



Société Française de Spectrométrie de Masse

16^e Journées Françaises de Spectrométrie de Masse

**Environnement, Biologie, Œnologie, Médecine,
Géologie, Chimie, Archéologie, Mécanismes...**

NANCY

Palais des Congrès

6 - 9 Septembre 1999

Renseignements : E. LICHTFOUSE, ENSAIA-INPL, 54505 Vandoeuvre-Lès-Nancy
<lichtfouse@ensaia.inpl-nancy.fr>

SFSM : DCMR, École Polytechnique, 91128 Palaiseau Cedex. <http://www.admp6.jussieu.fr/sfsm>

Club des Jeunes de la SFSM : <http://www.cjsm.espci.fr>

Société Française de Spectrométrie de Masse

Conseil d'Administration de la SFSM

Présidente	Yannik HOPPILLIARD	
Présidente-conseil	Catherine LANGE	
Secrétaire	Éric FOREST	
Trésorière	Janine TORTAJADA	
Membres	Alain BRUNELLE Emmanuelle LEIZE	Éric LICHTFOUSE Pascal MANUELLI

Conseil d'Administration du Club des Jeunes de la SFSM

Présidente	Joëlle VINH	
Vice-Président	Jean-Yves SALPIN	
Secrétaire	Nicolas SOMMERER	
Trésorier	Frédéric HALGAND	
Membres	Abdelkarim EL OUACHINI Carine BRYSELBOUT Guillaume VAN DEN REST	Carine FROMENT Gérald MARIE

Comité Local d'Organisation des 16^e Journées

Président	Éric LICHTFOUSE	
Comité Scientifique	André ENSMINGER	
Colloque des Jeunes	Carine BRYSELBOUT	Pascale HENNER
Sessions affiches	Pascale HENNER	Michel SWISTEK
Maquettiste	Brigitte LICHTFOUSE	
CD-Rom	Danielle AUBERT	Christophe ROBIN
Communication	Michèle CUSSENOT Françoise KAH	William DEL-MANCINO Yves BERNARDI
Programmation	Jean-Marie ZIEGLER	
Animation-modération	Jean-Marie ZIEGLER	Pierre LEROY
Accueil	Michelle CUSSENOT Michel SWISTEK	Christophe ROBIN Eric LICHTFOUSE
Microphones	Carine BRYSELBOUT Pascale HENNER Yves BERNARDI	Brigitte LICHTFOUSE Etienne DAMBRINE
Membres	Etienne DAMBRINE Etienne DELOULE Christian FRANCE-LANORD Jean-Marc GUEHL Patrick LANDAIS Emmanuelle LEIZE Pierre LEROY	Pascale MAILLARD Laurence MANSUY Jean-François MULLER Christophe ROBIN Corinne PERRIN-GANIER Jean-Marie PORTAL Patrick WEHRUNG

**Le Comité Local d'Organisation des
16^e Journées Françaises de Spectrométrie de Masse
remercie pour leur soutien :**

La Société Française de Spectrométrie de Masse (SFSM, organisateur)

La Société Française de Chimie (SFC), Division de Chimie Analytique

Analisis

Analytical Application Brielle

Bruker Spectroscopin

Centre National de la Recherche Scientifique (CNRS)

Club de Jeunes de la SFSM

Communauté Urbaine du Grand Nancy

Conseil Général de Meurthe et Moselle

École Nationale Supérieure d'Agronomie et des Industries Alimentaires (ENSAIA)

EDP Sciences

Hewlett-Packard

ID Analytical Services

Institut National de la Recherche Agronomique (INRA)

INRA Centre de Nancy

INRA Département Environnement et Agronomie

INRA Direction Scientifique Environnement, Forêt et Agriculture

Institut National Polytechnique de Lorraine (INPL)

Institut National de Recherche et de sécurité (INRS)

Jeoi Europe

La Gazette du Laboratoire

LECO

Perkin Elmer

Polymer Laboratories

Région Lorraine

Spectra Analyse

Thermoquest

Touzard et Matignon

Université Henri Poincaré

Varian

Ville de Nancy

Waters et Micromass

Whatman

8.30 **Accueil des participants**

M. CUSSENOT, C. ROBIN, M. SWISTEK, E. LICHTFOUSE

9.00-9.40 **Introduction officielle du colloque***Salle LÉOPOLD*

Eric LICHTFOUSE	Président du Comité Local d'Organisation
Carine BRYSELBOUT	Organisatrice du Colloque des Jeunes
Yannik HOPPILLIARD	Présidente de la Société Française de Spectrométrie de Masse
Joëlle VINH	Présidente du Club des Jeunes de la SFMS
Bernard MONCENON	Directeur de l'Institut National de Recherche et de Sécurité
Pierre STEINMETZ	Vice-Président de l'Université Henri Poincaré
François LAURENT	Directeur de l'Ecole Nationale Supérieure d'Agronomie et des Industries Alimentaires
Joël HARDY	Président de l'Institut National Polytechnique de Lorraine
Jean-Claude FARDEAU	Directeur-Adjoint du Département Environnement et Agronomie, INRA
Jean BOIFFIN	Direction Scientifique Environnement, Forêt et Agriculture, INRA
Gilbert AUSSENAC	Président du Centre INRA de Nancy
Henri BÉGORRE	Vice-Président de la Communauté Urbaine du Grand Nancy
François MULLER	Vice-Président de la Région Lorraine, Délégué Enseignement Supérieur et Recherche

9.40-13.00 **Session 1 : APPLICATIONS ANALYTIQUES***Salle LÉOPOLD*

Animation : L. MANSUY. Modération : L. MANSUY, P. RICHARDIN, E. DAMBRINE. Microphones : P. HENNER, B. LICHTFOUSE

9.40-10.20 **Conférence plénière :**Apport de la spectrométrie de masse à l'archéométrie
Pascale RICHARDIN (*Muséum National d'Histoire Naturelle*)10.20-11.00 **Pause-café****Communications orales :**

11.00-11.20 Étude par ESI/MS/MS de complexes d'intérêt dans le retraitement des combustibles irradiés

C. LAMOUREUX, H. VIRELIZIER, C. JANKOWSKI, J. C. TABET et C. MOULIN

11.20-11.40 Caractérisation de polymères synthétiques par MALDI-TOF : évaluation de nouveaux modes potentiels d'échantillonnage

A. MARIE, F. FOURNIER et J. C. TABET

11.40-12.00 Étude des réactions entre l'estradiol-2,3-quinone et les nucléosides par spectrométrie de masse en tandem

C. VAN AERDEN, L. DEBRAUWER, F. FOURNIER, O. CONVERT, A. PARIS et J.C. TABET

12.00-12.20 Stratégie générale d'analyse des matériaux par ablation/ionisation laser : mécanismes et applications

J. F. MULLER, G. KRIER, P.J. CALBA, F. AUBRIET, L. VERNEX-LOSET et B. COURRIER

12.20-12.40 Étude par ESMS des propriétés de reconnaissance énantiomérique de macrocycles chiraux

H. NIERENGARTEN, E. LEIZE, C. GARCIA, G. JEMINET et A. VAN DORSSELAER

12.40-13.00 Dosage simultané par dilution isotopique des acides phytanique et pristanique et des acides gras à très longue chaîne dans le plasma : intérêt dans le diagnostic des maladies du peroxysome

F. ROCCHICCIOLI13.00-14.00 **Déjeuner***Salle MAJORELLE*14.00-16.00 **Visite de l'exposition***Hall GEORGES DE LA TOUR*

MARDI APRES-MIDI

14.00-16.00 COMMUNICATIONS PAR AFFICHES

Hall GEORGES DE LA TOUR

Animation : P. HENNER, M. SWISTEK

Session A : Environnement (n° 1-15)

Session C : Toxicologie (n° 22-31)

Session E : Instrumentation (n° 45-50)

Session B : Archéologie (n° 16-21)

Session D : Médecine, Pharmacie (n° 32-44)

