

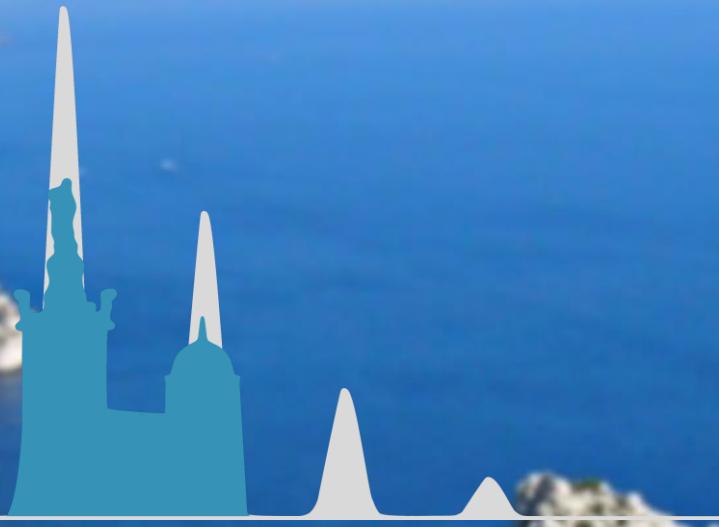
Société Française de Spectrométrie de Masse

Le Club Jeune

Les XXVII^e Rencontres – RCJSM2023
École de Printemps



13-17 mars 2023
La Belle de Mai - Village Club du Soleil, Marseille



MARSEILLE

Les XXVII^e Rencontres RCJSM2023



**Le Village Club du
Soleil en plein cœur
de Marseille**



Le Village Club du Soleil de la Belle de Mai est issu de la réhabilitation d'un [bâtiment historique de Marseille](#). Il s'agit initialement d'un couvent des Augustins Réformés, racheté par la ville de Marseille pour y installer un lycée de 1863 à 1914 ; les internes y logeaient dans la grande bastide. De 1914 à 1918, le Petit Lycée cède la place à l'Hôpital Militaire Complémentaire N°120 pour recevoir les blessés et malades de l'armée pendant la guerre. Puis, de 1920 à 1996, la Maternité de l'Hôpital de la Conception est déplacée dans ce bâtiment. Puis, lors de la recentralisation de la maternité à l'Hôpital Nord, le site est abandonné. Après plus de 20 ans d'abandon, c'est en 2017 que le Village Club du Soleil de la Belle de Mai ouvre ses portes, avec plus de 7 000 m² de surface totalement réhabilités pour accueillir 124 chambres et plusieurs salles de séminaire.

***"Bienvenue à Marseille, une ville ensOLEILLée,
riche en histoire et hôte de recherche scientifique de pointe !"***



MARSEILLE

Comité d'Organisation

Le Bureau du CJSMS



Wafa H.
Présidente



Jessica M.
Trésorière



Hikmat G.
Secrétaire



Nihel B.
Res. Communication



Olivier P.
Webmaster



Gauthier R.
Vice-Président



Mathilde B.
Présidente-Conseil



Israe S.
Adj. Communication & Secrétariat



Martha Z.
Rel. Industrielles



Maxime S.
Assistant Webmaster

Le Comité Local



Israe S.
Doctorante 2^e année, ICR
Présidente du Comité d'Organisation



Adrien P.
IR, PIIM
Membre Local



Gaëlle H.
IE, Spectropôle
Membre Local

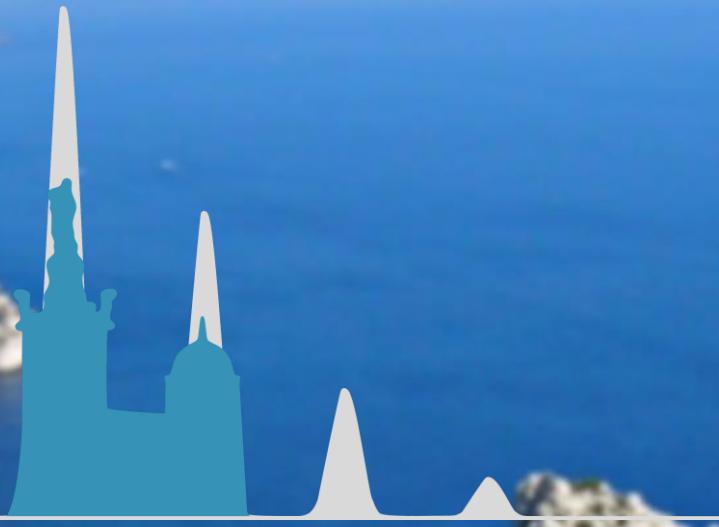
La SFMS



Marion G.
Correspondante CJSM



La SFMS
Et l'ensemble de son CA



MARSEILLE

Partenaires Industriels

Prestige

Waters™



Thermo
SCIENTIFIC



Premium



SHIMADZU
Excellence in Science

PEAK
SCIENTIFIC

Cil
CLUZEAU INFO LABO

Eurisotop
A CAMBRIDGE ISOTOPE LABORATORIES COMPANY

Standard

ionBench®

Partenaires Académiques et Presse



Partenaires que nous remercions
pour nos pauses sucrées



HARIBO



MARSEILLE



Fascicule

Programme & livret des résumés



MARSEILLE



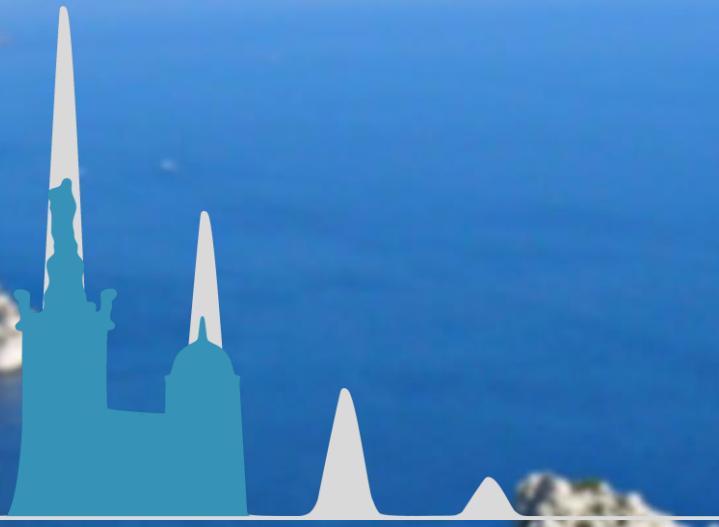
P.14 : Programme

P.19 : Thématiques des cours

P.27 : Résumés des communications orales

P.52 : Communications des partenaires

P.57 : Liste des participants



MARSEILLE

The background image shows a dramatic coastline with light-colored, layered rock cliffs. A deep blue sea is visible between the cliffs. In the distance, another rocky island or peninsula is visible under a clear blue sky.

