



HAL
open science

Développement en spectrométrie de masse pour la détection de toxiques dans l'air

Clotilde Le Vot, Hélène Mestdagh, Michel Héninger, Pierre Boissel, Gérard
Mauclaire, Joël Lemaire

► **To cite this version:**

Clotilde Le Vot, Hélène Mestdagh, Michel Héninger, Pierre Boissel, Gérard Mauclaire, et al.. Développement en spectrométrie de masse pour la détection de toxiques dans l'air. Workshop Interdisciplinaire sur la Sécurité Globale (WISG 2013), Jan 2013, Troyes, France. cd des abstracts. hal-04218151

HAL Id: hal-04218151

<https://hal.science/hal-04218151>

Submitted on 26 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.

Développement en spectrométrie de masse pour la détection de toxiques dans l'air.

Clotilde Le Vot¹, Hélène Mestdagh¹, Michel Héninger^{1,2}, Pierre Boissel², Gérard Mauclaire², Joël Lemaire¹.

¹LCP, CNRS-Université de Paris Sud, bât. 350, Centre Universitaire d'Orsay, 91405 Orsay Cedex.

²ALYXAN, Bat 207B, Centre Universitaire d'Orsay, 91405 Orsay Cedex.

Introduction

La détection des composés toxiques dans le cadre d'applications dans le domaine de la sécurité est particulièrement exigeante:

- il faut être en mesure d'identifier avec précision un très grand nombre de composés (notamment toxiques industriels, narcotiques et explosifs) sans risque de confusion avec des composés inoffensifs

- leurs concentrations peuvent aller de la ppb au %

Les techniques basées sur la détection d'ions (mobilité ionique et spectrométrie de masse) sont bien placées pour réaliser des détecteurs généralistes disposant d'une grande sensibilité et permettant une réaction rapide à la présence de toxiques.

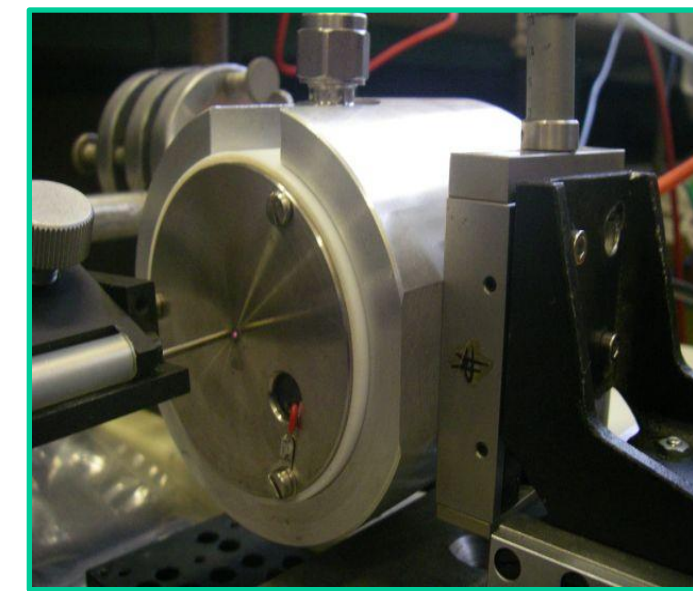
Techniques d'ionisation ambiante

Les techniques d'ionisation ambiante sont bien adaptées à la recherche de composés peu volatils ou à la recherche de composés déposés sur des surfaces.

Les espèces primaires sont produites soit par électrospray (DESI ou EESI) soit par plasma.

Nous avons mis en œuvre une source basée sur une décharge lumineuse dans l'hélium et envisageons pour l'avenir l'utilisation de microtorche de plasma froid produite par une décharge à barrière diélectrique

Une plus grande miniaturisation et une plus faible consommation d'énergie pourrait être obtenue en utilisant un plasma froid



