

Développement et amélioration d'un logiciel pour l'exploitation de données d'analyse FT-ICR/MS de mélanges complexes

Jérémie Pontbus • Xavier Faure • Benoit Celse • Hérald Rabeson • IFP, SOLAIZE - FRANCE

L'utilisation de la spectrométrie de masse FT-ICR permet, grâce à la très haute résolution, d'accéder à un détail moléculaire du mélange. L'utilité des diagrammes de Kendrick et de van Krevelen (modifié) a été montrée (A. G. Marshall) pour le traitement des données d'analyses FT/MS de produits pétroliers. Grâce à la résolution et à la mesure de masse exacte, ces outils permettent d'associer les ions par famille (selon leur composition hétéroatomique, leur degré d'insaturation et leur nombre d'atomes de carbone). Pour les mélanges très complexes comme les coupes pétrolières, la biomasse lignocellulosique ou les liquéfiats de charbon, la quantité d'information disponible dans le spectre de masse est trop importante pour permettre un traitement manuel. L'IFP a donc développé un logiciel spécifique interne dont la première version a été présentée aux 25èmes JFSM de Grenoble.

Ce logiciel était capable de représenter automatiquement le spectre de masse obtenu sous la forme d'un diagramme de Kendrick interactif ce qui permettait une visualisation rapide et macroscopique de l'échantillon d'une part et facilitait l'attribution manuelle des formules brutes associées aux ions d'autre part. En effet, l'intégralité d'une famille (même composition en hétéroatomes, mais nombre d'atomes de carbone et d'insaturations différents) peut être identifiée automatiquement grâce à l'attribution d'une formule brute pour un seul de ses membres.

Cependant plusieurs limitations persistaient puisque pour l'identification des formules brutes, et pour la création des différentes familles, une intervention humaine était toujours indispensable. Ensuite, les données obtenues étant très riches, l'exploitation des résultats par les demandeurs d'analyse était très partielle.

Une évolution du logiciel a permis d'implémenter des fonctionnalités d'analyse et de mise en forme des résultats.

Fonctions de traitement :

- identification automatique des formules brutes par l'erreur de masse et la comparaison des massifs isotopiques
- classement des ions par familles et familles d'isotopiques (principalement ^{13}C)

- fonctionnement en mode batch

Fonctions de mise en forme :

- corrections des formules brutes des ions en formules brutes moléculaires
- comparaison de résultats entre échantillon
- extraction organisée des résultats (fichiers xls)

Ces nouvelles fonctionnalités seront présentées au travers d'exemples d'analyse de produits pétroliers, de charbon ou de biomasse.

Des améliorations devraient encore être apportées avec une fonction de recalibration par étape et un traitement statistique des résultats de comparaison (Diagrammes Circos).