Programme

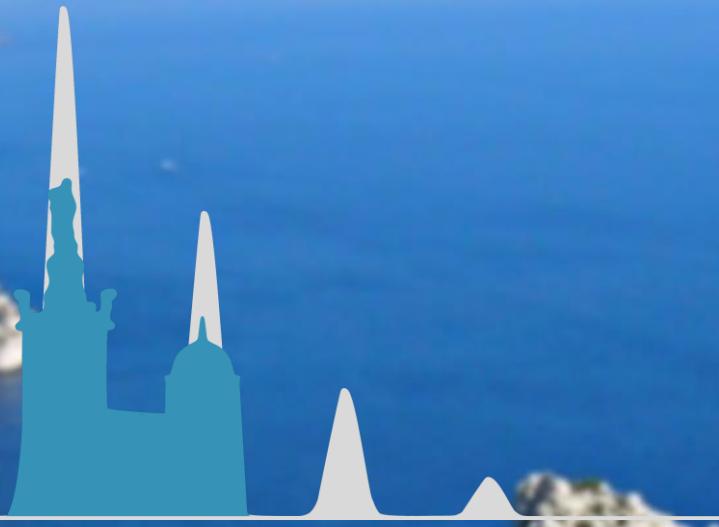


MARSEILLE

Lundi 13	Mardi 14	Mercredi 15	Jeudi 16	Vendredi 17
	08h30-10h00 Cours C.01 J. Noble	08h30-09h30 Session 3 <u>0.09-0.12</u> 09h30-10h00 <u>S.03 : MS Vision</u>	08h30-10h00 Session 4 <u>0.13-0.18</u>	08h30-10h00 Cours C.04 L. Charles
	10h00-10h30 <u>S.01 : Waters</u>	10h00-10h30 <i>Pause Café</i>	10h00-10h30 <u>S.0A : Thermo</u>	10h00-10h30 <i>Pause Café</i>
	10h30-11h00 <i>Pause Café</i>	10h30-12h00 Cours C.02 Q. Giai Gianetto	10h30-11h00 <i>Pause Café</i>	10h30-12h00 Cours C.04 L. Charles
	11h00-12h30 Cours C.01 J. Noble	12h00-13h30 <i>Déjeuner</i>	11h00-12h30 Cours C.03 J. Marcoux	12h00-14h00 <i>Panier-Repas</i> <i>Départ</i>
	12h30-14h00 <i>Déjeuner</i>	13h30-15h00 Cours C.02 Q. Giai Gianetto		
	14h00-15h00 Session 1 <u>0.01-0.04</u>		14h00-15h30 Cours C.03 J. Marcoux	
	15h00-15h30 <i>Pause Café</i>	15h00-15h30 <u>S.04 : Bruker</u>		
	15h30-16h00 Session 2 <u>0.05-0.06</u>		15h30-16h00 <i>Pause Café</i>	
	16h00-16h05 <u>S.02 : JEOL</u>			
	16h05-16h30 <i>Pause Café</i>		16h00-17h00 Session 5 <u>0.19-0.22</u>	
	16h30-17h00 Session 2 <u>0.07-0.08</u>	15h30-19h30 <i>Après-midi Récréatif</i>		
	17h00-19h30 <i>Temps Libre</i>		17h00-19h30 <i>Temps Libre</i>	
	18h00-19h30 <i>Accueil</i>			
19h30-20h30 <i>Dîner-Buffet</i>	19h30-20h30 <i>Dîner-Buffet</i>	19h30-20h30 <i>Dîner-Buffet</i>	19h30-20h30 <i>Dîner-Buffet</i>	
20h30-21h30 <i>Brise-Glace</i>	20h30-21h00 <i>Blind-Test</i>			20h30-00h00 <i>Soirée Gala</i>
21h30-22h00 Présentation C.ISM	21h00-21h30 <i>Devinettes</i>			

Programme des Oraux

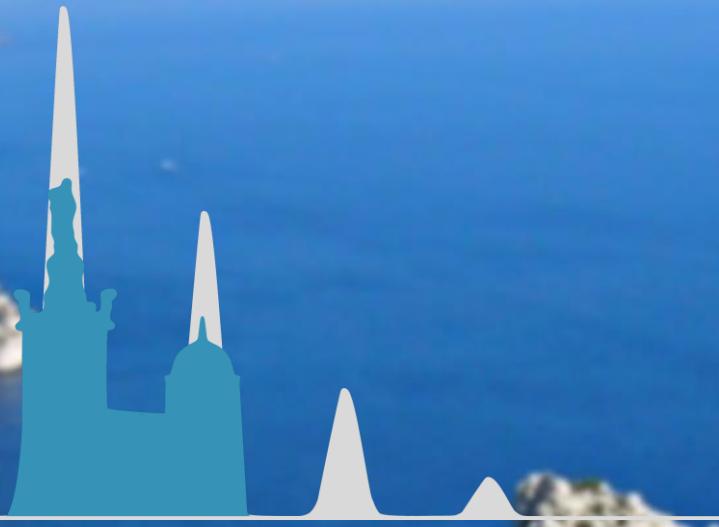
Mardi 14		Polymères et Macromolécules		
Session 1 <i>Modération:</i> Olivier	14h00-14h15	<u>0.01</u>	SERGENT Israëlle	ICR, Marseille
	14h15-14h30	<u>0.02</u>	POINDRON Adrien	PIIM, Marseille
	14h30-14h45	<u>0.03</u>	PACHOLSKI Pierre	LCP-AZMC, Metz
	14h45-15h00	<u>0.04</u>	ALMASRI Bayan	MSAP, Lille
//		Imagerie, Astro et Environnement		
Session 2 <i>Modération:</i> Israëlle	15h30-15h45	<u>0.05</u>	BURGUET Pierre	MSLab, Liège
	15h45-16h00	<u>0.06</u>	ROSÉ Gauthier	LAMS, Paris
	16h00-16h05		Partenaire	
	16h05-16h30		Pause	
	16h30-16h45	<u>0.07</u>	GARCIA Adeline	PIIM, Marseille
	16h45-17h00	<u>0.08</u>	CASTILLA Clément	COBRA, Rouen
Mercredi 15		Instrumentation et Mobilité Ionique		
Session 3 <i>Modération:</i> Israëlle	08h30-08h45	<u>0.09</u>	GEORGE Anaïs	COBRA, Rouen
	08h45-09h00	<u>0.10</u>	HAJJAR Zeina	MSLab, Liège
	09h00-09h15	<u>0.11</u>	TSIRKOU Aikaterini	ILM, Lyon
	09h15-09h30	<u>0.12</u>	TILMANT Thomas	MSLab, Liège
Jeudi 16		Développement Méthodologique et Traitement de Données		
Session 4 <i>Modération:</i> Hikmat	08h30-08h45	<u>0.13</u>	DEVAUX Jason	COBRA, Rouen
	08h45-09h00	<u>0.14</u>	DIAZ-HERMIDA Marina	LAMBE, Évry
	09h00-09h15	<u>0.15</u>	MASE Charlotte	COBRA, Rouen
	09h15-09h30	<u>0.16</u>	VERGOZ Delphine	COBRA, Rouen
	09h30-09h45	<u>0.17</u>	VOELLINGER Théo	LCP-AZMC, Metz
	09h45-10h00	<u>0.18</u>	SUEUR Maxime	COBRA, Rouen
//		Protéomique et Quantification		
Session 5 <i>Modération:</i> Adrien	16h00-16h15	<u>0.19</u>	FREUVILLE Lou	MSLab, Liège
	16h15-16h30	<u>0.20</u>	LIMAJ Xhesika	ESPCI, Paris
	16h30-16h45	<u>0.21</u>	MOULIAN Rémi	COBRA, Rouen
	16h45-17h00	<u>0.22</u>	REDUREAU Damien	MSLab, Liège



MARSEILLE

The background image shows a dramatic coastal landscape with large, light-colored limestone rock formations rising from the sea. The water is a vibrant blue, and the sky is clear and bright.

