Spectroscopie proche infrarouge mobile : qu'allez-vous mesurer ?

Auteur : Mike Walker TI DLP Products Business Development Manager

Depuis ses débuts de technique réservée aux laboratoires, la spectroscopie a connu de grandes avancées. Les spectromètres proche infrarouge (NIR, *near infrared*) portables continuent à voir leur taille comme leur coût diminuer, notamment grâce à l'avènement d'architectures système innovantes qui mettent à profit les composants de microsystèmes électromécaniques (MEMS, *microelectromechanical systems*). Le présent article montre comment ces optimisations matérielles laissent entrevoir plus de simplicité et de portabilité dans la spectroscopie de demain.

La spectroscopie NIR

La spectroscopie est une technologie puissante d'identification des échantillons, qui se base sur leur réponse à une large gamme de longueurs d'onde. En spectroscopie NIR, l'échantillon est excité au moyen de longueurs d'onde lumineuse généralement comprises entre 780 et 2 500 nm. En fonction de l'état de l'échantillon, la réponse spectrale peut être évaluée au moyen de mesures de réflectivité (pour les solides) ou d'absorption (pour les liquides et les gaz).

Dans la région de 780 à 2 500 nm, les signatures spectrales présentent majoritairement des liaisons hydrogène telles que O-H, C-H, N-H et S-H. En ce sens, la gamme d'ondes NIR convient particulièrement pour la surveillance des produits alimentaires et agricoles, les diagnostics médicaux, les traitements pétrochimiques et la production pharmaceutique. Dans la gamme d'ondes NIR, chaque application spectroscopique présente des exigences de gamme de longueurs d'onde et d'analyse chimiométrique uniques. Ainsi, un instrument de la gamme de 900 à 1 700 nm peut fournir des informations sur la teneur en eau (H_20) et en sucre ($C_{12}H_{24}O_{12}$). Une gamme de longueurs d'onde étendue à 2 500 nm permet de découvrir les signatures d'autres composés organiques et peut améliorer les résultats obtenus dans le cadre de la surveillance des procédés pharmaceutiques [2].

Le coût total de la nomenclature de l'instrument peut varier en fonction de la gamme de longueurs d'onde choisie. Un système NIR à ondes courtes permettrait à un détecteur silicone peu onéreux d'effectuer des mesures jusqu'à 1 050 nm. Au-delà de 1 050 nm, un détecteur à arséniure d'indium-gallium (InGaAs), plus coûteux, est souvent nécessaire. Au-delà de 1 700 nm, il est généralement nécessaire de refroidir l'InGaAs pour maintenir les performances, notamment dans le cas des détecteurs à barrettes de diodes linéaires multipixels. Du fait du coût plus élevé du substrat InGaAs et des éléments de refroidissement supplémentaires, le coût des systèmes InGaAs à barrettes de diodes linéaires peut être prohibitif pour des instruments portatifs peu onéreux.

Des innovations dans l'architecture des spectromètres

Étant donnés les défis posés par le coût de la spectroscopie conventionnelle dispersive avec détecteur à barrettes de diodes InGaAs, l'innovation en spectroscopie NIR s'est essentiellement concentrée sur la réduction du nombre de composants système, par exemple en remplaçant le relais de réseau dispersif par un filtre variable linéaire (LVF, *linear variable filter*). L'architecture avec LVF réduit certes le rendement lumineux, mais diminue grandement l'encombrement du spectromètre en supprimant le chemin du réseau de diffraction au détecteur. D'autres concepts optiques innovants utilisent une architecture transmissive pour le réseau de diffraction, ce qui optimise l'encombrement du système tout en minimisant la perte de flux lumineux. Une autre architecture utilise un réseau de balayage pour relayer la lumière directement à un détecteur monopoint, rendant ainsi superflues les barrettes de

diodes InGaAs multipixels précédemment mentionnées. Les détecteurs monopoints présentent des avantages significatifs par rapport aux détecteurs à barrettes de diodes en termes de coût, de taille et de performance.

L'adoption de la technologie MEMS au sein des architectures de spectromètres ainsi que l'utilisation de détecteurs monopoints favorisent la réduction des coûts et la portabilité. L'intégration de composants MEMS robustes dans la raie spectrale d'un spectromètre permet à la fois de réduire l'encombrement de l'instrument et d'accroître les niveaux de performance. Les points à prendre en compte lors de la sélection des composants MEMS sont notamment la fiabilité de performance et la stabilité de fabrication à volume élevé.

Les jeux de puces DLP NIR de Texas Instruments sont une technologie MEMS éprouvée, qui permet une modulation haute fidélité de la lumière pour des spectromètres compacts, programmables et à hautes performances. Les modèles DLP2010NIR et DLP4500NIR de TI permettent notamment des commandes de longueur d'onde très intéressantes telles que des motifs de Hadamard et la programmabilité dynamique de balayage rapide. D'autres technologies MEMS émergentes, dont l'interféromètre de Fabry-Perot et l'interféromètre de Michelson, laissent entrevoir une simplification de l'architecture de l'instrument, mais peineront peut-être à répondre aux exigences de performance en laboratoire en termes de rapport signal sur bruit et de résolution.

