

# CAHIER DES CLAUSES TECHNIQUES PARTICULIERES (CCTP)

## *Descriptif :*

*Acquisition d'un spectromètre de masse à transfert de proton avec analyseur à temps de vol (PTR-TOF-MS) pour la mesure de composés organiques volatils et de particules pour l'unité INRAE EcoSys*

### **1. Caractéristiques de l'instrument.**

- L'appareil devra permettre de réaliser l'analyse en ligne et en temps réel des concentrations des composés organiques contenus à l'état de traces dans de l'air en utilisant la technique de la spectrométrie de masse par transfert de protons et autres sources, et temps de vol (PTR(+SRI)-TOF-MS).
- L'appareil devra permettre l'analyse en ligne et en temps réel de la composition chimique des particules sub-micrométriques organiques ainsi que les particules composées d'ammonium et nitrate, sans pré-concentration
- L'ionisation se fera par transfert de proton ou de charge afin d'éviter les phénomènes de fragmentation et de faciliter l'identification des molécules. La source d'ions primaires sera séparée de la chambre de réaction.
- Le fournisseur doit proposer la possibilité d'utiliser d'autres ions (type  $\text{NO}^+$ ,  $\text{O}_2^+$ ,  $\text{NH}_4^+$  sans utiliser de  $\text{NH}_3$ ) que  $\text{H}_3\text{O}^+$  (PTR+SRI-MS) avec une rapidité de basculement de l'ordre de quelques secondes des ions précurseurs
- Les phénomènes d'adsorption devront être réduits par le traitement type sulfinert des surfaces (chambre de réaction, la vanne multi-voies, les tubes et raccords ...)
- Le débit de prélèvement pour la mesure de flux de COV sera modulable minimum jusqu'à  $400 \text{ ml} \cdot \text{min}^{-1}$ .
- L'effet de l'humidité pour la quantification des COV doit être limité.
- Le fournisseur doit proposer une vanne d'entrée multivoies de minimum 8 voies.
- Le fournisseur doit proposer 2 gaines de prélèvement chauffées (pour 1 tube de 1/8 pouce et 6 à 7 tubes de 1/16 pouce).
- L'échantillonnage des particules doit être sans artefact grâce à des températures modérées ( $<150^\circ\text{C}$ ) et des pressions réduites ( $<10\text{mbar}$ )

### **2. Sensibilité, résolution et temps de réponse de l'instrument**

#### **Pour la mesure des COV :**

- La résolution en masse  $m/\Delta m$  (FWHM) sera d'au moins 10000 pour des  $m/z$  supérieurs à 121 pour une fréquence de 20KHz
- La gamme de linéarité de l'appareil devra être aussi large que possible et s'étendre au moins sur un facteur  $10^6$  pour la plupart des composés organiques.
- La sensibilité de l'analyseur doit être d'environ 40000 cps/ppb pour  $m/z$  121 à une résolution de 10000  $m/\Delta m$  (FWHM)
- La limite de détection devra être inférieure à 200 ppqv pour un temps de scrutation

de 1 minute et  $< 1$  pptv pour 1 seconde à une résolution de 10000 m/ $\Delta$ m (FWHM)

- Le spectromètre de masse sera de technologie TOF-MS. Le temps de réponse de l'instrument doit permettre des mesures de COV à 20Hz pour des mesures de flux de COV par Eddy covariance.
- Le design de l'inlet devra être conçu pour permettre un débit d'échantillonnage minimum suffisant à partir d'un flux d'air subissant une perte de charge de 250 mbar.