16.00-18.20 Session 2 : MÉDECINE, PHARMACIE Salle LÉOPOLD

Animation : P. LEROY. Modération : P. LEROY,
A. ENSMINGER, A. RETTENMEIER
Microphones : C. BRYSELBOUT,
Y. BERNARDI, E. DAMBRINE

Session 3 : INSTRUMENTATION Salle GALLÉ

Animation : E. DELOULE. Modération : E. DELOULE,
J.-C. TABET. Microphones : B. LICHTFOUSE,
P. HENNER

16.00-16.40 Conférence :

Occupational exposure to glycol ethers :
the development of GC-MS based
biological monitoring procedures
Albert W. RETTENMEIER
(Inst. d'Hyg. et de Méd. du Travail, Essen)

Conférence :

Nouvelles avancées en spectrométrie de
masse à trappe ionique
Jean-Claude TABET
(Université Pierre et Marie Curie, Paris)

Communications orales :

16.40-17.00 Influence du degré de polymérisation
des tanins procyanidiques des vins
rouges mesurés par LSIMS
sur leur activité antiradicalaire
N. SAINT-CRICQ DE GAULEJAC,
G. BOURGEOIS et N. VIVAS

Communications orales :

Température effective dans un piège
quadripolaire
C. AFONSO, F. FOURNIER, P. BRETON,
F. MODESTE et J.-C. TABET

17.00-17.20 Determination of ascorbic acid in
human skin by gas chromatography-
mass spectrometry
N. LEVEQUE, S. MARY, S. MAKKI,
H. ANDRIAMBOAVONJY, P. MURET, J. HENRY
P. HUMBERT, J. VEBREL et D. ALBER

Un détecteur de masse pour la
Chromatographie Liquide Haute Performance
Karima BAUDIN

17.20-17.40 Application de la spectrométrie de masse
à l'étude du métabolisme de la
17 α -méthyltestostérone chez le veau
A. S. CLOUET, B. LE BIZEC, D. MAUME,
F. MONTEAU et F. ANDRE

Mesures de masses exactes en LC-MS et
MS/MS avec des analyseurs à temps de vol
orthogonaux par commutation rapide et
automatisée entre deux sprays
John RONTREE et Christian CLAUDE

17.40-18.00 Chromatographie gazeuse couplée
à la spectrométrie de masse de rapport
isotopique : nouvelles données relatives
au contrôle des hormones naturelles
V. FERCHAUD, B. LE BIZEC,
F. MONTEAU et F. ANDRE

Possibilités d'un analyseur trappe ionique
couplé à l'electrospray pour l'analyse des
protéines
N. CARTE, E. LEIZE
et A. VAN DORSSELAER

18.00-18.20 Étude de la stabilité des interactions non-
covalentes RAMEB/ stéroïde et RAMEB/
excipient dans une forme galénique par
spectrométries de masse et de RMN
S. PILARD, S. MEUDAL, X. POISSON,
A. PETIT, F. PLUVY, N. BESNARD et W. LUIJTEN

Source ionique par capture d'électrons de
Rydberg pour la spectrométrie de masse de
polluants atmosphériques
J. ANDRE, G. BRINCOURT, M. CARETTE,
P. PERRIER et Y. ZEREGA

19.30-21.00 Visite du Musée rénové des Beaux Arts, place Stanislas

20.00-24.00 Réunion du Conseil d'Administration de la SFSM

MERCREDI MATIN

8.00-12.00 S4 : Environnement, Géologie

Salle LÉOPOLD

Animation : A. ENSMINGER. Modération :
A. ENSMINGER, J.-M. GUEHL, J.-L. DUPOUEY.
Microphones : C. BRYSELBOUT, Y. BERNARDI,
E. DAMBRINE

Conférences :

8.00-8.40

Utilisation des isotopes stables dans
les cernes d'arbres pour l'étude
des changements environnementaux
Jean-Luc DUPOUEY (INRA, Nancy)

8.40-9.20

Analyses chimiques et isotopiques par
microsonde ionique : applications aux études
de l'environnement passé ou présent
Etienne DELOULE (CNRS, Vandœuvre)

9.20-10.00

Pause-café

Communications orales :

10.00-10.20

Novel tandem mass spectrometric
measurements of organotin compounds
J. H. BANOUB, G. V. SHEPPARD,
H. J. HODDER, J. D. MEADE et
A. A. H. MANSOUR

10.20-10.40

Spectrométrie de masse (^{13}C , ^{14}C) et
RMN : étude des processus d'humification
dans les sols
S. A. QUIDEAU

10.40-11.00

Caractérisation de la matière organique
de sédiments de rivière anthropisés par
couplage pyrolyse flash-chromatographie
en phase gazeuse-spectrométrie de masse
L. MANSUY, A. GROSJEAN,
E. GARNIER-ZARLI et Y. BOUREZGUI

11.00-11.20

Origine du prélèvement hydrique et
minéral dans des peuplements forestiers
mêlés du nord de la Suède. Utilisation
des isotopes de l'oxygène et du strontium
A. POSZWA, E. DAMBRINE, B. POLLIÉ
et M. LOUBET

11.20-11.40

Contrôles climatiques de la composition
isotopique en oxygène de plantes modernes
provenant de zones humides en Suisse
G. MÉNOT et S. J. BURNS

11.40-12.00

Étude de la spéciation de l'uranium
par spectrométrie de masse
avec source électrospray
C. MOULIN, N. CHARRON, G. PLANCQUE
et H. VIRELIZIER

S5 : Mécanismes, Chimie Organique

Salle GALLÉ

Animation : M. SWISTEK
Modération : M. SWISTEK, G. BOUCHOUX
Microphones : B. LICHTFOUSE, P. HENNER

Conférences :

Quelle chimie organique dans un spectromètre
de masse?

Guy BOUCHOUX
(Ecole Polytechnique, Palaiseau)

Pulvérisation et émission ionique
sous impacts d'agrégats

Alain BRUNELLE
(Institut de Physique Nucléaire, Orsay)

Pause-café

Communications orales :

Électronébulisation de glycine (GLY) en solution en
présence de sel de cuivre (II) ou de Zinc (II).
Réactivité comparée des ions moléculaires formés :
GLYH⁺, GLYCu⁺ et [GLY-H + Zn]⁺
F. ROGALEWICZ, G. OHANESSIAN et
Y. HOPPILLIARD

Ionisation chimique en mode négatif avec un
piège ionique couplé à une source externe
haute pression : application à la détection des
explosifs
T. FAYE, A. BRUNOT G. WELLS et J.- C. TABET

Mécanismes de formation des ions obtenus par
ablation ionisation laser de chromates alcalins et
alcalino-terreux. Étude expérimentale et
théorique
F. AUBRIET, B. MAUNIT et J. F. MULLER

FAB-MS/MS et ESI-MS/MS : les ions
précurseurs les plus "froids" fragmentent par
les voies de plus haute énergie d'activation.
Un paradoxe ?
L. SERANI et O. LAPREVOTE

Vers l'étude de réactions ion-molécule dans
un tandem Q/ITMS
V. STEINER, A. BRUNOT et J. C. TABET

Isomérisations céto-énolique unimoléculaire et
catalysée de l'acétophénone : deux voies
réactionnelles distinctes
J. CHAMOT-ROOKE, G. VAN DER REST,
P. MOURGUES et H. E. AUDIER

