

Un pôle d'excellence spécialisé en spectrométrie de masse haute résolution appliquée à la chimie atmosphérique à IRCELYON

Grâce à une technique innovante d'ionisation par adduit, les analyses de l'air atteignent une très haute sensibilité avec une résolution inégalée, permettant d'observer finement les réactions des polluants et la formation des aérosols, même à des concentrations extrêmement faibles.

L'innovation au cœur des instruments

Le pôle de spectrométrie de masse haute résolution d'IRCELYON s'appuie principalement sur la technologie Orbitrap (Thermo Fisher) permettant d'atteindre une très haute résolution pour une identification fine et précise des composés à analyser. Conçus pour être facilement mobiles, les spectromètres de masse sont montés sur roulettes et transportables afin d'être déployés à travers l'Europe et mis à disposition de la communauté scientifique, en particulier en sciences de l'atmosphère.

La singularité du pôle repose sur une forte capacité de développement interne. L'ensemble des systèmes électroniques et mécaniques – des boîtiers aux alimentations – est conçu sur place par une équipe réunissant le scientifique Matthieu Riva, l'ingénieur Sébastien Perrier et l'assistant ingénieur mécanicien Frédéric Bourgain. Cette maîtrise confère au pôle une grande agilité pour adapter ses outils aux besoins spécifiques des projets de recherche.

En parallèle, l'équipe conçoit et fabrique des composants clés, comme des sources d'ionisation et des systèmes d'injection en amont des spectromètres, afin d'optimiser le couplage des échantillons avec les performances des Orbitrap. Parmi les réalisations emblématiques, la composante « Wall-E » a été récemment développée pour caractériser les aérosols directement dans l'air, en combinant échantillonnage, désorption thermique et ionisation chimique ultra-rapide. Il s'agit d'un système de couplage à bascule, qui permettra à terme de mesurer alternativement la phase particulaire et la phase gazeuse avec un seul spectromètre.

Ces développements ont déjà permis de repousser les limites de détection à des niveaux extrêmement faibles, en dessous du part per trillion (10^{-12}), et jusqu'au part per quadrillion (10^{-15}). Ils permettent ainsi la détection d'espèces chimiques présentes dans l'aérosol à des concentrations aussi faibles que la dizaine de pg/m³.

De l'air à l'analyse en temps réel

Contrairement aux méthodes traditionnelles de spectrométrie de masse, qui nécessitent une collecte préalable des échantillons sur support, le pôle de chimie atmosphérique d'IRCELYON se distingue par sa capacité à échantillonner et analyser l'air (gaz ou particules) en continu et en temps réel.



© La Gazette du Laboratoire

Pour étudier les réactions chimiques atmosphériques, l'équipe dispose de tubes à aérosols et de chambres de simulation. Des gaz purs, tels que l'azote ou l'oxygène, y sont introduits, puis enrichis en composés organiques volatils réactifs, afin d'en observer les transformations. Par exemple, la réaction entre le limonène, un composé organique volatil émis par les végétaux et certaines activités humaines, et l'ozone, un oxydant atmosphérique, est étudiée pour simuler la formation d'aérosols impliqués dans la pollution de l'air. Le système permet également de reproduire le rayonnement solaire pour explorer les mécanismes de photochimie et leur évolution, en fonction des polluants atmosphériques.

L'analyse de la phase gazeuse repose ensuite sur une technique d'ionisation par adduit. Les molécules neutres (M) réagissent avec un ion de référence, tel que NO₂⁺, pour former un adduit (M-NO₂⁺). Ce processus d'ionisation est indispensable pour guider les espèces vers le spectromètre de masse de type Orbitrap et permettre leur analyse.

Un outil pour l'analyse de données massives

Lors d'une campagne scientifique menée en Chine, un spectromètre de masse Orbitrap a été déployé et utilisé en continu pendant un mois. Cette utilisation prolongée a généré un important volume de données, avec l'acquisition d'un spectre de masse toutes les 10 secondes sur toute la durée de la campagne. Très vite, il est apparu que les logiciels traditionnels de traitement associés aux instruments Orbitrap n'étaient pas adaptés à une telle échelle, révélant la nécessité de disposer d'outils capables de gérer et d'exploiter des flux de données continus et massifs.