Thématiques des Cours



MARSEILLE



C.01 : Astrochimie et ses méthodes spectrales dédiées



Par **Jennifer Noble**✉

Physique des Interactions Ioniqes et Moléculaires (PIIM), Marseille, France

✉ : jennifer.noble@univ-amu.fr

Résumé

Docteur en Physique Moléculaire et Chargée de Recherche au Laboratoire Physique des Interactions Ioniqes et Moléculaires (PIIM), Marseille. Sa recherche se concentre sur les glaces interstellaires, principal réservoir d'éléments volatils qui relient les processus chimiques dans les nuages interstellaires à la formation des planètes et à la composition de leurs atmosphères.

Son cours porte sur la physico-chimie expérimentale pour l'étude de molécules aromatiques excitées mettant en œuvre des mesures par Spectrométrie de Masse et Spectroscopie Infra-Rouge.



C.02 : Outils Statistiques pour la Spectrométrie de Masse : avancées, avantages et limites

Par **Quentin Gai Gianetto**✉

Hub de Bioinformatique et Biostatistique Spectrométrie de Masse pour la Biologie (UTechS MSBio), Paris, France

✉ : quentin.gaiqianetto@pasteur.fr

Résumé

Ce cours présente un certain nombre d'outils statistiques utiles pour la Spectrométrie de Masse, notamment pour reconnaître des « outliers », pour évaluer la reproductibilité d'expériences, et pour déterminer un nombre suffisants d'échantillons pour obtenir des résultats robustes. Nous verrons les hypothèses sur lesquelles se basent ces méthodes, et discuterons de leurs limites. Nous verrons également ce que peuvent apporter les techniques de machine-learning dans le traitement des données et l'interprétation des résultats, ainsi que les limites auxquelles elles se confrontent.



Médaille de Bronze
du CNRS en 2020



C.03 : Structural Mass Spectrometry: From theory to practice



Par Julien Marcoux✉

Institut de Pharmacologie et de Biologie Structurale (IPBS), Toulouse, France

✉ : julien.marcoux@ipbs.fr

Résumé

Mass Spectrometry, originally dedicated to the analysis of small molecules, peptides and the primary structure of proteins, has drastically evolved over the past three decades and is now part of the toolbox of structural biologists. With a variety of methods, including top-down proteomics, native MS, ion mobility, cross-linking and hydrogen-deuterium exchange, structural MS aims at collecting a maximum of information on the secondary to quaternary structure of proteins assemblies.

By maintaining intact complexes in the gas-phase, native MS directly informs on the stoichiometry of protein complexes¹. Partial solution or gas-phase dissociation enable to detect the presence of eventual sub-complexes to understand the tridimensional topology of the assemblies. Interactions with ligands of any kind (lipids, small molecules, peptides, sugars) can also be monitored this way and provide information, not only on the stoichiometry but also on binding affinity, thanks to the semi-quantification of the different mass-resolved species. Real-time monitoring informs on the dynamics of these complexes in the seconds to hours timescales. Instrumental developments have very quickly increased the ranges of applications, enabling the analysis of larger complexes (ribosomes, proteasome, viral capsids) with better mass resolution and accuracy. Coupled to Ion-Mobility, native MS provides information on the size or conformation of the protein or protein complexes. Last but not least, the application of these techniques to membrane proteins² has accelerated their widespread use.

Top-down proteomics consists in the analysis and fragmentation of entire proteins in the gas-phase. Despite a number of technological challenges, the advantage of working on entire proteins rather than peptides is clear: in a top-down analysis, each proteoform is analysed and fragmented individually, allowing the identification of combinations of PTMs, mutations and/or proteolysis³. The recent developments in the field (sample preparation, instruments, softwares) now enable high-throughput and quantitative top-down proteomics.

Hydrogen-deuterium exchange, enables to detect conformational differences between two protein samples. The proteins or protein complexes are diluted in a deuterated buffer and hydrogen atoms from the peptide bonds are exchanged with the deuterium atoms of the solution. The rate of exchange of each amide hydrogen depends on its solvent accessibility and involvement in the stabilisation of secondary structures. By determining the rate of deuterium exchange, we can identify which regions are solvent-accessible and which ones are hidden in the core of the protein. This expanding method can thus be used to study protein dynamics, compare protein conformations (in different buffer conditions, after mutation), or to identify protein-protein or protein-ligand interfaces^{3,4}.

Cross-linking (and to a lesser extent radical footprinting) is also commonly used for structural purposes. The distance restraints obtained by localising the cross-linked residues can be used as an input to refine structural models.

All these methods, that are highly complementary, will be discussed in this talk, from a theoretical, historical and practical point of view.

Références

- 1 : Guillet, V. *et al.*, *Nat. Commun.* **2019**, *10*(1):782
- 2 : Sanchez Dafun, A. & Marcoux, J., *Biochim. Biophys. Acta Proteins Proteom.* **2022**, *1870*(8):140813
- 3 : Carel, C. *et al.*, *PNAS* **2017**, *114*(16):4231-4236
- 4 : Lesne, J. *et al.*, *Nat. Commun.* **2020**, *11*(1):6140



C.04 : Spectrométrie de Masse des Polymères Synthétiques et Dendritiques

Par Laurence Charles✉

Institut de Chimie Radicalaire (ICR), Marseille, France
✉ : laurence.charles@univ-amu.fr

Résumé

Ce cours a vocation à apporter les bases de l'analyse des polymères synthétiques et dendritiques par Spectrométrie de Masse à un public déjà au fait des aspects théoriques et appliqués de cette technique. La première partie présente les spécificités des polymères et copolymères synthétiques (polymolécularité, solubilité, affinité cationique) et leurs incidences sur l'analyse de ces macromolécules par Spectrométrie de Masse. En réponse aux enjeux analytiques propres aux polymères synthétiques, seules les techniques d'ionisation les plus utilisées (*i.e.*, Electrospray et MALDI) seront abordées. Puis, la méthodologie d'exploitation des données obtenues en mode MS est détaillée pour permettre la détermination de la nature du monomère, de la masse globale des groupements terminaux, des paramètres de distribution, ainsi que la distinction entre homopolymères et copolymères. La fragmentométrie des polymères synthétiques, étape incontournable pour la caractérisation des groupements terminaux, est ensuite abordée et l'intérêt de techniques d'activation alternatives à la CID telles que l'ECD, l'ETD, ou l'EPD est discuté. Enfin, les bénéfices de la Spectrométrie de Mobilité Ionique sont présentés, en mode séparatif comme en mode conformationnel, à travers quelques exemples représentatifs avant de traiter le cas particulier des polymères dendritiques.