MERCREDI APRÈS-MIDI

- 12.00-13.00 **Déjeuner** *Salle MAJORELLE*
- 13.00-15.00 **Visite de l'exposition** *Hall GEORGES DE LA TOUR*
- 13.00-15.00 **COMMUNICATIONS PAR AFFICHES** *Hall GEORGES DE LA TOUR*
Animation : P. HENNER, M. SWISTEK
Session F : **Alliments** (n° 1-4)
Session G : **Mécanismes réactionnels** (n° 5-17)
Session H : **Réactions Ion-molécule** (n° 18-29)
Session I : **Electrospray** (n° 30-38)
Session J : **Biologie** (n° 39-50)
- 15.00-16.20 **SESSION 6 : ALIMENTS** *Salle LÉOPOLD*
Animation : C. ROBIN. Modération : C. ROBIN, J.-L. LE QUÉRÉ, N. VIVAS.
Microphones : P. HENNER, B. LICHTFOUSE
- Conférences plénières :**
- 15.00-15.40 Quelques aspects de l'apport de la spectrométrie de masse dans l'étude des aliments
Jean-Luc LE QUÉRÉ (*INRA, Dijon*)
- 15.40-16.20 Apports récents de la spectrométrie de masse à la recherche œnologique.
Application à la caractérisation des arômes et à l'étude de composés phénoliques
(couleur et saveur des vins)
Nicolas VIVAS (*Tonnellerie Demptos, St. Caprais de Bordeaux*)
- 16.20-16.40 **Présentation par le Lauréat du Prix 1999 de la SFSM :**
Études expérimentales et théoriques de la réactivité en phase gazeuse des ions
phosphonium $(HO)_2P=O^+$ vis à vis du méthanol
Sylvain GEVREY, A. LUNA, M.-H. TAPHANEL et J.-P. MORIZUR
- 16.40-17.20 **Assemblée Générale de la SFSM**
- 19.00-20.00 **Accueil Officiel de la Ville de Nancy** *Hôtel de Ville, place Stanislas*
André ROSSINOT Maire de Nancy, Ancien Ministre
Eric LICHTFOUSE Président du Comité Local d'Organisation
Yannik HOPPILLIARD Présidente de la Société Française de Spectrométrie de Masse
Joëlle VINH Présidente du Club des Jeunes de la SFSM
Carine BRYSELBOUT Organisatrice du Colloque des Jeunes
- 20.00-24.00 **Dîner de Gala** *Hôtel de Ville, place Stanislas*
Animation Casino : Roulettes, tables de boule, black-jack servies par croupiers et
croupières professionnels. Vente aux enchères
- 24.00 **Repos**

- 8.40-12.40 **SESSION 7 : BIOLOGIE, CHIMIE COMBINATOIRE** *Salle LÉOPOLD*
Animation : J.-M. ZIEGLER. Modération : J.-M. ZIEGLER, J.-L. AUBAGNAC,
A. Van DORSSELAER. Microph. : P. HENNER, B. LICHTFOUSE, C. BRYSELBOUT
- Conférence plénière :**
- 8.40-9.20 Utilisation de la spectrométrie de masse en chimie combinatoire
Jean-Louis AUBAGNAC (*Université de Montpellier*)
- 9.20-10.00 **Pause-café**
- Communications orales :**
- 10.00-10.20 Structural Characterization of Intact Covalently Linked DNA Adducts
by Electrospray Mass Spectrometry
J. BANOUB, S. COMBDEN, J. BANOUB, G. SHEPPARD et H. HODDER
- 10.20-10.40 Démonstration de l'interaction entre les sous-unités 4 et g de l'ATP synthase de
Saccharomyces cerevisiae par réticulation et identification des sous-unités réticulées
par spectrométrie de masse MALDI
**F. RUSCONI, V. SOUBANNIER, S. CHAIGNEPAIN, G. ARSELIN, J. VAILLIER,
J.-M. SCHMITTER et J. VELOURS**
- 10.40-11.00 Étude par LC/ESI/MS des mécanismes moléculaires de maturation des antigènes présentes
aux lymphocytes
O. SCHILTZ, S. MOREL, F. LEVY, B. VAN DEN EYNDE, J. E. GAIRIN et B. MONSARRAT
- 11.00-11.20 Détection de bactéries par analyse de leur profil en méthyl ester d'acides gras par méthylation
"in situ"-pyrolyse-ITMS (TCPy/MS/MS)
F. L. WIND, P. STEPHAN et J.-C. TABELT
- 11.20-11.40 Contrôle de synthèses organiques en phase liquide
**C. ENJALBAL, F. LAMATY, R. LAZARO, F. NATIVEL, B. SAUVAGNAT,
J. MARTINEZ et J.-L. AUBAGNAC**
- 11.40-12.00 Analyse par spectrométrie de masse et modélisation moléculaire des interactions acide
nucléique-protéine. Développement d'une méthode de photocomplexation par laser UV
L. THION, F. COUDERC et M. ERARD
- 12.00-12.20 Étude de la conformation en phase gazeuse des oligonucléotides par le couplage
nanoelectrospray-piège ionique
A. FAVRE, F. GONNET et J.-C. TABELT
- 12.20-12.40 Caractérisation structurale de la protéine FUR par modifications chimiques et spectrométrie
de masse
A. GONZALEZ DE PEREDO, I. MICHAUD-SORET et E. FOREST
- 13.00-14.00 **Déjeuner** *Salle MAJORELLE*
- Conférence plénière :**
- 14.00-14.40 De la spectrométrie de masse moléculaire à la spectrométrie de masse supramoléculaire en
chimie et biologie
Alain VAN DORSSELAER (*Université Louis Pasteur, Strasbourg*)
- 15.00 **Clôture des 16^e Journées**
Eric LICHTFOUSE
Carine BRYSELBOUT
Joëlle VINH
Yannik HOPPILLIARD

LISTE DES COMMUNICATIONS PAR AFFICHE

Session A : ENVIRONNEMENT (n° 1-15) MARDI

- 1 ANALYSE DES COMPOSES AROMATIQUES POLYCYCLIQUES ASSOCIES AUX PARTICULES ATMOSPHERIQUES EN MILIEU URBAIN
S. NICOL, J. DUGAY et M-C. HENNION
- 2 DES FOSSILES PÉTROLIERS DANS LES BOUES DE STATION D'ÉPURATION
C. PAYET, C. BRYSELBOUT, J.L. MOREL et E LICHTFOUSE
- 3 DISTILLATION ATMOSPHERIQUE DES HAPs À PROXIMITÉ D'UNE AUTOROUTE
C. BRYSELBOUT, J. CARSIGNOL et E. LICHTFOUSE
- 4 PHYTOREMÉDIATION DES HYDROCARBURES AROMATIQUES POLYCYCLIQUES
P. HENNER et E. LICHTFOUSE
- 5 UTILISATION DE LA GC-MS POUR L'ETUDE DE LA BIODEGRADATION D'HYDROCARBURES AROMATIQUES POLYCYCLIQUES DANS UN SOL
P. BINET, J. M. PORTAL et C. LEYVAL
- 6 ETUDE DES RÉACTIONS ION-MOLÉCULE D'H.A.P. ET D'HÉTÉROPOLYAROMATIQUES DANS UN PIÈGE QUADRIPOLAIRE
SCHMITT C., MULLER J.F. et MANUELLI P.
- 7 APPLICATIONS DES COUPLAGES CHROMATOGRAPHIE EN PHASE GAZEUSE- SPECTROMETRIE DE MASSE (GC-MS) ET PYROLYSE FLASH GC-MS (PyGC-MS) POUR L'ETUDE DES POLLUTIONS ORGANIQUES DANS DES SEDIMENTS AQUATIQUES CONTINENTAUX
P. FAURE et P. LANDAIS
- 8 DETERMINATION DE LA COMPOSITION ISOTOPIQUE DU CARBONE ($\delta^{13}\text{C}$) DANS LE CAS DE L'ETUDE DES EFFETS DE L'OZONE EN INTERACTION AVEC UNE SECHERESSE EDAPHIQUE SUR LE PIN D'ALEP (*Pinus halepensis* Mill.)
RICHARD B, LE THIEC D, RADNAI F, ROSE C et NOURRISSON G
- 9 DISCRIMINATION ISOTOPIQUE DU CARBONE LORS DE LA RESPIRATION A L'OBSCURITE CHEZ LES PLANTES EN C3
MURIEL DURANCEAU, JALEH GHASHGHAIE et GABRIEL CORNIC
- 10 BEECH LITTER DECOMPOSITION AND FATE OF ORGANIC LITTER NITROGEN : A ^{15}N STUDY
ZELLER B., COLIN-BELGRAND M., DAMBRINE E. et MARTIN F.
- 11 ANALYSE PAR ELECTROSPRAY-MS-MS DE PRODUITS PROVENANT DE L'OXYDATION DE PHENYLUREES EN MILIEU AQUEUX
L. AMIR-TAHMASSEB, E. BURGEOT, L. KERHOAS, E. RATHAHO, L. DEBRAUWER et J. EINHORN
- 12 CONTRIBUTION A L'ETUDE DE SAPONINES PAR ELECTROSPRAY-MS-MS
S. LANGLOIS, L. KERHOAS, L. SERANI, O. LAPREVOTE et J. EINHORN
- 13 ETUDE D'UN COPOLYMERE AMPHIPHILE PAR CHROMATOGRAPHIE D'EXCLUSION STERIQUE ET SPECTROMETRIE DE MASSE MALDI-TOF
J.C. BLAIS, M. TESSIER, C. RODRIGUES, G. BOLBACH, E. MARECHAL et J.C. TABET
- 14 DIFFÉRENCIATION ET CARACTÉRISATION DES DIFFÉRENTS DEGRÉS D'OXYDATION DU MANGANÈSE
COURRIER B., AUBRIET F., MAUNIT B., MULLER J.F. et CHABANET M.
- 15 LA DISCRIMINATION ISOTOPIQUE DU CARBONE COMME OUTIL D'EVALUATION DE LA VARIABILITÉ GÉNÉTIQUE DE L'EFFICIENCE D'UTILISATION DE L'EAU CHEZ LE PIN MARITIME
J.M. GUEHL, D. SANDQUIST, P. COSTA et C. PLOMION

