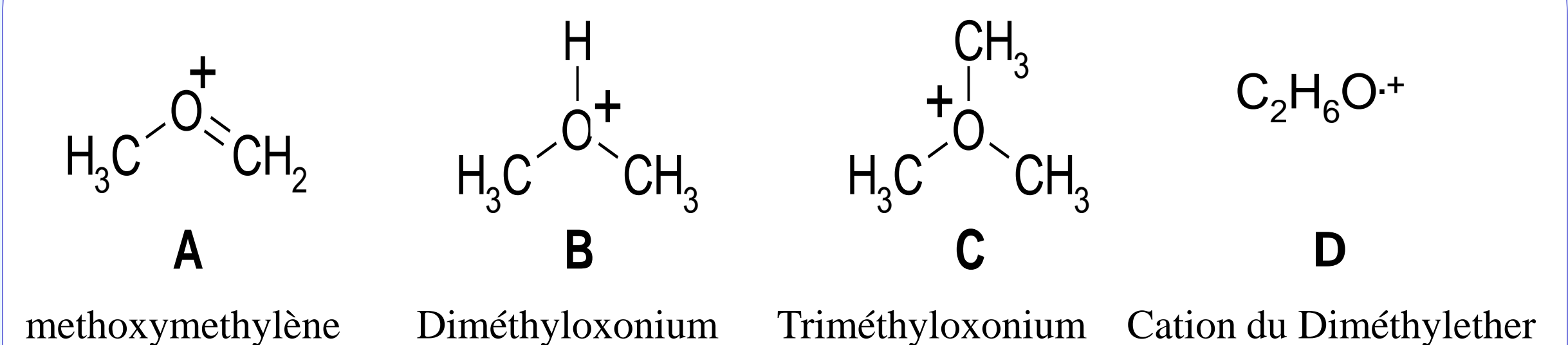
Spectre obtenu par protonation avec H₃O⁺



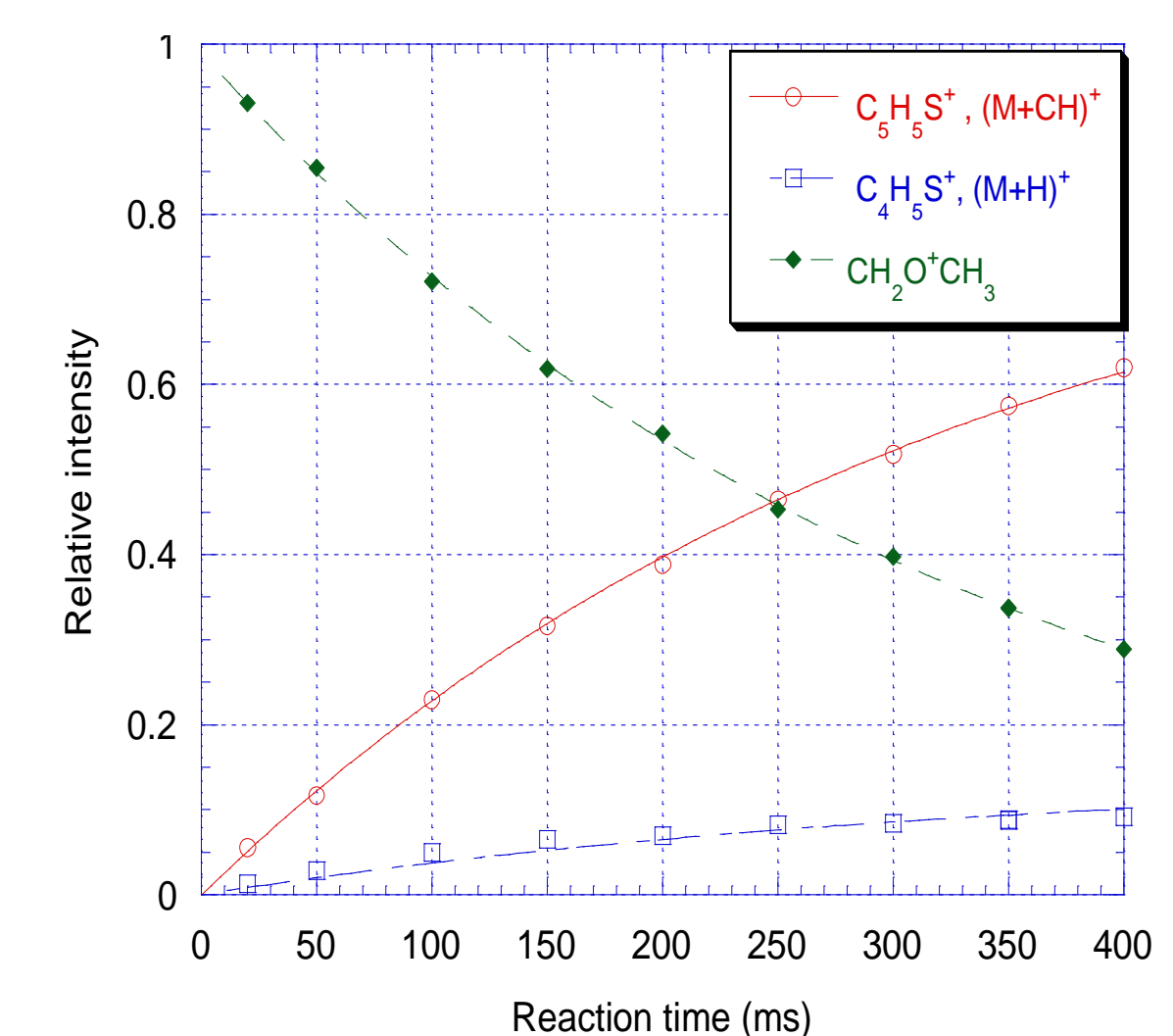
Chaque constituant donne 1 ion caractéristique

