



# APPORT DE LA SPECTROMÉTRIE DE MASSE COUPLÉE À LA MOBILITÉ IONIQUE HAUTE RÉSOLUTION POUR LA CARACTÉRISATION STRUCTURALE ET LA QUANTIFICATION DE L'EXPOSOME CHIMIQUE DANS LES MATRICES COMPLEXES

## CONTRIBUTION OF HIGH-RESOLUTION ION MOBILITY–COUPLED MASS SPECTROMETRY TO THE STRUCTURAL CHARACTERIZATION AND QUANTIFICATION OF THE CHEMICAL EXPOSOME IN COMPLEX MATRICES

*Etablissement* **Sorbonne Université SIS (Sciences, Ingénierie, Santé)**

*École doctorale* **Chimie Moléculaire de Paris-Centre**

*Spécialité* **Chimie moléculaire**

*Domaine Scientifique* **Chimie**

*Unité de recherche* **Institut parisien de chimie moléculaire (IPCM)**

*Encadrement de la thèse* **Sandra ALVES**

**Financement** du 01-10-2026 au 30-09-2029

*Début de la thèse le* **1er octobre 2026**

*Date limite de candidature (à 23h59)* **21 mai 2026**

### Grands défis sociétaux

---

Santé

Alimentation, bioéconomie, ressources naturelles, agriculture et environnement

### Objectifs de développement durable

---

Bonne santé et bien-être

### Mots clés - Keywords

---

Chimie Analytique, Spectrométrie de Masse, Mobilité Ionique, Exposome Chimique

Analytical Chemistry, Mass Spectrometry, Ion Mobility, Chemical Exposome

### Description de la problématique de recherche - Project description

---

Ce projet doctoral vise à développer une méthode innovante couplant la mobilité ionique et la spectrométrie de masse à haute résolution pour caractériser et quantifier l'exposome chimique dans des matrices biologiques complexes. L'exposition humaine à de nombreuses substances chimiques présentes dans l'environnement, l'alimentation et les produits du quotidien constitue un enjeu majeur de santé publique. Cet ensemble d'expositions, appelé exposome chimique, est associé au développement de diverses pathologies, mais sa caractérisation reste difficile en raison de la complexité des matrices biologiques, de la diversité structurale des composés et de leurs faibles concentrations. Les méthodes analytiques actuelles, principalement basées sur la LC-HRMS/MS, offrent une large couverture mais présentent des limites, notamment pour l'analyse de mélanges complexes et la discrimination des isomères. L'intégration de la spectrométrie de mobilité ionique (IMS), en complément de la spectrométrie de masse haute résolution, apparaît comme une solution prometteuse. Cette approche permet une séparation supplémentaire des ions selon leur taille, leur forme et leur charge, ainsi qu'un accès à des informations structurales via la section efficace collisionnelle (CCS), améliorant ainsi la fiabilité des identifications. Les retombées attendues incluent le développement d'outils analytiques plus performants pour l'analyse de mélanges complexes, une meilleure discrimination des isomères, ainsi que des méthodes de quantification rapide et fiable de contaminants dans des matrices biologiques. Ces avancées contribueront à une compréhension plus fine et plus précise de l'exposition humaine aux substances chimiques.

This doctoral project aims to develop an innovative method combining ion mobility and high-resolution mass spectrometry to characterize and quantify the chemical exposome in complex biological matrices. Human exposure to numerous chemical substances

present in the environment, food, and everyday products represents a major public health concern. This set of exposures, referred to as the chemical exposome, is associated with the development of various diseases, yet its characterization remains challenging due to the complexity of biological matrices, the structural diversity of compounds, and their low concentration levels.

Current analytical methods, mainly based on LC-HRMS/MS, provide broad coverage but have significant limitations, particularly in the analysis of complex mixtures and the discrimination of isomers. The integration of ion mobility spectrometry (IMS), in combination with high-resolution mass spectrometry, appears to be a promising solution. This approach enables an additional separation of ions according to their size, shape, and charge, while also providing access to structural information through collision cross section (CCS), thereby improving the confidence of molecular identifications. Expected outcomes include the development of more powerful analytical tools for the analysis of complex mixtures, improved isomer discrimination, and rapid and reliable quantification methods for contaminants in biological matrices. These advances will contribute to a more detailed and accurate understanding of human exposure to chemical substances.