Session B : ARCHÉOLOGIE (n° 16-21) MARDI

- 16 ÉLUCIDATION DE LA CONSTITUTION MOLÉCULAIRE D'ÉCORCES ET DE BRAIS ARCHÉOLOGIQUES ET CONTEMPORAINS PAR CPG-SM : APPLICATION À L'IDENTIFICATION D'ADHÉSIFS ARCHÉOLOGIQUES
Nicolas GARNIER et Martine REGERT
- 17 LE DELTA ¹⁵N DES SOLS FORESTIERS ACTUELS, TEMOIN DE LEURS USAGES ANTIQUES
MOARES DOMÍNGUEZ C., DAMBRINE E., DUPOUEY J.L. et POLLIER B
- 18 CARACTÉRISATION DES MATÉRIAUX ORGANIQUES PIÉGÉS ET CONSERVÉS DANS DES CÉRAMIQUES ARCHÉOLOGIQUES
MARTINE REGERT et DENIS RAMSEYER
- 19 RECHERCHE DE PRECURSEURS CHIMIQUES RESPONSABLES DE LA COLORATION DU BOIS DE NOYER PAR MALDI-FTICRMS
P.J. CALBA, G. KRIER, J.F. MULLER, P. BURTIN et G. JANIN
- 20 IDENTIFICATION PAR PYROLYSE -MÉTHYLATION SIMULTANÉE /CPG-SM DE PAPIERS TRANSPARENTS ANCIENS (HUILÉS, VERNIS ET CIRÉS)
P. RICHARDIN, A. DEMARQUE, G. BIZOUÂRD et S. BONNASSIES-TERMES
- 21 IDENTIFICATION PAR CPG/SM ET PY/CPG/SM D'UN BRAI DE PIN ARCHÉOLOGIQUE
P. RICHARDIN, A. DEMARQUE, A. MALANDIN et S. BONNASSIES-TERMES

Session C : TOXICOLOGIE (n° 22-31) MARDI

- 22 ETUDE DU MÉTABOLISME DU PROCHLORAZE CHEZ LA TRUITE
L. DEBRAUWER, E. RATHAHO, G. BOUDRY, M. BARADAT et J.P. CRAVEDI
- 23 ETUDE DU MECANISME DE FORMATION DES IONS LORS DE L'ABLATION LASER DE FIBRES NATURELLES (CHEVEUX)
L. VERNEX-LOSET, G. KRIER, B. COURRIER et J.-F. MULLER
- 24 DÉTECTION DE L'ADMINISTRATION DE DIAZEPAM DANS LES POILS ET LES CRINS DE CHEVAUX
M.A. POPOT, P. MACIEJEWSKI, C. JOUVEL, P. GARCIA, Y. BONNAIRE et J.C. TABET
- 25 DEVELOPPEMENT DE METHODES BASEES SUR LE COUPLAGE LC-MS POUR LA MISE EN EVIDENCE DE CORTICOSTEROIDES UTILISES ILLEGALEMENT DANS L'ESPECE BOVINE
ANTIGNAC JP, LE BIZEC B, MONTEAU F et ANDRE F
- 26 IDENTIFICATION ET DIFFERENCIATION DES HORMONES DE CROISSANCE PROTEIQUES ENDOGENES ET EXOGENES DANS LES ESPECES BOVINE ET PORCINE
ROCHUT N, LE BIZEC B, MONTEAU F et ANDRE F
- 27 DETECTION DE LA COLCHICINE PAR COUPLAGE CHROMATOGRAPHIE LIQUIDE - SPECTROMETRIE DE MASSE (HPLC- ESI - MS). DETERMINATION DES TAUX SANGUINS ET TISSULAIRES DANS LE CAS D'INTOXICATION MORTELLE OU DE SUIVI THERAPEUTIQUE
A. RAMEY, L. HUMBERT, M. KOUACH, C. CHOPIN, M. LHERMITTE et G. BRIAND
- 28 ANALYSE ISOTOPIQUE DU CARBONE DE CORTICOSTEROIDES ENDOGENES
M. BECCHI, F. PERRET, G. DONAZZOLO et D. FOREST
- 29 STUDY OF DINITROPHENYLHYDRAZONE DERIVATIVES OF ALDEHYDIC PRODUCTS RESULTING FROM LIPID PEROXIDATION BY GAS AND LIQUID CHROMATOGRAPHY-MASS SPECTROMETRY
ENOIU M., VILLOUTREIX J., WELLMAN M., LEROY P., ZIEGLER J.M. and SIEST G.
- 30 ANALYSE DE FORMES ESTERIFIEES DE L'ESTRADIOL PAR COUPLAGE LC-ESI-MS/MS
E. RATHAHO, D. RAO, A. PARIS et L. DEBRAUWER
- 31 IDENTIFICATION DES MÉTABOLITES DU 17 β -ŒSTRADIOL FORMES IN VITRO PAR COUPLAGE LC-MS/MS
E. RATHAHO, A.HILLENWECK, A. PARIS et L. DEBRAUWER