C.OA : Méthodes d'Activation par Photons

Par Luke MacAleese✉



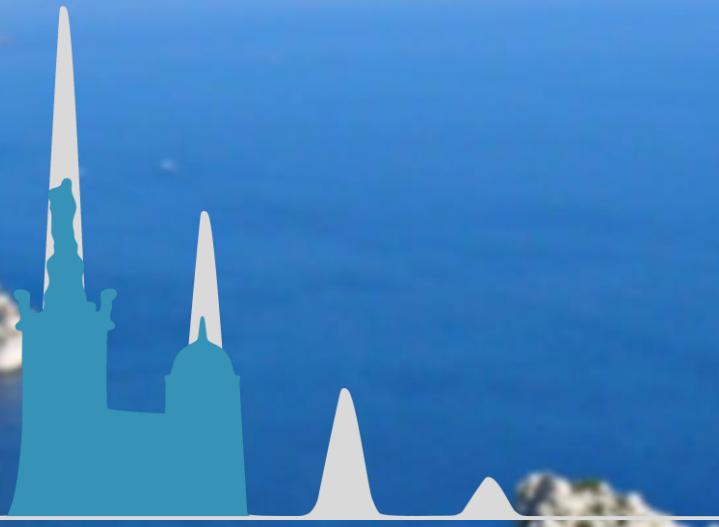
Institut Lumière Matière (ILM), Lyon, France

✉ : luke.mac-aleese@univ-lyon1.fr

Résumé

Si, tels des enfants, nous passons notre temps à casser nos objets d'étude en Spectrométrie de Masse, ce n'est pas (exclusivement) par goût mais par nécessité. La fragmentation des ions nous renseigne sur leur composition atomique et chimique (groupes fonctionnels), leur organisation spatiale... Et nous permet *in fine* d'identifier à coup sûr, voire de quantifier, la présence d'une molécule particulière dans un échantillon fût-il complexe. Si l'activation par collision (CAD/CID) est indubitablement la technique d'activation la plus répandue, il en existe une multitude d'autres possédant chacune ses spécificités et ses intérêts propres.

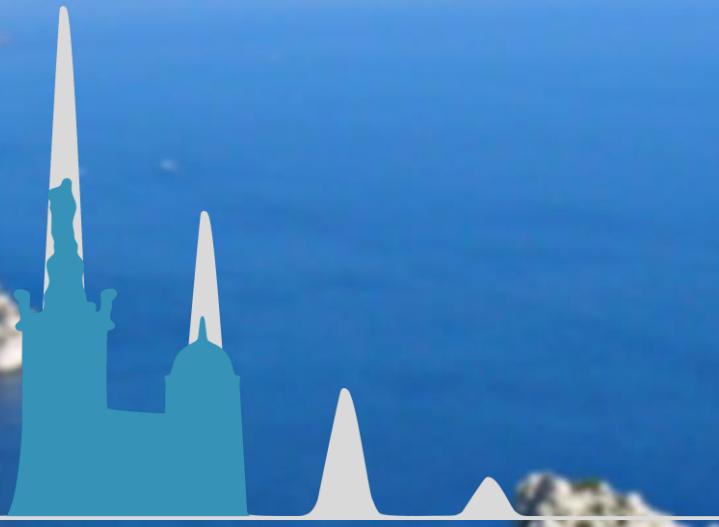
On se concentrera ici sur l'extraordinaire variété des méthodes d'activation par photon(s), en identifiant l'intérêt particulier (préservation de groupes fonctionnels labiles, excitation spécifique d'un type d'ions, fragmentation résolue en énergie, ...) qui pousse à utiliser telle ou telle énergie de photons (infrarouge, visible, ultraviolet voire même VUV, XUV, soft-Xrays et au delà). L'objectif est de comprendre ce qui peut pousser chacun.e d'entre nous à utiliser des approches de photo-activation dont la mise en œuvre est dans certains cas relativement complexe. On s'attardera sur l'analyse de différents mécanismes de photo-dissociation pour bien cerner le contour de ce qu'on peut apprendre avec ces approches. Enfin, on réfléchira à la dimension pratique de leur mise en œuvre : quelles sources de lumière, quelles caractéristiques, quelle géométrie d'interaction ions-photons...



MARSEILLE

The background image shows a dramatic coastal landscape with light-colored, layered rock formations rising from the sea. The water is a vibrant turquoise color. The sky is clear and blue.

Résumés des Communications Orales



MARSEILLE

0.01 : Modélisation prédictive de CCS pour une lecture optimisée des polymères digitaux par IMS-MS/MS

Isaure Sergeant

Institut de Chimie Radicalaire (ICR), Marseille, France

Thématiques : Développement Méthodologique ; Polymères ; Mobilité Ionique

Résumé

À l'instar de l'ADN qui stocke l'information génétique dans des séquences contrôlées de nucléotides, des macromolécules synthétiques permettent de stocker de l'information numérique en utilisant, pour implémenter un code binaire, deux co-monomères définis comme le « bit 0 » et le « bit 1 »¹. Le décodage de telles informations est réalisé par séquençage MS/MS, et ce d'autant plus facilement que la structure du polymère est conçue pour induire des voies de fragmentation prévisibles. Dans les poly(phosphodiester)s à blocs, les liaisons alcoxyamines placées entre chaque groupe de huit bits sont sélectivement rompues dans une première étape d'activation qui conduit à la libération des blocs. Chacun de ces fragments primaires est ensuite soumis à une seconde étape d'activation pour retrouver leur séquence co-monomérique. Malgré son efficacité, cette méthodologie de séquençage n'est pas optimale car elle requiert autant d'étapes de séquençage que de blocs, et sa durée augmente donc rapidement avec la taille du polymère².

Une séparation en ligne des fragments primaires avant leur activation, typiquement réalisable dans une seule expérience MS/MS-IMS-MS/MS, pourrait pallier cet inconvénient. La séparation des fragments primaires en IMS pourrait être assurée par un design ad hoc de leur étiquette, groupement chimique déjà associé à chaque bloc pour assurer leur unicité en masse. Une approche essai-erreur consistant à préparer des polymères avec différentes étiquettes pour vérifier, *a posteriori*, la séparation IMS de leurs blocs est trop couteuse en termes de synthèse. Une alternative intéressante est de sélectionner, *a priori*, les étiquettes à même de provoquer des sections efficaces de collision suffisamment distinctes pour chaque bloc, telles que révélées par des calculs théoriques. Cette approche prédictive, impliquant des simulations de dynamique moléculaire³ suivies de calculs de CCS, est menée sur des polymères modèles soumis en parallèle à des expériences MS-IMS pour valider les résultats théoriques.