Décharge lumineuse

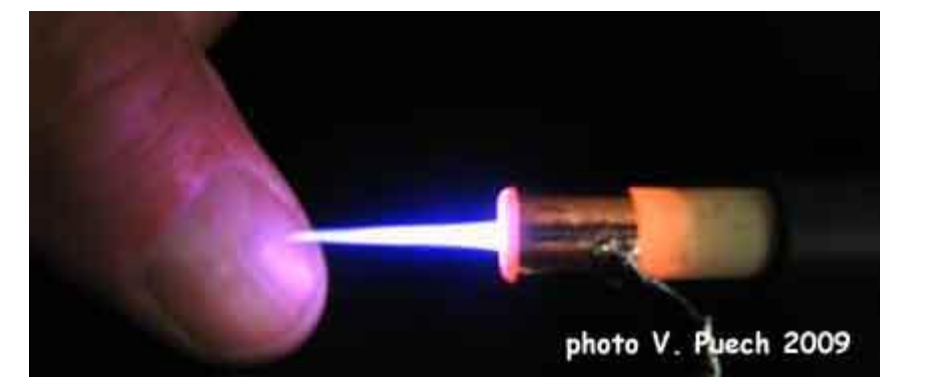


photo V. Puech 2009

Spectromètre haute résolution transportable à source atmosphérique

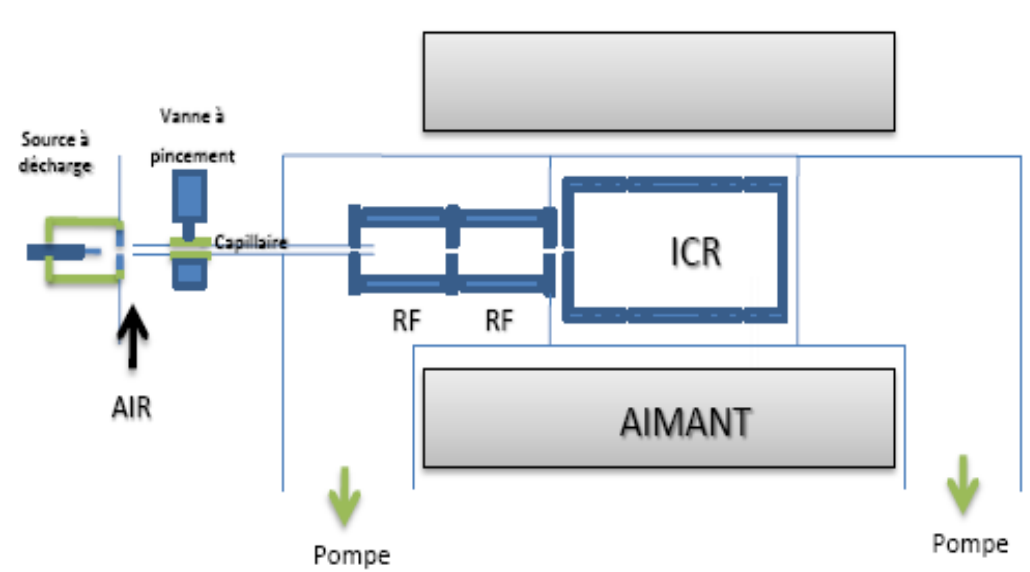
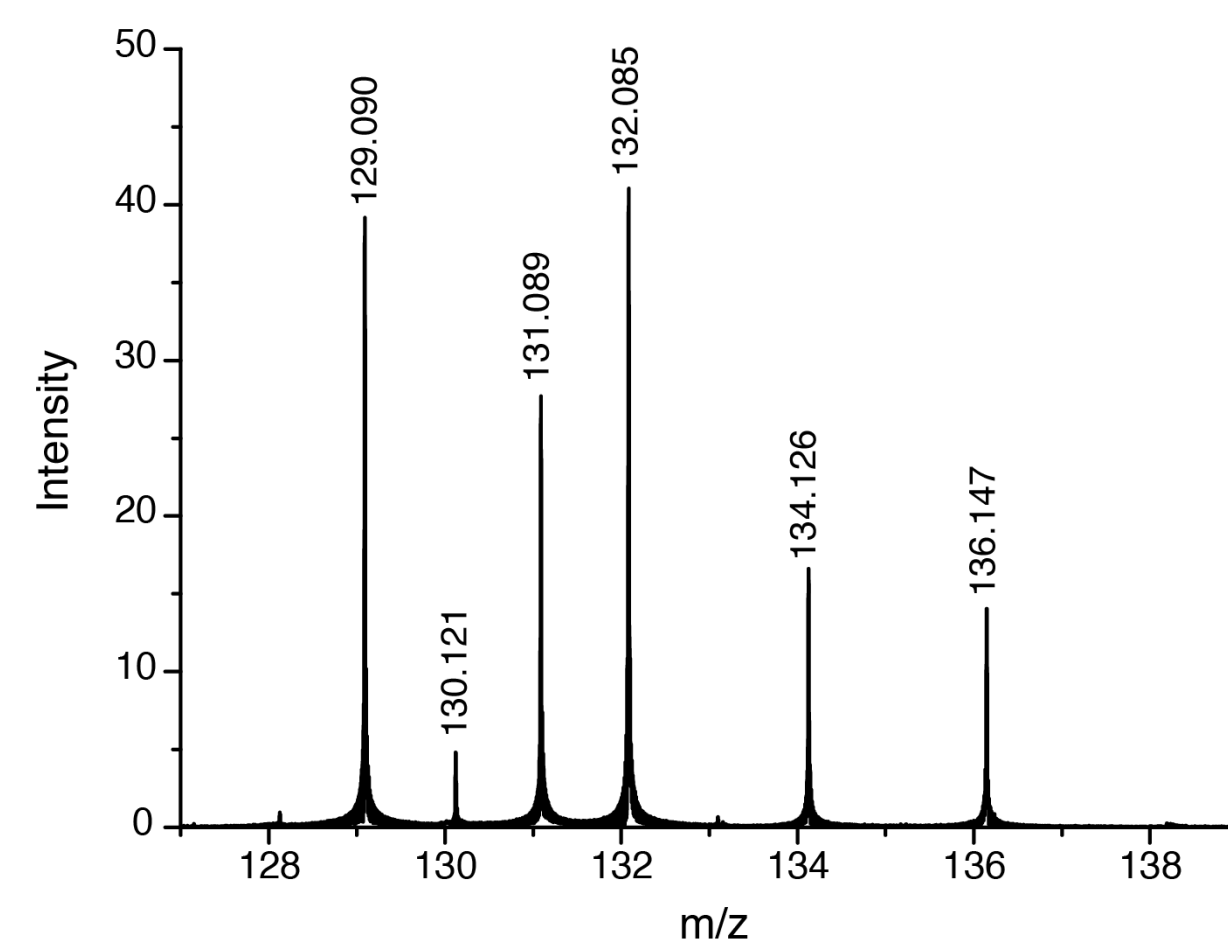