- 32 CARACTERISATION DE DIFFERENTES SURFACES DE TITANE UTILISEES EN IMPLANTOLOGIE DENTAIRE PAR MICROSONDE LASER FTMS
G. KRIER, L. VERNEX-LOSET, P.J. CALBA, J.F. MULLER, E.M. LEIZE, E.J. LEIZE et A. VAN DORSSELAER
- 33 OPTIMISATION D'UNE MÉTHODE DE DOSAGE DE COBALAMINES, CONTENUES DANS LE SANG, PAR SPECTROMÉTRIE DE MASSE LC-MS ET LC-MS/MS
S. BOURCIER ET J.F. BENOÎT
- 34 DETERMINATION PAR ESMS DES CONSTANTES THERMODYNAMIQUES DE PLATINATION NON COVALENTE D'ADN
N. CARTE, N. POTIER, F. LEGENDRE, J.C. CHOTTARD, E. LEIZE et A. Van DORSSELAER
- 35 IDENTIFICATION ET ACTIVITE IMMUNOSUPPRESSIVE IN VITRO D'UN NOUVEAU METABOLITE DU SDZ-RAD ISOLE A PARTIR DE MICROSOMES DE FOIE DE PORC
G. LHOËST, R.K. VERBEECK, N. MATON et D. LATINNE
- 36 MISE EN ÉVIDENCE DE LA SYNTHÈSE DE NO CHEZ DES BACTÉRIES ALIMENTAIRES (*Propionibacterium acidipropionic*) PAR MARQUAGE ¹⁵N ET DOSAGE EN IRMS
AVICE J.C., ROLAND N., OURLY A., LAINÉ P. et BOUCAUD J.
- 37 MASS SPECTROMETRY AS A USEFUL TOOL FOR THE DEVELOPMENT AND VALIDATION OF A HIGH PERFORMANCE LIQUID CHROMATOGRAPHIC METHOD FOR THE MEASUREMENT OF BIOLOGICAL THIOLS
SALAZAR J.-F., SCHORR H., HERMANN W., ZIEGLER J.M., SIEST G. and LEROY P.
- 38 COMPARAISON DES STRUCTURES DE LIPIDES A ISOLES DE DIFFERENTES ESPECES DE *Yersinia*
L. AUSSEL, H. THERISOD, D. KARIBIAN, M.B. PERRY, M. BRUNETEAU, C. DEPRUN et M. CAROFF
- 39 ETUDE DU PHOTOSENSIBILISANT M-THPC PAR SPECTROPHOTOMÉTRIE UV/VISIBLE ET PAR MALDI COUPLÉE À LA SPECTROMÉTRIE DE MASSE
M. ANGOTTI, B. MAUNIT, J.-F. MULLER, L. BEZDETNYA et F. GUILLEMIN
- 40 PROFIL MÉTABOLIQUE DES ACYLCARNITINES ET DES ACIDES AMINÉS PAR ELECTROSPRAY/MS/MS
F. DELOLME, C. VIANEY-SABAN, M. BECCHI, P. DIVRY et M. MATHIEU
- 41 ETUDE DE L' INSULINE-LIKE GROWTH FACTOR (IGF1) ET DE POLYPEPTIDES APPARENTÉS EN MODE ESI/MS
S. BOBIN, M. A. POPOT, Y. BONNAIRE, et J. C. TABEL
- 42 PROFIL DES ACYLCARNITINES PAR LA TECHNIQUE D'ELECTROSPRAY – SPECTROMÉTRIE DE MASSE TANDEM QUADRIPOLAIRE : OPTIMISATION DES CONDITIONS D'ANALYSE
G. GRELLET, Y. HOPPILLIARD, O. RIGAL et S. BOURCIER
- 43 QUANTITATIVE ANALYSIS OF HUMAN SERUM 18 HYDROXY CORTICOSTERONE BY HIGH-PERFORMANCE LIQUID CHROMATOGRAPHY COUPLED TO ELECTROSPRAY IONIZATION MASS SPECTROMETRY. REFERENCE VALUES IN HEALTHY ADULTS
GHULAM. A, KOUACH. M, BOERSMA. A, VANTYGHM. M. C. and BRIAND G.
- 44 EVOLUTION DU SPECTRE DE MASSE DE L'ALBUMINE SERIQUE HUMAINE PAR ELECTRONEBULISATION DANS L'EAU EN MODE POSITIF ET NEGATIF
A. MARTIN-GIRARDEAU, K. LOMBAERT et M.F. RENU-GONNORD

- 45** LA GD-MS POUR L'ANALYSE DES VERRES.
M. TABARANT et J.M. LAMEILLE
- 46** L'INJECTEUR A.P.S. : UN NOUVEAU CONCEPT D'INJECTION DIRECTE AUTOMATIQUE EN PHASE SOLIDE POUR CG/SM
Philippe PARSY et Isabelle FAUGERON
- 47** SPECTROMETRE DE MASSE A DOUBLE PIEGE QUADRIPOLAIRE R.F.
J. ANDRE, G. BRINCOURT, M. CARETTE, P. PERRIER et Y. ZEREGA
- 48** RÉACTIONS D'ATTACHEMENT D'IONS SODIUM DANS UN PIÈGE IONIQUE : PRINCIPE ET APPLICATIONS
T. FUJII, A. BRUNOT, T. FAYE et M. SABLIER
- 49** QUANTITATIVE ANALYZE OF SOLID MATERIALS BY LMS
Gregory KUZNETSOV
- 50** COMPARAISON DE DISPOSITIFS DE PYROLYSE LASER COUPLÉE À LA SPECTROMÉTRIE DE MASSE POUR LA CARACTÉRISATION DE POLYMÈRES MASSIFS
B. COURRIER et J.F. MULLER

Session F : **ALIMENTS** (n° 1-4) MERCREDI

- 1 LA SPECTROMETRIE DE MASSE DANS LA MODELISATION DES OPERATIONS DE CHAUFFE EN TONNELLERIE
C. ABSALON, G. BOURGEOIS, F. BENOIST, C. VITRY et N. VIVAS
- 2 ANALYSE QUALITATIVE DES PRODUITS VOLATILS CONTENUS DANS LA SCIURE DU PIN MARITIME PAR COUPLAGE HEADSPACE/GC/MS
C. GARDRAT , C. DOISI , C. GENET, L. LAFON et C. VITRY
- 3 ETUDE DE LA PERMEABILITE AUX GAZ PERMANENTS D'UN FILM BIODEGRADABLE PAR SPECTROMETRIE DE MASSE
METRO F., RAMPON V. et NICOLAS N.
- 4 MS/MS D'UN PETIT PEPTIDE GLYCOSYLÉ NATUREL : COMPARAISON ENTRE CID A HAUTE ÉNERGIE ET MSⁿ PAR TRAPPE D'IONS
N. SOMMERER, N. CARTE, D. PROME, J.-L. LE QUERE et C. SALLES

Session G : **MÉCANISMES RÉACTIONNELS** (n° 5-17) MERCREDI

- 5 ETUDE SYSTÉMATIQUE DE STÉROÏDES MODÈLES PAR MS/MS SUR UN TANDEM TRIPLE QUADRIPOLAIRE ET UNE TRAPPE À IONS
C. VAN AERDEN, F. FOURNIER, L. DEBRAUWER, A. PARIS et J. C. TABET
- 6 CARACTÉRISATION DE DIASTÉRÉOISOMÈRES DANS UN PIÈGE IONIQUE
M.C. PERLAT, E. RATHAHO, M. SABLIER et J.C. TABET
- 7 GENERATION BY FLASH VACUUM THERMOLYSIS AND CHARACTERIZATION BY MASS SPECTROMETRY OF UNSTABILIZED CYCLOALKENETHIONES
E. BRIARD, J. LEVILLAIN, J.-L. RIPOLL, A. MARCUAL AND C. LANGE
- 8 ETUDE DES DÉCOMPOSITIONS INDUITES PAR COLLISION D'ACIDES AMINÉS ET DE PEPTIDES CATIONISÉS PAR Ag⁺ PRODUITS PAR ESI-MS
W. BUCHMANN, H. LAVANANT et Y. HOPPILLIARD
- 9 ETUDE THEORIQUE ET PAR ESI/MS/MS DES FRAGMENTATIONS DU COMPLEXE GLYCINE DEPROTONÉE / Zn²⁺
F. ROGALEWICZ, G. OHANESSIAN et Y. HOPPILLIARD
- 10 ANALYSE D'OLÉFINES DANS DES CONDITIONS D'IONISATION CHIMIQUE PAR LE CATION Cu⁺ : COUPLAGES GC/CI-FAB/MS et GC/CI-FAB/MS/MS
P.J. FORDHAM, J. CHAMOT-ROOKE, E. GUIDICE, J. TORTAJADA et J.-P. MORIZUR
- 11 ÉTUDE DE LA RÉACTIVITÉ EN PHASE GAZEUSE DE COMPLEXES FORMÉS PAR RÉACTION ION/MOLÉCULE ENTRE Cu⁺ ET DES CÉTONES ALIPHATIQUES
P.J. FORDHAM, M. DESCHASSE, J. TORTAJADA et J.-P. MORIZUR
- 12 ÉTUDE EXPÉRIMENTALE ET THÉORIQUE DE LA STABILITÉ ET DE LA RÉACTIVITÉ DES COMPLEXES [URÉE-Cu⁺] EN PHASE GAZEUSE
A. LUNA, B. AMEKRAZ, J.P. MORIZUR, J. TORTAJADA, O. MÓ et M. YÁÑEZ
- 13 SPECTROMÉTRIE DE MASSE MALDI/TOF DE POLYOXOANIONS
I. FOURNIER, C. AFONSO, C.R. MAYER, R. THOUVENOT, et J.C. TABET
- 14 APPORT DE LA SPECTROMETRIE DE MASSE A L'ANALYSE DE COMPOSES DE DIMENSIONS NANOMETRIQUES
R. CHETY, J.J. GAUMET et J.F. MULLER
- 15 QUELQUES PARAMETRES ET MECANISMES LIMITANT LA RESOLUTION EN MALDI-TOF
C. MARINACH, I. FOURNIER, J.-C. TABET et G. BOLBACH
- 16 ETUDE DU MECANISME DE DESORPTION/IONISATION PAR LASER DE QUELQUES MOLECULES ORGANIQUES (M < 200 Da)
M. BENAZOUZ, B. HAKIM, J.L DEBRUN, D.STRIVAY et G. WEBER
- 17 SPECTROMETRIE DE MASSE DE MOLECULES OU D'AGREGATS « NEUTRES »
S. CARLES, F. LECOMTE, Y. BOUTEILLER, J.-P. SHERMANN et C. DESFRANCOIS