Références

- 1 : Lutz, J.-F. *et al.*, *Science* **2013**, 341(6146):1238149
- 2 : Charles, L. & Lutz, J.-F., *Acc. Chem. Res.* **2021**, 54(7):1791-1800
- 3 : D'Atri, V. *et al.*, *J. Mass Spectrom.* **2015**, 50:711-726

0.02 : Principe d'un nouveau détecteur non-destructif pour molécules géantes

Adrien Poindron, Audric Husson, Aurika Janulyte, Martina Knoop, Caroline Champenois

Physique des Interactions Ioniqes et Moléculaires (PIIM), Marseille, France

Thématiques : Instrumentation ; Chimie-Physique ; Dynamique Moléculaire

Résumé

La Spectrométrie de Masse englobe aujourd’hui un ensemble de techniques d’analyse indispensables en chimie analytique¹. Son principe repose sur la manipulation par des champs électromagnétiques d’espèces chimiques préalablement ionisées et mises en phase gazeuse afin de mesurer leur rapport masse sur charge (m/q)^{2,3}. Initialement limitée à quelques centaines de Dalton, la Spectrométrie de Masse a bénéficié du perfectionnement de sources moléculaires telles que l’Electrospray⁴ et la MALDI⁵ pour s’adresser aux masses supérieures à 100 kDa telles que les bactéries ou les virus^{6,7}. Néanmoins, la détection non-destructive de ces molécules, dans un faible état de charge représentatif de leur état natif, constitue encore aujourd’hui un défi⁸. Nous proposons un principe de détecteur reposant sur un ensemble d’ions confinés dans un piège quadripolaire et refroidis par laser⁹. Des simulations de dynamique moléculaire montrent qu’un ion moléculaire de masse 1 MDa et porteur d’une seule charge peut perturber suffisamment cet ensemble d’ions pour induire une modification de sa température, entraînant une variation mesurable de sa fluorescence¹⁰. Cette variation de température est induite par une combinaison de l’interaction Coulombienne et du chauffage radiofréquence, phénomène accroissant l’énergie thermique de tout ensemble de charges confinées dans un piège radiofréquence¹¹. Ce chauffage radiofréquence agit ici comme un amplificateur de la perturbation initialement indétectable. Ce détecteur non-destructif peut aussi agir comme plateforme pour d’autres manipulations impliquant notamment des réactions chimiques contrôlées et à faible température dans le contexte de la chimie froide¹² ou de la spectroscopie moléculaire.

Références

- 1 : Glish, G. & Vachet, R., *Nat. Rev. Drug. Discov.* **2003**, 2:140-150
- 2 : Dempster, A. J., *Phys. Rev.* **1918**, 11:316-325
- 3 : Aston, F. W., *London Edinb. Dublin philos. mag.* **1919**, 38(228):707-714
- 4 : Fenn, J. B. *et al.*, *Science* **1989**, 246(4926):64-71
- 5 : Karas, M. *et al.*, *Angew. Chem., Int. Ed. Engl.* **1989**, 28(6):760-761
- 6 : Tito, M. A. *et al.*, *J. of the Am. Chem. Soc.* **2000**, 122(14):3550-3551
- 7 : Siuzdak, G. *et al.*, *Chemistry & Biology* **1996**, 3:45-48
- 8 : Keifer, D. Z. and Jarrold, M. F., *Mass Spec. Rev.* **2017**, 36(6):715-733
- 9 : Poindron, A., *Thesis*, Aix-Marseille Université **2022**
- 10 : Poindron, A. *et al.*, *The J. of Chem. Phys.* **2021**, 154(18):184203
- 11 : Poindron, A. *et al.*, *ArXiv*, **2023**, arXiv:2301.12853v1
- 12 : Willitsch, S., *Int. Rev. In Phys. Chem.* **2012**, 31(2):175-199

0.03 : End groups determination of Poly(vinylidene fluoride) samples by Direct Analysis in Real Time-Fourier Transform Ion Cyclotron Mass Spectrometry

Pierre Pacholski^{1,2}, Sébastien Schramm², Frédéric Progent¹, Frédéric Aubriet²

1 : Commissariat à l'Énergie Atomique, Direction des Applications Militaires d'Île de France (CEA DAM DIF), Arpajon, France

2 : Laboratoire de Chimie et Physique-Approche Multi-échelles des Milieux Complexes (LCP-A2MC), Metz, France

Thématiques : Polymères ; Sources d'Ionisation Ambiente

Résumé

Nowadays, synthetic polymers are produced and used in many materials for different applications. Matrix Assisted Laser Desorption/Ionization, or Electrospray Mass Spectrometry may be used to investigate them, but these techniques require sample preparation steps (at least solubilization), which are not always suitable for the study of insoluble or formulated polymers. Alternatively, Direct Analysis in Real Time (DART) ionization may be conducted without sample preparation.

Four PVDF samples ($C_2H_2F_2$ repeating unit), differing by their end groups and/or chain length were analyzed as received (pellet form), by introducing them into the DART ionization region. Two of them were commercial products, with known average molecular weight in number (71,000 and 107,000 Da), whereas this information missed for the two remaining samples. Helium heated at 300 °C was used as DART ionization gas. Negative ion mass spectra were achieved by FT-ICR MS 7T 2XR, in the 107-2000 m/z range, with a resolving power of 1.5 M at m/z 200. Composer software and Kendrick mass defect diagram were used for the attribution of molecular formula and putative end groups attribution, respectively.

For the four samples, the obtained mass spectrum displayed an oligomeric distribution between m/z 400 and 1300. The very high mass resolution achieved by FT-ICR MS allowed the unambiguous assignment of a formula to each detected ion and the distinction of isobaric species (for example $C_{16}H_{18}F_{16}O_4N^-$ at m/z 592.09858 from $C_{18}H_{18}F_{18}O^-$ at m/z 592.10757). The two commercial polymers shared the same $\alpha+\omega$ end groups formula (*i.e.* $C_5H_{10}O_5$), which confirmed a similar polymerization process for their synthesis. The two other PVDF were clearly different from the commercial ones by the occurrence of specific end-groups, $C_4H_{10}O_3$ and H_2O , respectively. MS2 and MS3 analysis were conducted in order to get structural information on these end groups and find hints on the used synthesis process.