Pour répondre à ce défi, l'équipe d'IRCELYON, en étroite collaboration avec ses partenaires chinois et finlandais, a développé un nouveau logiciel, appelé Orbitool. Hébergé au CNRS et conçu en Python, cet outil s'appuie sur des données fournies par Thermo Fisher, fabricant des instruments Orbitrap, garantissant ainsi une compatibilité optimale. Aujourd'hui, Orbitool est utilisé par plus de 320 scientifiques à travers le monde.



© La Gazette du Laboratoire

Des applications au-delà de l'atmosphère

Bien que la chimie atmosphérique soit un domaine prioritaire pour l'équipe, le pôle d'IRCELYON offre une grande polyvalence pour d'autres applications de recherche.

Parmi les projets emblématiques, une étude porte sur les émissions gazeuses des sols arctiques lors de leur dégel. En collaboration avec Florent Dominé, spécialiste du pergélisol au laboratoire international Takuvik, et Sophie Szopa, directrice de recherche au CEA et experte en modélisation de la chimie atmosphérique, les scientifiques ont rapporté des échantillons de sols prélevés au Canada pour des expérimentations en laboratoire. Les analyses reposent sur un mode direct, pour une résolution temporelle de l'ordre de la seconde, et sur un couplage entre chromatographie en phase gazeuse et spectrométrie de masse (GC-MS), pour une identification moléculaire fine toutes les 20 minutes. L'objectif étant d'évaluer l'impact climatique du dégel du pergélisol (réchauffant ou refroidissant).

Cette approche analytique est également appliquée aux sols agricoles, afin d'étudier l'influence des produits phytosanitaires et des engrais sur les émissions de gaz.

Les travaux s'étendent aussi au domaine biomédical, avec le développement de méthodes pour caractériser les émissions gazeuses d'origine cellulaire. Le projet Covid-Air a ainsi exploré l'utilisation de ces technologies dans le contexte de la pandémie de COVID-19. Aujourd'hui, une thèse menée dans le cadre du programme PEPR MIE (Maladies Infectieuses Émergentes) VORTEX piloté par Alexandre Gaymard vise à identifier des marqueurs moléculaires spécifiques d'infections bactériennes ou virales, à partir de l'analyse de l'air expiré.

Enfin, le pôle développe des projets collaboratifs innovants, notamment

avec l'Institut des Géosciences de l'Environnement (IGE), autour de l'utilisation de drones capables de prélever des échantillons à différentes altitudes. Ces dispositifs permettraient d'étudier l'impact de la verticalité sur la composition de l'atmosphère.

Partager et déployer l'innovation

Parmi les développements majeurs du pôle de spectrométrie de masse haute résolution d'IRCELYON figure la conception d'une nouvelle source d'ionisation destinée aux instruments Orbitrap, visant à dépasser les limites actuelles liées aux débits d'échantillonnage élevés (8 à 10 litres par minute). En réduisant ce débit à 0,5-1 litre par minute, cette innovation permettra d'ouvrir le spectromètre de masse à des applications impliquant de petits réacteurs, tels que les sols ou les systèmes biologiques mais également le déploiement de cette technologie hors des laboratoires. Elle offrira également une exploitation optimale de la haute résolution spectrale, avec des performances pouvant être multipliées par dix par rapport aux instruments conventionnels.

Reconnue pour son expertise, le pôle suscite une forte demande en transfert de technologies, aussi bien pour les systèmes Orbitrap que pour les sources développées en interne. Dans une démarche collaborative, l'équipe accueille ses partenaires afin de les former et d'accompagner le déploiement de ces solutions dans leurs laboratoires.

Pour en savoir plus : IRCELYON

Matthieu RIVA
matthieu.riva@ircelyon.univ-lyon1.fr
www.ircelyon.univ-lyon1.fr/team/care/