Session H : RÉACTIONS ION-MOLÉCULE (n° 18-29) MERCREDI

- 18 REACTIONS ION-MOLECULES EN PHASE GAZEUSE DES COMPOSES 1,6-DIAZA-3,8-DIOXABICYCLO[4.4.1]UNDECANE ET BIS(OXAZOLIDINE)METHANE
V. MONNIER, F. LIBOT, D. LESAGE, F. FOURNIER, J.C. TABET,
D.J. AITKEN ET H.-P. HUSSON
- 19 DISTINCTION ENANTIOMERIQUE DES R ET S MANDELATES DE METHYLE PAR IONISATION CHIMIQUE NEGATIVE AVEC DEUX GAZ CHIRAUX
V. MANCEL, N. SELLIER, D. LESAGE, F. FOURNIER et J.-C. TABET
- 20 REACTIVITE DE L'ACIDE ACETIQUE AVEC LES METAUX DE TRANSITION EN ESI/ITMS : ECHANGE DE LIGAND AVEC H₂O ET ECHANGE H/D
V. CARLESSO, C. AFONSO, F. FOURNIER et J.C. TABET
- 21 PIEGEAGE IONIQUE APPLIQUE AUX ETUDES DE CORRELATION « STRUCTURE-BASICITE » CARACTERISTIQUES DE NUCLEOSIDES ET NUCLEOSIDES MODIFIES
S. ALVES, F. FOURNIER, J.M. VALERY et J.C. TABET
- 22 UNE ECHELLE QUANTITATIVE D'AFFINITES POUR Na⁺ DE MOLECULES ORGANIQUES, INORGANIQUES ET BIOLOGIQUES. I. METHODES
S. HOYAU, K. NORRMAN, T.B. MCMAHON et G. OHANESSIAN
- 23 UNE ECHELLE QUANTITATIVE D'AFFINITES POUR Na⁺ DE MOLECULES ORGANIQUES, INORGANIQUES ET BIOLOGIQUES. II. RESULTATS
S. HOYAU, K. NORRMAN, T.B. MCMAHON et G. OHANESSIAN
- 24 COMPLEXATION DU GLYCEROL ET DU THIOGLYCEROL PAR LES CATIONS Li⁺, Al⁺ et Cu
E. LEON, L. BOUTREAU et J. TORTAJADA
- 25 RÉACTIVITÉ EN PHASE GAZEUSE DE Cu⁺ AVEC L'ACIDE PHOSPHORIQUE ET SON ESTER MONOMÉTHYLÉ : (HO)₃P=O et (HO)₂(OCH₃)P=O. MODÉLISATION DE L'INTERACTION EN PHASE GAZEUSE DE Cu⁺ AVEC LE GROUPE PHOSPHATE DES ACIDES NUCLÉIQUES
A. LUNA, S. GEVREY et J. TORTAJADA
- 26 ÉTUDE EXPÉRIMENTALE ET THÉORIQUE DE LA RÉACTIVITÉ EN PHASE GAZEUSE DES IONS PHOSPHONIUM (CH₃O)₂P=O⁺ AVEC DES OLÉFINES
É. LECLERC, M.-H. TAPHANEL, J. TORTAJADA et J.-P. MORIZUR
- 27 ETUDE THEORIQUE DE LA COMPLEXATION DE PETITES MOLECULES ORGANIQUES PAR LE MONOCATION Ag⁺
L. BOUTREAU, E. LEON, A. LUNA et J. TORTAJADA
- 28 ÉTUDE PAR ESI/MS/MS DE LA COMPLEXATION DE L'ACIDE GLYCOLIQUE PAR LES CATIONS Ag⁺, Cu⁺ et Cu²⁺
L. BOUTREAU, J. TORTAJADA, P. TOULHOAT, C. MOULIN et H. VIRELIZIER
- 29 COMPORTEMENT DU GLUCOSE PERMETHYLE EN IMPACT ELECTRONIQUE, AUTO-IONISATION ET IC/NH₃ DANS UNE TRAPPE IONIQUE VARIAN IIITM
M. DA SILVA, M.C. PERLAT, E. DE HOFFMANN, B. DOMON et J.C. TABET

Session I : **ELECTROSPRAY (n° 30-38)** MERCREDI

- 30** CARACTERISATION DE COMPLEXES DERIVES DU BENZIMIDAZOLE PAR SPECTROMETRIE DE MASSE (MODE D'IONISATION ELECTROSPRAY)
R. ZNIBER, A. J. EL HAJJI, E. M. ESSASSI, R. ACHOUR, A. MOUSSAÏF et M. KOUACH
- 31** EMPLOI DES METAUX DE TRANSITION POUR LA COMPLEXATION EN ESI DE SUCRES DIAStereoisOMERES POUR LEUR DISTINCTION STRUCTURALE DANS UN PIEGE A IONS
V. CARLESSO, F. FOURNIER et J.C. TABET
- 32** IDENTIFICATION DE TOXINES PEPTIDIQUES PAR LC-ESI-ION TRAP
AFONSO C., FOURNIER F., BRETON P., MODESTE F., TABET J.C.
- 33** ETUDE PAR SPECTROMETRIE DE MASSE ELECTROSPRAY DE L'ADDITION NUCLEOPHILE SUR DES CATIONS BENZYLICIQUES DIVERSEMENT SUBSTITUES
D. LEMAIRE, C. COLLETTE, E. DE PAUW, L. SERANI et O. LAPREVOTE
- 34** SPECTROMETRIE DE MASSE ELECTROSPRAY RESOLUE EN ENERGIE DE COMPLEXES MOLECULE/CATION ALCALIN ET MOLECULE/AMMONIUM
M. HAUTREUX, D. LEMAIRE et O. LAPREVOTE
- 35** LSIMS-MS/MS HAUTE ÉNERGIE et NANOSPRAY-TRAPPE IONIQUE pour L'IDENTIFICATION d'une INSERTION dans un NOUVEAU VARIANT de l'HÉMOGLOBINE HUMAINE
D. PROMÉ, J. C. PROMÉ, H. WAJCMAN, N. CARTE, E. LEIZE et A. VAN DORSSELAER
- 36** CARACTERISATION PAR ESMS D'UNE SERIE DE COMPLEXES SYNTHETIQUES NON-COVALENTS DE CADMIUM DE FORME CYLINDRIQUE
H. NIERENGARTEN, E. LEIZE, A. GARCIA, J. M. LEHN, A. VAN DORSSELAER
- 37** SPECIATION DE COMPLEXES DE METAUX I PAR SPECTROMETRIE DE MASSE ELECTROSPRAY
COLETTE LEBRUN et PASCALE DELANGLE
- 38** ANALYSE D'UN MÉLANGE TENSIOACTIF DE COPOLYETHERS SEQUENCÉS PAR GC, GC-MS, SFC, FAB-MS, ES-MS ET MALDI-TOF
B. AMEKRAZ, H. VIRELIZIER, D. GAUDIN, C. MOULIN, J.-C. BLAIS, V. HALDYS et B. DESMAZIÈRES