0.04 : Structural identification of insoluble polyesters by soft chemical depolymerization and Mass Spectrometry

Bayan Almasri^{1,2}, Ahmed Mazzah¹, Youssef Bakkour², Christian Rolando¹

1 : Miniaturisation pour la Synthèse, l'Analyse et la Protéomique (MSAP), Villeneuve-d'Ascq, France

2 : Laboratoire de la Chimie Appliquée, Tripoli, Liban

Thématiques : Polymères ; Élucidation Structurale ; Développement Méthodologique

Résumé

Polyesters are insoluble organic polymers omnipresent in our daily life. We studied two categories of polyesters i) oil and alkyd paints and ii) polyethylene terephthalate (PET). Oil paints are composed of tri-esters of glycerol with unsaturated fatty acids, alkyd paints of polyols more often pentaerythritol, unsaturated fatty acids, and phthalic or isophthalic acids. Despite their wide use, their polymerization mechanism in the presence of light and oxygen is still debated and their structure is still unknown^{1,2}. PET polyesters are formed by polycondensation between terephthalic acid and ethylene glycol. As they are widely used for example in bottles, they are one of the main microplastics for which there is no protocol for the identification of the environmental or biological modifications^{3,4}.

We developed a new soft depolymerization protocol by transamidation, using a specific amine N,N'-dimethyl-1,3-propanediamine (DMAPA) that cleaves ester bonds and improves mass spectrometry ionization allowing us to work on a few µg of sample. In parallel, we developed a combined methodology of methanolysis-benzoylation to detect diols and polyols which are aqua soluble and lost during extraction, then the methyl ester part was also transamidated as described above. The polyesters depolymerized by our innovative methodologies were analyzed by Fourier transform ion cyclotron resonance (FT-ICR) mass spectrometry coupled to MALDI ion source, which is a powerful tool for the analysis of complex mixtures, giving high accuracy. Their analysis was also done by LTQ-Orbitrap coupled to liquid chromatography for the quantitation of unsaturated fatty acid disappearance and modifications.

We will present the structural identification of the modification of fatty acids and crosslinking dimers and oligomers formed during the paint film polymerization and the signature of polyethylene terephthalate degradation after natural or accelerated ageing which are oxidized products and polymer breaking sites.

Références

- 1 : Oyman, Z. *et al.*, *Prog. Org. Coat.* **2005**, 54(3):198-204
- 2 : van Gorkum, R. *et al.*, *Coord. Chem. Rev.* **2005**, 249(17-18):1709-1728
- 3 : Sang, T. *et al.*, *Eur. Polym. J.* **2020**, 136:109873
- 4 : Hale, R. C. *et al.*, *J. Geophys. Res. Oceans* **2020**, 125(1):e2018JC014719

0.05 : Comparaison de nouveaux outils bio-informatiques innovants pour une visualisation rapide des signaux spécifiques à la coculture bactérienne par Imagerie de Spectrométrie de Masse

Pierre Burguet¹, Raphael La Rocca¹, Christopher Kune¹, Alexandre Bastin¹,
Déborah Tellatin², Sébastien Rigali², Loïc Quinton¹

¹ : Laboratoire de Spectrométrie de Masse (MSLab), Liège, Belgique

² : Centre d'Ingénierie des Protéines (CIP), Liège, Belgique

Thématiques : Développement Méthodologique ; Métabolomique ; Imagerie

Résumé

Le procédé de coculture bactérienne fournit des informations précieuses sur les processus métaboliques et peut potentiellement réveiller des clusters de gènes biosynthétiques cryptiques (BGC), habituellement silencieux dans des conditions de monoculture¹. Ces BGCs interviennent généralement dans la production de nouvelles molécules bioactives. L'imagerie par spectrométrie de masse (MSI) est un outil puissant pour explorer la distribution spatiale des molécules sur des surfaces complexes², fournissant entre autres, des informations moléculaires sur les bactéries productrices.

Cependant, l'approche conventionnelle repose principalement sur une analyse manuelle longue et laborieuse de milliers de signaux, diluant l'information recherchée³. Par conséquent, le travail présenté propose une nouvelle approche de traitement de données, basée sur deux nouveaux outils bio-informatiques permettant la mise en évidence des ions d'intérêt spécifiques à la coculture. Cette méthodologie a pour ambition d'augmenter significativement le débit de traitement des échantillons, et donc de la découverte de nouveaux métabolites présentant une activité biologique valorisable.

Dans ce contexte, la MSI à haute résolution (MALDI-FT-ICR) a été employée afin d'examiner les métabolites produits par *Streptomyces coelicolor* et *Escherichia coli*, cultivés seuls ou en coculture. Les données brutes sont d'abord converties au format imzML, puis décryptées par des approches bio-informatiques basées sur l'analyse de structure des images ou de différences de signaux. Les résultats montrent que la combinaison des deux approches permet de générer une liste de 110 signaux spécifiques à l'interaction. Chaque ion ainsi sélectionné a été validé en générant les images correspondantes et en mettant en évidence que les signaux sont observables uniquement en interaction.

En résumé, cette étude présente une méthodologie nouvelle et efficace pour analyser les données MSI de coculture bactérienne, fournissant des informations précieuses pour la découverte de potentiels produits bioactifs. L'approche proposée est rapide et peut être utilisée pour identifier rapidement les signaux spécifiques apparaissant lors de l'interaction entre différents couples bactériens.

Références

- 1: Moody, S. *et al.*, *Future Microbiol.* **2014**, 9:575-578
- 2: Buchberger, A. *et al.*, *Anal. Chem.* **2018**, 90:240-265
- 3: Alexandrov, T. *BMC Bioinform.* **2012**, 13(Suppl 16):S11

0.06 : Time-of-Flight Secondary Ion Mass Spectrometry Imaging of Cross Sections from the a Renaissance Painting

Gauthier Rosé^{1,2}, Michel Sablier², Alain Brunelle¹, Philippe Walter¹

1 : Laboratoire d'Archéologie Moléculaire et Structurale (LAMS), Paris, France

2 : Centre de Recherche sur la Conservation (CRC), Paris, France

Thématiques : Imagerie

Résumé

In cultural heritage, and particularly with old paintings, organic materials (binders) may have degraded and interacted with inorganic materials (pigments), thus requiring analyses to understand these changes. To fully comprehend such a complex mixture, Renaissance painting layers usual components had to be analysed, such as resin, oil, wax...!

A chemical mapping at the surface of cross-sections of painting samples can be carried out with a Time-of-Flight Secondary Ion Mass Spectrometer (TOF-SIMS). The use of this instrument in heritage has already been demonstrated on multiple matrices, since it is the only one enabling molecular analyses of both the organic and inorganic contents at a submicrometric scale². The secondary ions analysed are generated by the impact of keV-energy primary ions, which are known to generate multiple fragmentations, even when using cluster projectiles.

Pyrolysis comprehensive two-dimensional Gas Chromatography/Mass Spectrometry (Py-GC×GC/MS) is a separative method which offers a complete analysis of a sample, but without localization³. The two methods are thus used in parallel in a multimodal analysis for references, to provide a complete characterisation of the composition. Then the TOF-SIMS alone is used for characterisation and localisation of pictorial works' components.

Most commonly used painting components were analysed according to the previously mentioned workflow to determine specific markers for the analysis of cross-section by TOF-SIMS.

This study was applied to a previously MEB analysed Renaissance painting, which only gave the localisation of inorganic content, leaving out any information about binders or organic dye⁴. As such, TOF-SIMS analysis was instrumental in detecting the different binders and answer the questions about the presence of organic dyes. Furthermore, it also allowed the identification of other not suspected organic matter (e.g. organic black pigment).