Pour pouvoir analyser quantitativement un mélange complexe, il faut que la réaction du précurseur avec les analytes soit rapide, douce (peu exothermique), sélective (ne réagit pas avec le solvant ou la matrice) et que sa constante cinétique avec l'analyte soit connue.

Ions obtenus après ionisation du diméthylether par impact électronique :



Etude de la réactivité de ces cations sur quelques dérivés sulfurés : Réaction d'alkylation $M \rightarrow MCH_3^+$

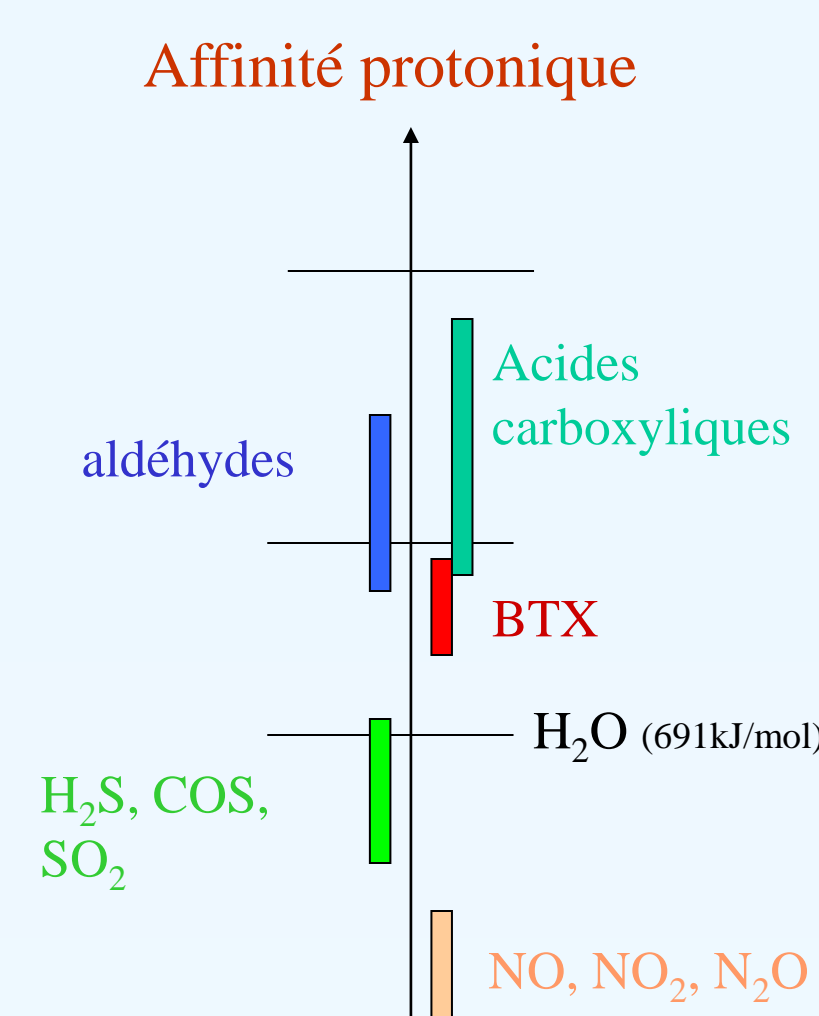


Etude cinétique de l'ion A sur le thiophène.

Utilisation de l'affinité protonique des espèces pour détecter les composés carbonyles à l'état de trace