Session J : **BIOLOGIE** (n° 39-50) MERCREDI

- 39 ETUDE TOPOLOGIQUE DE COMPLEXES MACROMOLÉCULAIRES PAR MARQUAGE CHIMIQUE DIFFÉRENTIEL ET SPECTROMÉTRIE DE MASSE
G. MARIE, L. SERANI et O. LAPREVOTE
- 40 APPORT DE LA SPECTROMETRIE DE MASSE A L'ETUDE DES PHENOMENES DE COOPERATIVITE MIS EN JEU DANS DES SYSTEMES BIOLOGIQUES COMPLEXES
H. ROGNIAUX, K. STRUPAT, D. TRITSCH, P. BARTH, V. BALL, J.-F. BIELLMANN et A. VAN DORSSELAER
- 41 SÉQUENÇAGE PAR SPECTROMÉTRIE DE MASSE MALDI-TOF ET ES-TI D'UN PEPTIDE IMPLIQUÉ DANS LA RÉPONSE IMMUNITAIRE SYSTÉMIQUE DE LA DROSOPHILE
N. CAVUSOGLU, N. CARTE, P. BULET, J. A. HOFFMANN et A. VAN DORSSELAER
- 42 IMAGERIE TOF-SIMS DE SYNTHÈSES PEPTIDIQUES SUPPORTÉES
C. DROUOT, C. ENJALBAL, R. COMBARIEU, J. MARTINEZ et J.-L. AUBAGNAC
- 43 SUIVI DE REACTIONS DE CYCLISATION PEPTIDIQUE PAR SPECTROMETRIE DE MASSE ESI
F. CAVELIER, C. ENJALBAL, M. EL HADDADI, J. MARTINEZ, P. SANCHEZ, J. VERDUCCI et J.-L. AUBAGNAC
- 44 ÉLUCIDATION STRUCTURALE PAR SPECTROMÉTRIE DE MASSE TANDEM DES GLYCOSPHINGOLIPIDES DE HOLOTHURIA COROPERTUSA
N. HUE, M. PAÍS, L. SERANI et O. LAPRÉVOTE
- 45 ANALYSE STRUCTURALE DU LIPIDE A DE *Helicobacter mustelae* ATCC 43772
H. THERISOD, M. MONTEIRO, M. B. PERRY et M. CAROFF
- 46 ETUDE PAR LC/MS DES LESIONS OXYDANTES FORMÉES SUR L'ADN DOUBLE BRIN PAR ACTION DE LA NUCLEASE CHIMIQUE MnTMPyP/KHSO₅
VIALAS C., CLAPAROLS C., RICHELME S., PRATVIEL G. et MEUNIER B.
- 47 FORMATION D'AGREGATS PROTEIQUES NON SPECIFIQUES EN MALDI: ABONDANCES ET ASPECTS DYNAMIQUES
V. LIVADARIS, J.C. TABET et J.C. BLAIS
- 48 GC-MS INVESTIGATION OF LIGNIN STRUCTURE IN A MUTANT PINE DEFICIENT IN CINNAMYL ALCOHOL DEHYDROGENASE
C. LAPIERRE, B. POLLET, J.J. MACKAY, D. DIMMEL et R.R. SEDEROFF
- 49 TERTIARY STRUCTURE OF SR CALCIUM ATPASE
A. A. MUNDT, E. FOREST, M. CUILLEL and Y. DUPONT
- 50 ANALYSE DE STRUCTURES N-GLYCANNIQUES MARQUÉES À L'AMINONAPHTALÈNE 3,6,8 SULFONATE PAR ÉLECTROPHORÈSE EN GEL DE POLYACRYLAMIDE ET DÉSORPTION LASER ASSISTÉE PAR MATRICE
J. LEMOINE, M. CABANES-MACHETEAU, M. BARDOR, J.C. MICHALSKI, L. FAYE and P. LEROUGE



ÉTUDE PAR ESI/MS/MS DE COMPLEXES D'INTÉRÊT DANS LE RETRAITEMENT DES COMBUSTIBLES IRRADIÉS

C. LAMOUROUX, H. VIRELIZIER, C. JANKOWSKI, J. C. TABET*, C. MOULIN

Laboratoire d'Analyse et Synthèse Organique, CEA Saclay/DCC/DPE/SPCP

*Laboratoire de Chimie Structurale Organique et Biologique, Université Pierre et Marie Curie

Les étapes d'extraction liquide-liquide employées dans le retraitement des combustibles irradiés utilisent le Tributylphosphate comme solvant. Au cours des différents cycles d'extraction, celui-ci subit des dégradations chimiques et radiolytiques conduisant principalement à la formation d'acide dibutylphosphorique (HDBP). Ce dernier est susceptible de précipiter et de former des complexes stables solubles avec certains produits de fission notamment le zirconium. La formation de ces précipités et la description de ces complexes dans le système biphasique TBP 30% dodécane/HNO₃ en fonction du ratio ligand métal¹ ont principalement été étudié en spectrométrie Raman et RMN.

L'objet de cette étude est d'évaluer les potentialités de la source electrospray couplée à la spectrométrie de masse triple quadrupole pour la description de ces complexes organométalliques. L'ionisation par Electrospray permet d'analyser des ions métalliques (mono et multichargés) à la fois complexés et solvatés. Cette technique reconnue comme méthode d'ionisation douce est présentée comme étant capable de transférer des espèces de la phase condensée vers la phase gazeuse tout en préservant l'identité chimique des solutés et la spécificité des associations en solution. Les résultats obtenus par ESI/MS/MS sur le système HDBP/Zr seront présentés et commentés.

1- V.Guédon, J.C.Thieblemont, Y. Revel, Journal of Nuclear Science and Technology, 31, 1, pp 48-61



**ANALYSES CHIMIQUES ET ISOTOPIQUES PAR MICROSONDE
IONIQUE : APPLICATIONS AUX ETUDES
DE L'ENVIRONNEMENT PASSE OU PRESENT.**

Etienne DELOULE, Nathalie VALLE et Claire ROLLION-BARD

CRPG-CNRS, 15 rue Notre Dame des Pauvres, BP20,
54501 Vandœuvre les Nancy Cedex (deloule@crpg.cnrs-nancy.fr),

La microsonde ionique est un spectromètre de masse dans lequel on analyse les ions secondaires émis par un échantillon soumis lui-même à un bombardement d'ions primaires. Cette technique présente ainsi l'avantage de pouvoir réaliser des analyses chimiques ou isotopique in situ sur des échantillons solides avec une résolution spatiale à l'échelle micrométrique, et une résolution en profondeur de quelques dizaines de nanomètres¹.

Cette possibilité d'analyses in situ à haute résolution a permis de développer de nombreuses applications dans les sciences de la terre, pour l'étude d'échantillons complexes à haute résolution, que ce soit pour déterminer les teneurs des minéraux des éléments en trace, en abondance trop faible pour être mesurée par microsonde ionique, ou la composition isotopique de nombreux éléments, tels que H, B, C, N, O, S, ... Pb². Parallèlement à ces développements analytiques, des microsondes ioniques dédiées aux Sciences de la Terre, avec des secteurs magnétiques de grands rayons, à haute résolution et haute sensibilité ont été mises au point (SHRIMP, CAMECA IMS 1270, VG Isolab 120)³.