Schéma de la solution mise en œuvre



Caractérisation de la détection en masse en réalisant le spectre du Xénon formé par impact électronique dans la cellule

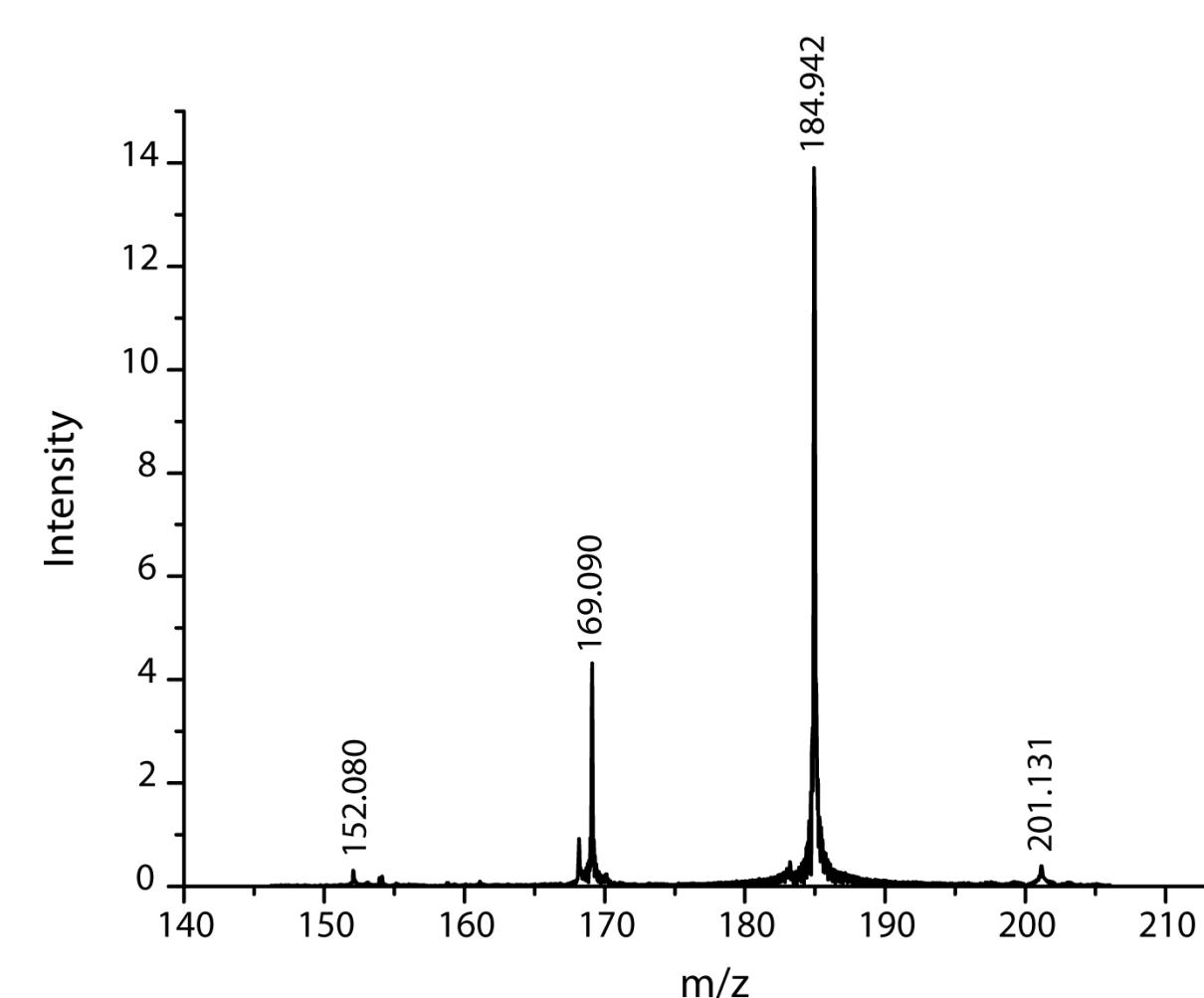
PAHs à l'état de traces dans l'air

Les PAHs (hydrocarbures polycycliques aromatiques) sont des composés toxiques, très peu volatils pour ceux de plus grande taille qui nous ont servi de composés tests pour évaluer les performances de l'instrument que nous avons mis au point dans le cadre du projet DIRECT (CSOSG 2009).

Nous avons généré les composés à l'état de traces dans l'air en faisant passer de l'air au dessus d'une petite quantité de composé à l'état solide puis en le faisant passer, à pression atmosphérique entre la source à décharge et le capillaire d'entrée du spectromètre de masse.

La principale difficulté technologique de notre projet était de réussir à faire passer les ions depuis l'atmosphère jusqu'au vide poussé nécessaire à la spectrométrie de masse FTICR (10^{-8} mbar), soit 11 ordres de grandeur, ceci en utilisant seulement deux pompes turbomoléculaires.

Les PAHs sont un cas assez particulier : contrairement à beaucoup de composés organiques volatils qui vont être protonés on observe les ions moléculaires ainsi que des produits oxygénés formés dans le plasma. Les spectres obtenus sont cependant assez caractéristiques pour permettre leur identification.



Spectre obtenu lors de l'analyse d'air contenant des traces d'acenaphthylène.

Le pic observé à la masse 152 correspond à l'ion moléculaire et les pics aux masses 169 et 185 à des dérivés oxygénés protonés.