Un des inconvénients de la FTICR est sa faible dynamique. L'utilisation de l'ion H₃O⁺ comme précurseur est donc difficile quand la molécule d'intérêt est minoritaire devant les autres espèces réagissant avec H₃O⁺. Pour l'analyse de ces composés en temps réel, nous utilisons de nouvelles réactions ion-molécule :

- transfert de proton
- autres types de réaction



Etude de la réactivité de l'acétaldéhyde pour détecter les aldéhydes plus lourds dans les gaz d'échappement

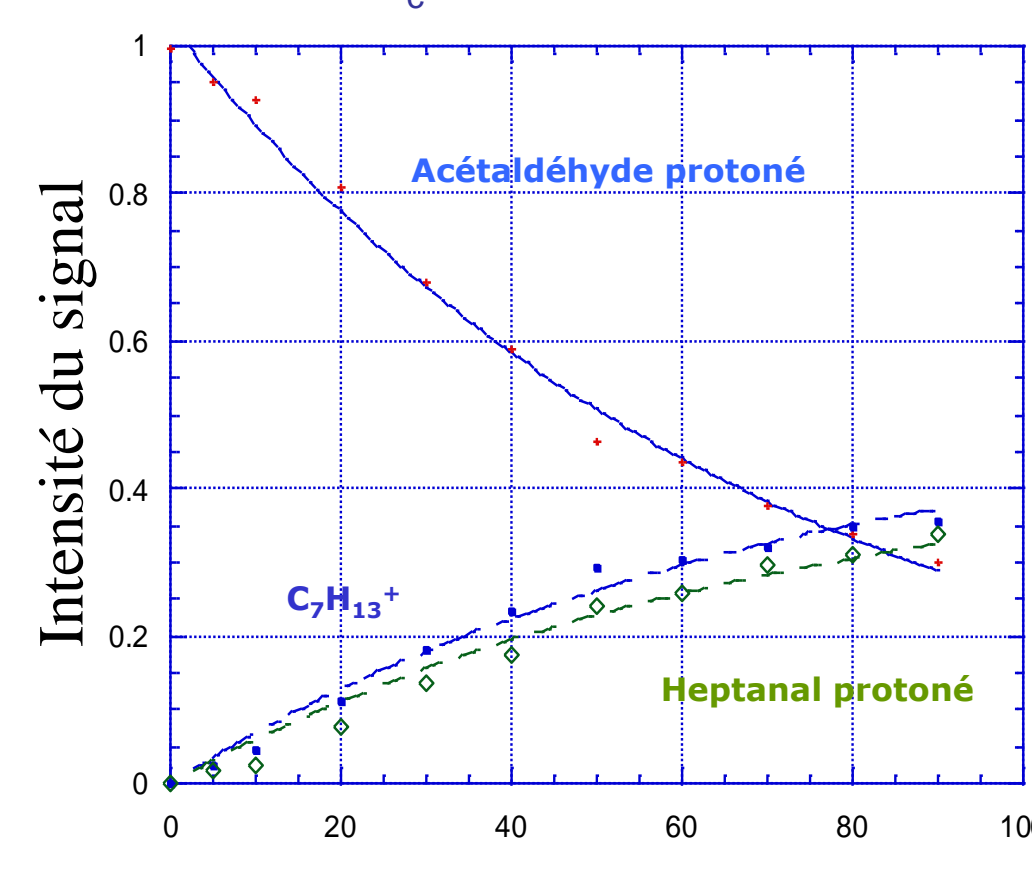
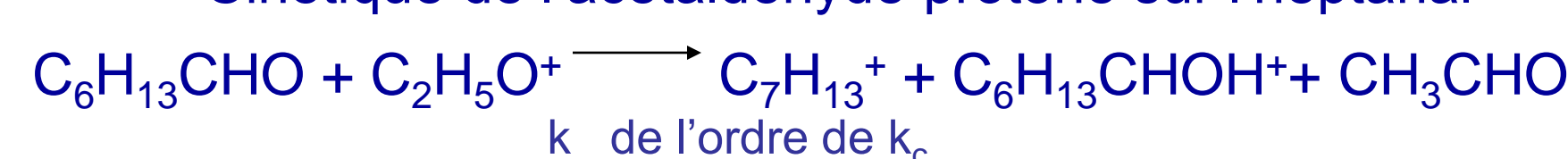
Aldéhyde	Affinité protonique en kJ/mol
benzaldéhyde	834
propénaldéhyde	831
Propanal-2-méthyl	797
butanal	792
acétaldéhyde	769
formaldéhyde	713