Après avoir rappelé les principes de fonctionnement de ces instruments et leurs principales applications dans les sciences de la terre, deux exemples de leur utilisation dans l'étude de l'environnement présent ou passé seront présentés, avant de conclure en montrant les intérêts et les limites des mesures réalisées in situ.

• L'étude de l'altération des verres de stockages des déchets : notre société produit des quantités sans cesse croissantes de déchets, domestiques ou industriels. La vitrification est l'une des techniques envisagées pour confiner les déchets ultimes après traitement. Néanmoins, l'utilisation de verres silicatés comme matrice de confinement pose le problème du comportement à long terme de ces verres, et du relargage éventuel d'éléments polluants. L'utilisation de la microsonde ionique permet de réaliser des profils en profondeur des concentrations élémentaires ou des compositions isotopiques des éléments constituant d'échantillons de verre altéré préalablement de façon expérimentale, et de décrire ainsi les processus d'altération.

• L'enregistrement des rapports isotopiques de l'oxygène des océans par des microfossiles tels que les foraminifères planctoniques, ou les récifs de corail fourni l'enregistrement des paléo-températures, indispensable pour comprendre l'évolution du climat. L'analyse in situ par microsonde ionique de ce traceur isotopique nous permet de mieux définir de quel façon les conditions environnementales sont enregistrées par ces organismes, et qu'elles en sont les limites.

¹ Benninghoven A., Rudenauer F.G., and Werbner H.W., 1987, Secondary ion mass spectrometry : Basic concepts, instrumental aspect, applications and trends, Wiley, N.Y., 12227pp.

² Shimizu N. and Hart S.R., 1982, Application of ion probe to geochemistry and cosmochemistry, Ann. Rev. Earth and Planet. Sci., 10, 483-526.

³ Clement S.W.J., Compston W., and Newstead G., 1977, Design of a large, high resolution ion microprobe. Extended abstract, Int. Conf on SIMS, Muenster.

Schmacher M., de Chambost E., Mc Keegan K.D., Harrison T.M. and Mogeon H.N., (1993) investigation of methodology for in situ U/Pb dating of zircon with the CAMECA ims 1270. Abstract for SIMS IX meeting, Yokohama, Japan.



ÉTUDE DE LA SPÉCIATION DE L'URANIUM PAR SPECTROMÉTRIE DE MASSE AVEC SOURCE ELECTROSPRAY

C. MOULIN, N. CHARRON, G. PLANCOUE*, H. VIRELIZIER

Laboratoire d'Analyse et de Synthèse Organique, CEA Saclay - DCC/DPE/SPCP/LASO

91191 Gif-sur-Yvette * CEA (LASO) - CNRS (UMR 172)

La spéciation des actinides et des lanthanides, c'est-à-dire la répartition des différentes espèces chimiques (en particulier les complexes hydroxydes et carbonates) est d'une grande importance aussi bien dans le cadre du cycle du combustible (sites de stockage de déchets nucléaires) que dans un cadre environnemental plus général. Ces études requièrent une technique sensible, sélective et non intrusive. La spectrofluorimétrie laser à résolution temporelle (SLRT) répond à ces critères mais ne permet pas d'étudier les complexes non fluorescents (les complexes carbonates de l'uranium, par exemple). La spectrométrie de masse avec source électrospray semble également prometteuse pour de telles études. En effet, de nombreuses études ont déjà été menées et révèlent les potentialités de cette technique mais aussi ses limitations¹.

Dans un travail préliminaire, nous avons mis en évidence les points fondamentaux qu'il est nécessaire d'optimiser pour permettre la spéciation de l'uranium, à savoir le choix du solvant, la température de la source, la concentration en sels de la solution, la tension de cône, le débit de gaz séchant... L'ion uranyle UO_2^{2+} , le premier complexe hydroxyde UO_2OH^+ et l'espèce polynucléaire $(UO_2)_3(OH)_5^+$ ont été observées en fonction du pH². Une comparaison avec les résultats obtenus par SLRT a montré un bon accord³. L'ensemble de ces résultats sera présenté et discuté.

¹ Electropray Mass Spectrometry Applied to Inorganic and Organometallic Chemistry, *Mass Spectrometry Reviews*, 1995, 14, 79-106, R. Colton, A. D'Agostino, J. C. Traeger.

² Speciation of Uranium by Electropray Ionization Mass Spectrometry. Comparison with Time-Resolved Laser-Induced Fluorescence, *Anal. Chem.* 1999, Soumise, C. Moulin, N. Charron, G. Planque, H. Virelizier.

³ Time-Resolved Laser-Induced Fluorescence as a Unique Tool for Low-Level Uranium Speciation, *Applied Spectroscopy*, 1998, Vol. 52, N° 4, 528-535, C. Moulin, I. Laszak, V. Moulin, C. Tondre.

**LA GD-MS POUR L'ANALYSE DES VERRES****M. TABARANT – JM. LAMEILLE**

CEA Saclay – DCC/DPE/SPSC/LECSI

Le couplage d'une source à décharge lumineuse avec un spectromètre de masse haute résolution est une technique analytique couramment utilisée pour la détermination multi-élémentaire de traces et ultra-traces ainsi que de rapports isotopiques dans des échantillons conducteurs.

L'analyse élémentaire d'échantillons non-conducteurs peut aussi être réalisée par GD-MS mais nécessite une préparation préalable de l'échantillon tel que : broyage du prélèvement, mélange avec un liant conducteur, pastillage. L'utilisation d'un générateur radio-fréquence comme système d'alimentation électrique de la source d'ions permet de s'affranchir de tous traitements de l'échantillon. Nous montrons les performances de la méthode et notamment les limites de détection obtenues qui sont de l'ordre de 10 à 100 nanogrammes par gramme.

L'utilisation du générateur RF ouvre une nouvelle voie vers l'analyse de surface (1 à 50 microns) d'échantillons isolants. Nous montrons l'influence des différents paramètres de fonctionnement de la lampe à décharge comme la puissance délivrée par le générateur et la pression de gaz plasmagène sur la forme des cratères et la vitesse d'érosion. Après optimisation de ces derniers, l'obtention de cratères dont la surface est parallèle à celle de l'échantillon est possible et permet de suivre la concentration d'isotopes en fonction de la profondeur érodée. Des exemples d'impacts obtenus sur des miroirs "multi-couches" sont présentés.



**SPECIATION DE COMPLEXES DE METAUX f PAR SPECTROMETRIE DE MASSE
ELECTROSPRAY**

COLETTE LEBRUN, PASCALE DELANGLE

Laboratoire de Reconnaissance ionique et des Matériaux Moléculaires
Service de Chimie Inorganique et Biologique
Département de Recherche sur la Matière Condensée
CEA-Grenoble

La séparation Actinides(III) / Lanthanides (III) par extraction liquide liquide est un problème difficile car les propriétés chimiques de ces deux séries de cations sont très similaires. Nous nous intéressons, dans ce contexte, à la discrimination des An (III) en présence de Ln (III) par des ligands organiques. Afin de mieux comprendre les paramètres déterminant l'extraction sélective de ces ions, nous nous proposons d'étudier, dans un premier temps, les phénomènes mis en jeu en solution : nature des espèces formées et caractéristiques thermodynamiques et cinétiques des équilibres présents. L'utilisation de la spectrométrie de masse electrospray (ESMS) pour caractériser qualitativement la distribution des ions présents en solution est maintenant assez répandue, dans le domaine de la chimie de coordination.

Nous présentons ici l'étude par ESMS de complexes de cations lanthanides trivalents avec des ligands polydentes à donneurs oxygénés et/ou azotés. L'analyse des solutions à différents rapports métal/ligand a permis de confirmer voire déterminer la nature des espèces mises en évidence par résonance magnétique nucléaire. Les expériences de spectrométrie de masse en tandem (MSMS) sont nécessaires pour différencier les espèces fragmentées, des espèces initialement présentes en solution. Il apparaît donc à l'issue de cette étude que la spectrométrie de masse electrospray est essentielle à la spéciation des complexes en solution.