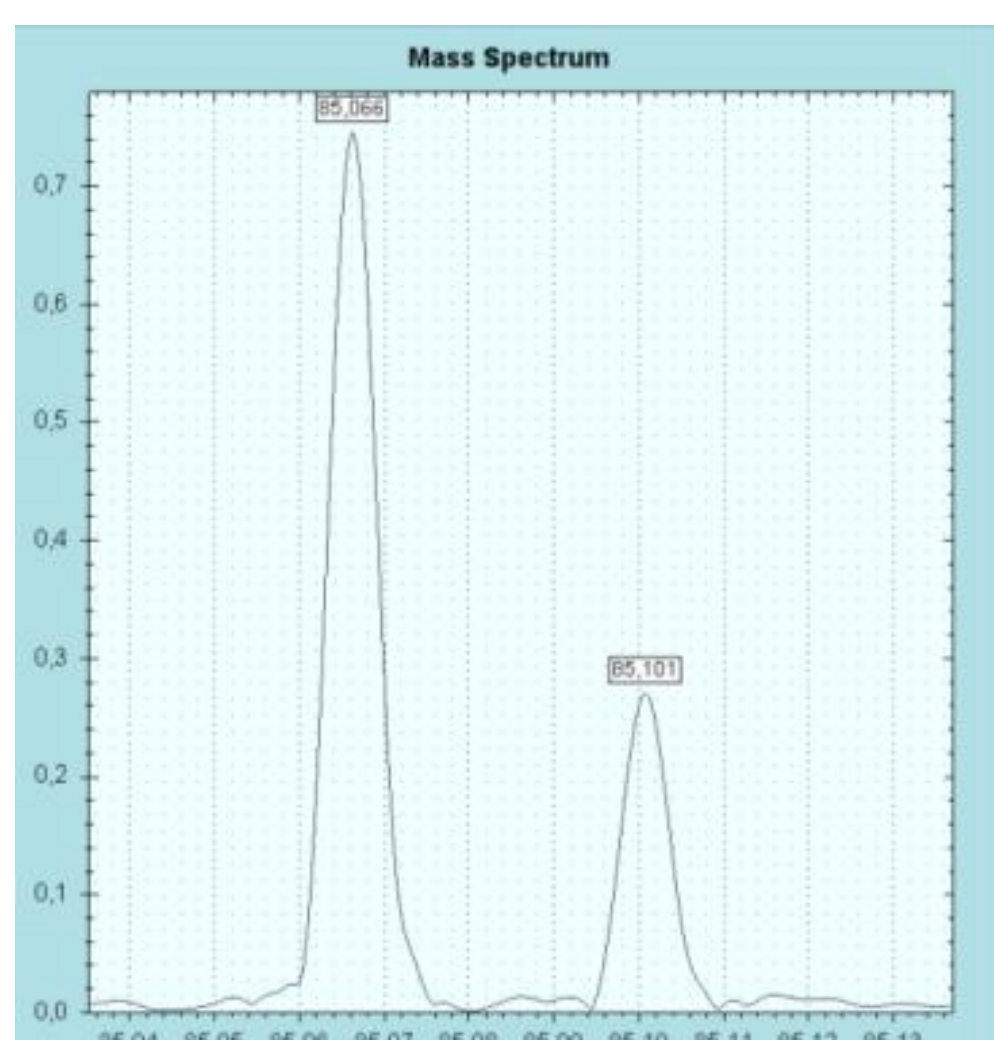
Identifier précisément les composés toxiques

Etant donné l'extrême variété des composés à identifier une technique disposant d'un pouvoir de résolution assez élevé est indispensable. Les instruments de première génération, basés sur la mobilité ionique, qui ont pour atout une mise en œuvre assez simple et qui se prêtent à une assez grande miniaturisation génèrent facilement des faux positifs en raison d'un trop faible pouvoir de résolution (de l'ordre de 50).

La spectrométrie de masse haute résolution permet une identification précise et est en mesure de distinguer des molécules de même masse nominale mais de formules chimiques différentes grâce à la mesure de leurs masses exactes.

La technique que nous avons mise en œuvre est la spectrométrie de masse à transformée de Fourier, de type FT-ICR (« Fourier Transform Ion Cyclotron Resonance ») et nous utilisons un assemblage d'aimants permanents pour produire le champ magnétique.

Le pouvoir de résolution obtenu est supérieur à 10000 pour une gamme de masse allant de 10 à 300.



Exemple de séparation de composés de même masse nominale dans le cas de la cyclopentanone protonée

$C_5H_9O^+$ m/z 85.065339

et de l'hexène protoné

$C_6H_{13}^+$ m/z 85.101725

Conclusion

L'instrument réalisé dans le cadre du projet DIRECT a permis de montrer l'intérêt de l'association de l'analyse temps réel haute résolution avec une méthode d'ionisation ambiante.

Sur cette base, nous comptons aller vers une plus grande miniaturisation, en mettant en œuvre le couplage de différents techniques séparatives et en utilisant des sources d'ionisation basées sur un microjet de plasma froid.