Mass spectrometry imaging was correlated with X-ray images of the wooden panel to explain unexpected high degradation.

Références

- 1 : Perego, F., *Dictionnaire des Matériaux*, Belin 2005
- 2 : Bouvier, C. *et al.*, *J. Mass Spectrom.* 2022, 57:e4803
- 3 : Han, B. *et al.*, *J. Anal. Appl. Pyrol.* 2016, 122:458-467
- 4 : Cerasuolo, A. & Zezza, A., *Raffaello a Capodimonte L'officina dell'artista*, Editori Paparo 2021

0.07 : Orbitrap and GC-Orbitrap for *in situ* analyses: clues from laboratory experiments

Adeline Garcia¹, Cornélia Meinert², Pauline Poinot³, Grégoire Danger^{1,4}

1 : Physique des Interactions Ioniques et Moléculaires (PIIM), Marseille, France

2 : Institut de Chimie de Nice (ICN), Nice, France

3 : Institut de Chimie des Milieux et des Matériaux de Poitiers (IC2MP), Poitiers, France

4 : Institut Universitaire de France (IUF), Paris, France

Thématiques : Instrumentation ; Développement Méthodologique ; Astrochimie

Résumé

In the context of future space missions, the Orbitrap, a high-resolution mass spectrometer, is being spatialized. Here, we investigate the interest of a coupling between a gas chromatograph and an Orbitrap mass spectrometer. A first approach focuses on the use of this system for a targeted analysis of amino acids in soluble organic matter analogues of meteorites. In a second step, we studied the interest of a high-resolution mass spectrometry for the direct analysis or via gas chromatograph of these same analogues using pyrolysis or thermodesorption as sampling techniques. The interest of such analogues is that they present a molecular diversity similar to that observed in the SOM of meteorites, which allows to demonstrate the relevance of such a technology for the analysis of natural samples. All analyses carried out demonstrate the interest of the Orbitrap coupled or not with GC for the analysis of such samples, in particular because of the high mass resolution which makes it possible to obtain the raw formulae of the ions formed and thus to reinforce the identification of the compounds, as well as to obtain first information on the molecular content of a sample before considering a targeted analysis.

0.08 : Analyse non ciblée de matière particulière issue de la combustion de lubrifiants et additifs

Clément Castilla¹, Clémence Meausoone², Tiffen Legeard³, Caroline Olivier⁴, Christelle Monteil², Alexis Coppalle⁴, Isabelle Schmitz¹, Pascal Cardinael³, Séverine Tisse³, Florence Portet-Koltalo¹, Mélanie Mignot¹, Carlos Afonso¹, Matthieu Fournier⁵

1 : Chimie Organique et Bioorganique : Réactivité et Analyse (COBRA), Mont-Saint-Aignan, France

2 : Aliments Bioprocédés Toxicologie Environnements (ABTE), Rouen, France

3 : Sciences et Méthodes Séparatives (SMS), Rouen, France

4 : Complexe de Recherche Interprofessionnel en Aérothermochimie (CORIA), Saint-Étienne-du-Rouvray, France

5 : Morphodynamique Continentale et Côtière (M2C), Rouen, France

Thématiques : Développement Méthodologique ; Matrices Complexes ; Environnement

Résumé

L'accident majeur qui s'est produit sous la forme d'un incendie sur les sites de Lubrizol et Normandie Logistique en septembre 2019 constitue un événement exceptionnel, générant des contaminations inédites de l'environnement liées à la combustion de nombreux produits chimiques pouvant conduire à des effets « cocktails » peu documentés.

Le projet COPHERL (COnséquences Potentielles pour l'Homme et l'Environnement, perception et Résilience) rassemblant 19 laboratoires, vise à caractériser les produits de l'incendie dans différentes matrices environnementales et à évaluer leur toxicité de ces produits. Une thématique de ce projet comporte des essais de combustion à l'échelle du laboratoire avec des produits similaires à ceux ayant brûlé lors de l'incendie. Pour ces essais, deux combustibles ont été comparés : des huiles minérales simples et un lubrifiant automobile avec additifs anti-usure, additifs étant similaires aux produits Lubrizol.

Les composés volatils générés par la combustion, dans des conditions contrôlées de température et d'oxygénéation, ont été captés sur des cartouches de thermo-désorption (TD) (Tenax et Carbopack) et les suies ont été collectées sur filtres. Un système d'exposition *in-vitro* en interface air-liquide (Vitrocell®) a été utilisé en parallèle afin de mettre en contact avec des cellules pulmonaires, la phase solide et gazeuse générées par les essais¹. Ces expositions doivent permettre de déterminer la toxicité de ces suies à différents temps d'incubation.

Les suies ont été caractérisées par FTICR-MS avec plusieurs sources d'ionisation (APPI(+), ESI(-) et LDI(+)) tandis que les produits volatils ont été caractérisés par TD-GC-HRMS.

La comparaison des résultats sur l'analyse non ciblée des suies montre des différences entre les combustibles utilisés. En effet, comparativement aux huiles minérales simples brûlées dans les mêmes conditions, le lubrifiant automobile additivé a généré des hydrocarbures polycycliques aromatiques soufrés et oxygénés (S-HAP et O-HAP). Ces résultats seront reliés par la suite aux données obtenues par les tests toxicologiques.

Références

- 1 : Juarez-Facio, A. T. et al., *J. Environ. Sci.* **2022**, 113:104-117

0.09 : Comparison of three ion mobility platforms to determine lipid Collision Cross Sections

Anaïs C. George¹, Isabelle Schmitz¹, Vincent Marie², Benoit Colsch², Florent Rouvière³, Sandra Alves⁴, Sabine Heinisch³, François Fenaille², Carlos Afonso¹, Corinne Loutelier-Bourhis¹

1 : Chimie Organique et Bioorganique : Réactivité et Analyse (COBRA), Mont-Saint-Aignan, France

2 : Institut des Sciences du Vivant Frédéric Joliot, Gif-sur-Yvette, France

3 : Institut des Sciences Analytiques (ISA), Villeurbanne, France

4 : Institut Parisien de Chimie Moléculaire (IPCM), Paris, France

Thématiques : Mobilité ionique ; Métabolomique

Résumé

Metabolomics approaches using high-resolution mass spectrometry are widely used for the characterization of biological samples. The coupling of ion mobility spectrometry (IMS) to mass spectrometry brings an additional descriptor, the collision cross section (CCS) for more confident compound identification¹. However, literature reports significantly disparate CCS values (up to 10 % deviation) according to the instrument or calibrant used². It is therefore necessary to evaluate both the interplatform and interlaboratory reproducibility of CCS measurement as a prerequisite to its use as an annotation descriptor. We present here the comparison of the CCS values, from standard and plasma lipids, using three different ion mobility instruments, the drift tube IMS (DTIMS), the travelling wave IMS (TWIMS) and the trapped IMS (TIMS).

