
Exploitation chimiométrique des données d'analyse moléculaire (FT-ICR/MS) des gazoles et des distillats sous vide pour la recherche de descripteurs de réactivité

Julie Guillemant*¹, Alexandra Berlioz-Barbier¹, Luis Pereira De Oliveira¹, Marion Lacoue-Nègre¹, Florian Albrieux¹, Ludovic Duponchel², and Jean-Francois Joly¹

¹IFP Energies nouvelles – IFP Energies nouvelles, Rond-point de l'échangeur de Solaize, 69360 Solaize, France – France

²LASIRE – Laboratoire Avancé de Spectroscopie pour les Interactions, la Réactivité et l'Environnement (LASIRE) - UMR 8516 – France

Résumé

Les gazoles (GO) et distillats sous vide (DSV) sont des matrices pétrolières particulièrement complexes contenant des composés azotés neutres et basiques ainsi que des composés soufrés qui sont des impuretés et doivent être éliminés au cours d'un procédé d'hydrotraitement. Une caractérisation avancée des composés contenus dans les gazoles et les distillats sous vide issus de différents procédés et hydrotraités en raffinerie est alors nécessaire pour rechercher des descripteurs de réactivité en hydrotraitement. Dans ce but, une approche multi-techniques a été mise en place à travers l'utilisation de la spectrométrie de masse de résonance cyclotronique de l'ion à Transformée de Fourier (FT-ICR/MS), la chromatographie gazeuse bi-dimensionnelle (GC×GC) couplée à différents détecteurs (HRMS, NCD et SCD), la spectrométrie de mobilité ionique couplée à la chromatographie liquide ultra-haute performance (UHPLC) mais également grâce à des outils chimiométriques à visée exploratoire ou prédictive. La FT-ICR/MS a ainsi été utilisée afin d'apporter une information moléculaire qualitative sur la nature des composés azotés et soufrés contenus dans ces échantillons quand la spectrométrie de mobilité ionique a permis d'apporter en parallèle une information partiellement structurale sur ces composés. Les analyses FT-ICR/MS générant des tableaux de données particulièrement complexes, des approches chimiométriques (ACP et HCA) ont été utilisées afin d'explorer au mieux ces données et ont permis d'aboutir à un classement des individus et d'identifier les variables à l'origine des différences entre gazoles et distillats sous vide respectivement issus de différents procédés. En particulier, une fusion des données des trois modes a été réalisée pour évaluer simultanément l'impact des composés azotés et soufrés dans la description des individus par le biais de l'analyse PARAFAC. Enfin, l'ionisation de ces composés pouvant être soumise à des phénomènes de suppression d'ion ou encore de compétitions d'ionisation, les teneurs obtenues par FT-ICR/MS sur les gazoles ont ensuite été comparées à celles obtenues par des techniques quantitatives de référence (GC×GC-NCD et GC×GC-SCD) à travers le développement de modèles de prédiction (MLR) afin d'évaluer le potentiel de la FT-ICR/MS en tant qu'outil pseudo-quantitatif. La combinaison de ces différents outils analytiques ou chimiométriques a alors permis de développer de nouvelles stratégies

*Intervenant

pour l'analyse de ces matrices complexes par spectrométrie de masse en s'appuyant ainsi sur des techniques séparatives, l'analyse statistique des données ou encore via l'évaluation de la réponse d'ionisation de ces composés.