S'il existe de nombreuses architectures de spectromètre possibles, la technologie MEMS se montre de plus en plus avantageuse. La programmabilité dynamique, la baisse des coûts, l'utilisation d'un détecteur monopoint et la suppression des grands éléments en mouvement sont quelques-uns des avantages offerts par une architecture fondée sur les MEMS. Ces avantages, conjugués avec une intégration système fiable, sont encore plus critiques lors de l'utilisation sur le terrain.

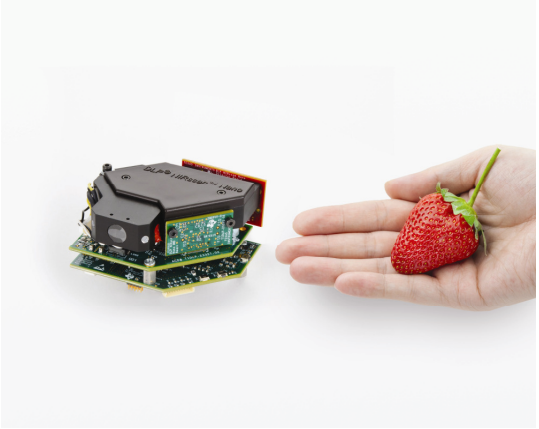


Figure 1 : Ce module d'évaluation DLP NIRscan Nano de Texas Instruments fonctionne à l'aide du jeu de puces DLP2010NIR.

Applications mobiles et perspectives du secteur

Les instruments de spectroscopie NIR compacts à hautes performances ont contribué à l'émergence d'applications de terrain pour lesquelles les mesures *in situ* pouvaient présenter une valeur ajoutée, tant aux yeux des particuliers que des industriels. La connexion de ces spectromètres à des bases de données sur le cloud par Wi-Fi ou Bluetooth® via un terminal mobile permet de bénéficier de l'ensemble des capacités prédictives du laboratoire sur le terrain. Ainsi, les spectromètres intégrés peuvent servir de capteurs optiques à haute performance en périphérie du réseau. Lorsque les composantes matérielles

du spectromètre facilitent une telle agrégation de données haute fidélité sur le cloud, l'Internet des objets (IoT, *Internet of things*) peut améliorer l'efficacité des procédés de façon dynamique. Les applications pionnières de détection mobile via l'Internet des objets comprennent la sécurité alimentaire, la surveillance agricole à distance et la surveillance des procédés dans l'industrie pharmaceutique.

La tendance la plus intéressante en spectroscopie NIR est peut-être le modèle *open source*. Des développeurs à la pointe de la technologie tels que Texas Instruments, Consumer Physics et Si-ware ont commercialisé divers kits de développement de logiciels afin d'encourager l'innovation. KS Technologies est un exemple d'entreprise pionnière en matière d'architecture de spectromètre NIR à faible coût pour applications IoT industrielles. En plus de proposer des applications iOS et Android gratuites et des kits de développement de logiciels pour le module d'évaluation DLP NIRscan Nano présenté en figure 1, cette entreprise a mis à profit son expertise en matière de système de données mobiles et d'infrastructures IoT sur le marché émergent de la détection mobile NIR.

Grâce au faible coût de ces plateformes *open source*, les produits se prêtent à la collaboration avec des universitaires experts en chimiométrie afin d'augmenter notre connaissance des applications. L'alliance d'un matériel économique et de logiciels *open source* facilite ainsi le développement des algorithmes et de la chimiométrie, qui en retour favorise le développement de la spectroscopie NIR. La croissance et l'innovation futures du secteur dépendent de la collaboration entre les experts.

Au vu de la puissance de l'analyse par spectroscopie NIR, le secteur s'est en grande partie concentré sur l'adaptation pour le terrain de cette technologie ultraperformante utilisée en laboratoire. Les avancées réalisées en matière d'architectures de spectromètre NIR nourrissent à présent une nouvelle vague de solutions de mesure innovantes et mobiles. Cette innovation s'inscrit dans la recherche de mobilité croissante inhérente au XXI^{e} siècle et dans la révolution de l'Internet des objets. Anciennement technologie de laboratoire coûteuse, la spectroscopie s'affirme aujourd'hui comme une solution de production de données précises à portée de main. Et vous, qu'allez-vous bien pouvoir mesurer ?

[1] B.M. Nicolaï et al. / *Postharvest Biology and Technology* 46 (2007). Pp 99-118.

[2] Chang, Cheng-Wen, « Near-infrared reflectance spectroscopic measurement of soil properties » (2000). *Retrospective Theses and Dissertations.* Étude 12 315.