## Thématique / Contexte

---

Chimie analytique à l'interface de la chimie et de la biologie

Développement et applications de méthodes analytiques innovantes basées sur le couplage de la spectrométrie de masse haute résolution et de la mobilité ionique pour la caractérisation structurale et la quantification de l'exposome chimique dans des matrices biologiques complexes.

## Méthode

---

Approches sans a priori et Approches ciblées  
Spectrométrie de masse et Mobilité ionique

## Références bibliographiques

---

Alves S. et al. Potential of Fourier Transform Mass Spectrometry for high throughput metabolomics analysis, pp219-302. In *Advances in Botanical Research*, Vol. 67: Metabolomics coming of age. Ed. D. Rolin, 2013. DOI: 10.1007/s00216-017-0738-3. DOI:10.1016/B978-0-12-397922-3.00005-8. hal-01173098

Habchi et al. Chemical exposure highlighted without any a priori information in an epidemiological study by metabolomic FTICR-MS fingerprinting at high throughput and high resolution. *Chem. Res. Toxicol.*, 2023, 36:1592. DOI: 10.1021/acs.chemrestox.3c00158. hal-04465837

Chalet et al. Single Ion Mobility Monitoring (SIM2) stitching method for high throughput chiral analysis of amino acids with high ion mobility resolution on a TIMS-ToF. *Anal. Bioanal. Chem.*, 2024, 416(20): 4581. DOI : 10.1007/s00216-024-05399-2. hal-0489467v1.

Rathahao-Paris et al. Innovative direct introduction-ion mobility - mass spectrometry (DI-IM-MS) approach for fast isomer quantification in a complex matrix: Application to the determination of 2'-fucosyllactose (2'FL) in human milk. *Journal of Mass Spectrometry* (2024) 59 (5): e5026. DOI: 10.1002/jms.5026. hal-0466387v1.

## Contexte du poste : Modalités d'encadrement, de suivi de la formation et d'avancement des recherches du doctorant - Details on the thesis supervision

---

Co-direction : Rathahao-Paris Estelle (Inrae : Institut national de recherche pour l'agriculture, l'alimentation et l'environnement)

## Conditions scientifiques matérielles et financières du projet de recherche

---

Accès aux instruments de spectrométrie de masse de l'équipe CSOB de l'Institut Parisien de Chimie Moléculaire (IPCIM) et notamment l'instrument TIMS-tof équipé d'une cellule de mobilité ionique

## Objectifs de valorisation des travaux de recherche du doctorant : diffusion, publication et confidentialité, droit à la propriété intellectuelle,...

---

présentation des résultats sous forme  
-de publications dans des revues scientifiques internationales  
-d'Oral et/ou de Poster dans des congrès scientifiques nationaux et internationaux

## Collaborations envisagées

---

## Profil et compétences recherchées - Profile and skills required

---

- Master en chimie (ou équivalent) avec une préférence dans la spécialité analytique (ou des étudiants ayant suivi lors de sa formation des unités d'enseignement dédiées à la chimie analytique),
- Un plus serait d'avoir effectué des stages dans le domaine de la chimie analytique (ex. spectrométrie de masse).
- Le candidat devra démontrer d'un intérêt pour l'analyse de données, des notions de programmation seront appréciées
- Rigueur scientifique et capacité d'analyse critique
- Master's degree in chemistry (or equivalent), preferably with a specialization in analytical chemistry (or candidates who have completed coursework in analytical chemistry)
- Previous internships in analytical chemistry (e.g., mass spectrometry) would be an asset
- The candidate should demonstrate an interest in data analysis; basic programming skills would be appreciated
- Scientific rigor and strong critical thinking skills

Dernière mise à jour le 7 avril 2026