L'affinité protonique des aldéhydes croît avec leur masse

L'acétaldéhyde permet d'ioniser sélectivement les aldéhydes les plus lourds dans les gaz d'échappement



Cinétique de l'acétaldéhyde protoné sur l'heptanal

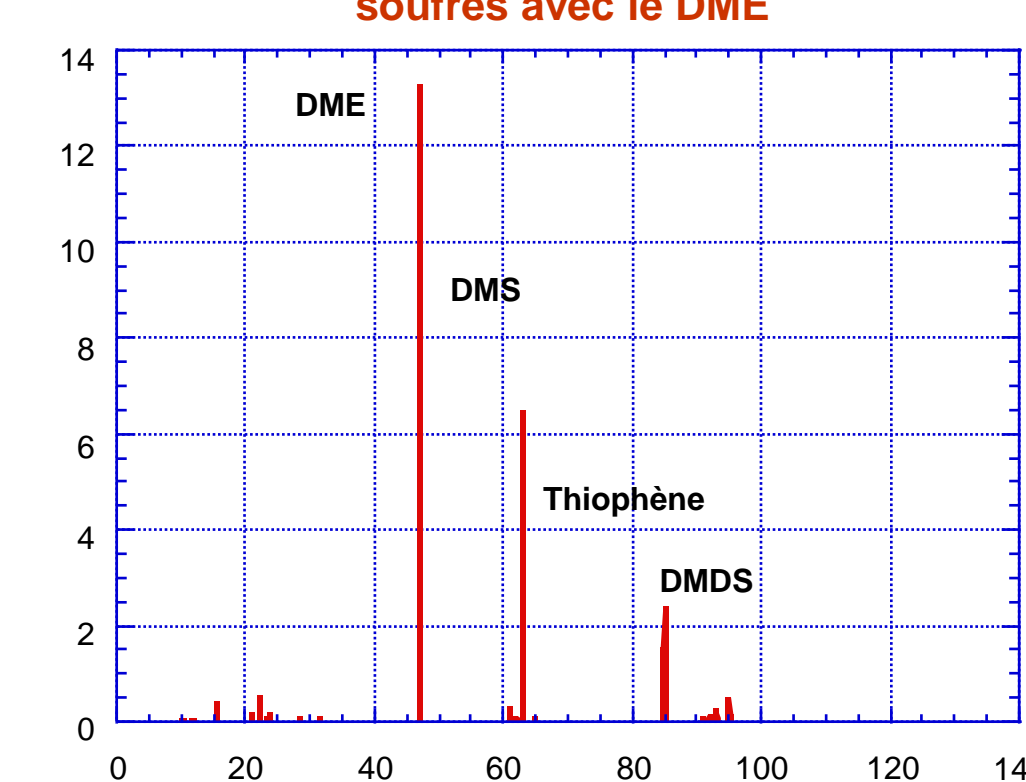


Analyse de l'espace de tête d'un mélange de dérivés sulfurés

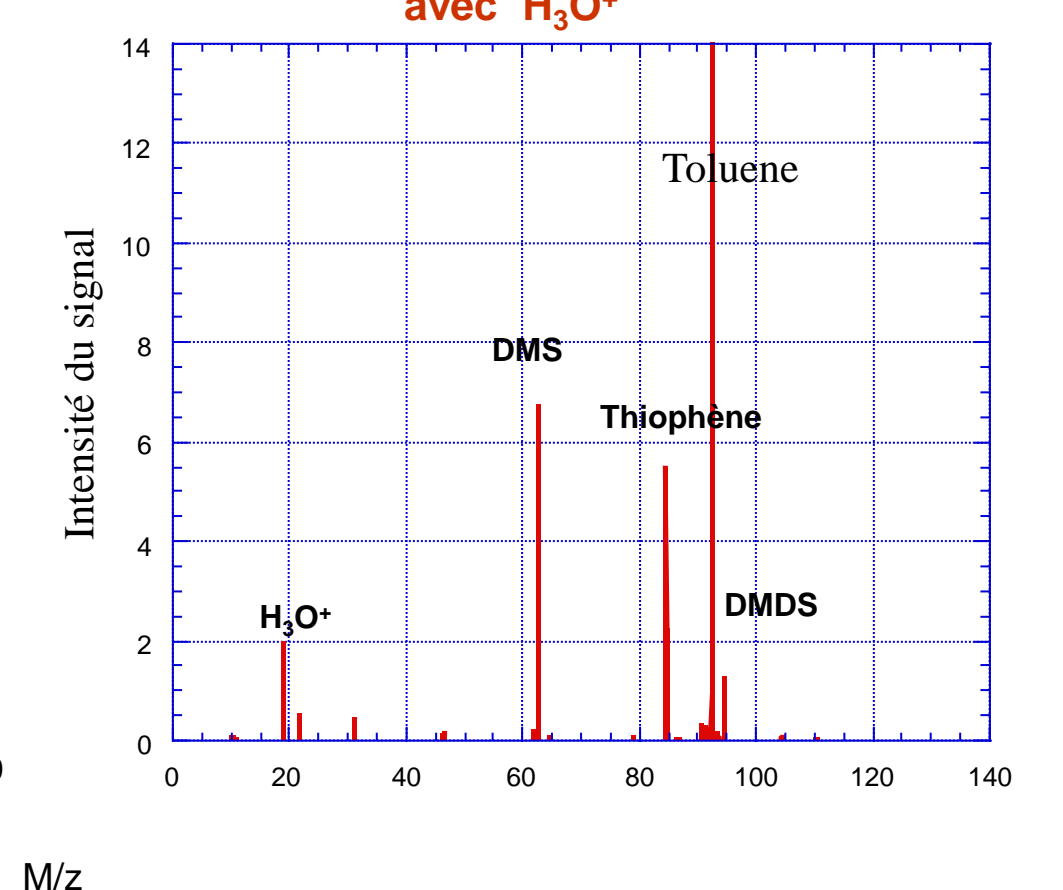
Comparaison entre l'ionisation par H₃O⁺ et le diméthylether protoné

AP (kJ/mol) :
Sulfures : >
800
DME : 792
Toluène : 766

Analyse d'un mélange de dérivés sulfurés avec le DME



Analyse d'un mélange de dérivés sulfurés avec H₃O⁺



Perspectives :

- Etudier la réactivité des complexes métalliques sur les composés de l'air et les dérivés carbonyles
- Utiliser l'hydrazine protoné sur les aldéhydes
- Caractériser plus précisément les réactions de protonation dans MICRA

Contacts : helene.mestdagh@lcp.u-psud.fr
Christophe.dehon@lcp.u-psud.fr