#### **Pour la mesure des particules :**

- La limite de détection devra être de 400 pg/m<sup>3</sup> (60 sec, gamme entre m/z 60 et m/z 400)
- La gamme de volatilité mesurée des particules doit aller des ELVOC aux IVOC (logC0 de -5 à +6µg/m<sup>3</sup>)
- La transmission des particules de 80 nm à 1 000 nm doit être supérieure à 90%.
- La gamme de taille des particules mesurée avec un facteur de réponse constant (+/- 20%) doit être comprise entre 120 et 1000 nm. La gamme de taille des particules entre 60 et 120 nm doit pouvoir être mesurée avec un facteur de réponse réduit.
- Le temps de résidence doit être  $< 1$  sec même pour les composés collants.
- Le temps de réponse de l'instrument doit être  $< 10$  sec par exemple pour le levoglucosan,  $< 40$  sec pour l'acide tartarique.
- Le temps de bascule entre les mesures gaz et particules doit être inférieur à 1 minute.

### **3. Régulation et robustesse de l'instrument**

- L'instrument devra être conçu pour faire des mesures en continu à l'extérieur et sur des périodes longues (plusieurs semaines).
- En conséquence l'instrument devra être réglé en débit, température et pression.
- L'instrument doit être mobile et être transportable sur le terrain et être fourni avec une caisse de transport.
- La température de la chambre de réaction sera modulable au moins entre 40 et 100 degrés Celsius.
- Les lignes d'échantillonnage devront être inertes et devront pouvoir être chauffées dans une gamme de température identique à celle de la chambre de réaction.
- La source d'ions doit être pur au minimum à 98% en mode H<sub>3</sub>O<sup>+</sup> et à 95% pour les autres modes
- Un système interne de calibration en masse devra être inclus
- Pour la mesure de particules, un système de blanc automatisé doit être intégré
- Le fournisseur doit proposer un dispositif de calibration en concentrations des composés organiques volatils :
  - Le dispositif de calibration doit être adapté spécifiquement à l'analyseur : les températures, débit, pression, humidités doivent être compatibles avec le fonctionnement normal de l'analyseur
  - Le dispositif de calibration doit permettre le mélange de composés organiques avec de l'air à différentes concentrations
  - Le dispositif de calibration doit permettre une génération de concentration entre quelques ppt et plusieurs ppb.

- La pression et la température doivent être régulée dans le dispositif de calibration et éviter tout point froid entre le système de calibration et l'analyseur.
- Il doit être automatisé et piloté
- Le dispositif doit permettre la mesure du bruit de fond instrumental
- Le fournisseur doit proposer un dispositif de contrôle de l'humidité afin de réduire les fluctuations des signaux dues aux variations d'humidité
  - Ce dispositif ne doit pas altérer les performances de l'instrument
  - Ce dispositif doit permettre d'éliminer la dépendance à l'humidité même à des conditions d'ionisation (E/N) inférieur à 150 Td.

#### **4. Dispositif de contrôle, d'acquisition et de traitement de données**

- L'acquisition des données ainsi que le pilotage, le contrôle et l'enregistrement de tous les paramètres instrumentaux de l'instrument seront réalisés par un ordinateur associé et inclus
- Seront fournis : l'interface, le microprocesseur et le logiciel permettant le contrôle de toute l'instrumentation.
- Des bibliothèques de programmation, ou la grammaire de communication, ou le mode d'accès aux données acquises, sera fournie dans un langage standard (par exemple Labview, matlab, C/C++, ...), afin de permettre l'acquisition des données et son traitement par un programme extérieur.
- Une documentation détaillée du matériel et du système d'acquisition sera fournie.
- Seront fournis les logiciels de traitement de données

#### **5. Service après-vente et garanties**

- Le prestataire devra faire la mise en service.
- Le prestataire devra prévoir la formation des utilisateurs (3 à 5 personnes) sur notre site lors de la mise en service, quelques mois plus tard pour le retour d'expérience et une maintenance préventive et vérification des performances avant la fin de la garantie
- Le matériel sera garanti sur une période minimum d'un an à compter de la date d'admission et couvrira les pièces et la main d'œuvre.
- Des références d'utilisation du matériel doivent être fournies (publications, rapports, données d'inter-comparaison)
- Le fournisseur peut proposer une extension de garantie.