Lipids were extracted from human plasma using a modified Bligh and Dyer method and were analyzed by UHPLC-ESI-IMS-Q-TOF using a standard lipidomics workflow implying reversed-phase chromatography (C18 column) for separation². Three different MS instruments were compared: Synapt G2 (Waters) equipped with the TWIMS cell, DTIMS 6560 (Agilent) used in single-field method and TIMS-TOF Flex (Bruker).

The CCS values of human plasma lipids and lipid standards were independently determined with the three IMS-MS instruments in both positive and negative ionization modes using Tune Mix as calibrant. The correlation between the CCS results retrieved from the three techniques was evaluated in a pairwise manner. The three measurements proved to be well correlated with coefficient of determination above 0.99. More than 80 % of the lipid CCS exhibit deviations below 1 % while all were within 2 %, whatever the type of ion or lipid class considered.

This work shows that harmonized analytical conditions can give excellent interplatform reproducibility in terms of CCS measurements for more than 180 distinct lipid CCS values. Altogether, these results demonstrate that obtaining interoperable CCS databases is achievable.

Références

1 : May, J. C. & McLean, J. A. *Metabolomics* **2022, *18*(12):104**

2 : George, A. C. et al., *Anal. Chim. Acta* **2022, *1226*:340236**

0.10 : Higher order structure of g-quadruplexes and phosphorothioated analogues investigated by Ion Mobility Mass Spectrometry, breakdown curve experiments and collision induced unfolding

Zeina Hajjar¹, Cédric Delvaux¹, Christopher Kune¹, Thomas De Vijlder², Laure-Elie Carloni², Edwin Romijn², Gauthier Eppe¹, Edwin De Pauw¹, Johann Far¹

1 : Laboratoire de Spectrométrie de Masse (MSLab), Liège, Belgique

2 : Janssen Recherche & Développement, Beerse, Belgique

Thématiques : Elucidation Structural ; Développement Méthodologique ; Mobilité Ionique

Résumé

The last few years have seen a remarkable rise in the development of oligonucleotide-based therapeutics¹. ON can adopt various conformations also known as higher-order structures (HOS) such as double helices or G-quadruplexes which directly impact several of their key properties. Their appropriate characterization is critical, including for regulatory considerations. In this context, innovative characterization approaches are needed to unravel the conformations of ON and elucidate their impact on various ON attributes.

The work investigates the use of complementary activation methods in combination with ion mobility mass spectrometry (IM-MS) to characterize the HOS of ON in the gas phase². Collision-induced unfolding (CIU) and collision-induced dissociation (CID) were used as “soft” and “hard” activation methods, respectively, to induce gradual structural changes and dissociation. The results showed that the CIU heatmaps and breakdown curve plots provided insights into the structural changes and fragmentation pathways upon activation.

Different oligonucleotides were studied including a G-quadruplex with 2 different coordinating cations (NH_4^+ and K^+) and 2 different types of backbones (phosphodiester and phosphorothioate).

The breakdown curve experiments showed lower V_{50} values for the phosphorothioate analog compared to the classical phosphodiester, despite the former’s higher mass. For ammonium-based species, ammoniac loss occurred first, followed by depurination and dissociation, whereas for potassium-based species, only depurination and dissociation were observed. The V_{50} values showed significantly higher values for K^+ species compared to NH_4^+ due to the absence of ammoniac loss.

The results of the CIU experiments showed that NH_4^+ G-quadruplexes exhibited a progressive shift towards lower drift times upon the loss of NH_3 , indicating a progressive compaction of the structure. For the K^+ G-quadruplexes, and especially the phosphodiester, the CIU heatmaps revealed a compaction effect upon collisional heating without cation ejection.

A similar workflow was also applied for other HOS of oligonucleotides, including duplexes.

Références

- 1: Alhamadani, F. *et al.*, *Drug Metab. Dispos.* **2022**, 50(6):879-887
- 2: Lanucara, F. *et al.*, *Nat. Chem.* **2014**, 6(4):281-294

O.11 : Photo-catalysis for the environment, the sustainable energy and CO₂ recycling

Aikaterini Tsirkou¹, Nina Tyminska², Karine Costuas², Stephane Cordier²,
Fabien Grasset², Luke MacAleese¹

1 : Institut Lumière Matière (ILM), Lyon, France

2 : Institut des Sciences Chimiques de Rennes (ISCR), Rennes, France

Thématiques : Instrumentation ; Développement Méthodologique ; Chimie-Physique

Résumé

The project PHOTOCAT aims at investigating the reaction mechanisms of two alternative photo-catalytic processes, leading to the reduction of CO₂ into methanol and the generation of H₂ from water. These two processes involve inexpensive and earth-abundant transition metal clusters –Molybdenum clusters– as photocatalytic centers. The studied clusters ($A_x[\{Mo_6X_8\}X^a]^{2-}$ (A = Alkali and X = halogen) are nanoscale aggregates of Molybdenum atoms that are stabilized by inner ligands (X) in edge-bridging or face capping positions and apical ligands (X^a) in terminal position. The exchange of X^a ligands with inorganic or organic ligands and the exchange of alkali A⁺ cations by functional organic cations coming from the environment of the clusters led us to a study of cluster reactions with different possible factors. The proof of concept of the photo-reactivity of these complexes has been recently provided, but any attempt to develop applications requires the rationalization of the mechanisms involved. At the heart of the hypotheses is the involvement of triplet states strongly coupled to singlet states by very efficient spin-orbit couplings in these heavy species.

The gas-phase Molybdenum clusters were investigated after Electrospray by Mass Spectrometry in order to determine their molecular weight, obtain information on their molecular structure and study their chemical modifications which depend on the solution conditions. The study of the influence of light and the addition of base on the clusters' composition were studied by kinetic studies in order to observe the substitution of halogen ligands by hydroxide (OH⁻). This study reveals that it is possible to control the substitution of X⁻/OH⁻ which are of high interest regarding the reactivity of the Molybdenum clusters. Moreover, another type of substitution of halogen by CO₂ has been observed and verified via fragmentation experiments that were performed by CID (Collision-Induced Dissociation).

Références

- 1 : Kumar, P. *et al.*, *RSC Adv.* **2014**, 4(20):10420
- 2 : Feliz, M. *et al.*, *ChemSusChem*. **2016**, 9(15):1963-1971

O.12 : Exploring the structures and the energy landscapes of proteins in the gas phase through chemical modification and Ion Mobility

Thomas Tilmant, Johann Far, Edwin De Pauw, Loïc Quinton

Laboratoire de Spectrométrie de Masse (MSLab), Liège, Belgique

Thématiques : Mobilité ionique : Chimie-Physique

Résumé

The transfer of proteins from the solution to the gas phase as ionized species may induce structural changes. Mass Spectrometry coupled with Ion Mobility (IM-MS) can monitor the evolution of these ion shapes using collision unfolding experiments (CIU). Multiple low energy collisions (slow heating) of ionized proteins at increasing accelerating voltages allow ions to explore their energy landscapes and compaction/refolding/unfolding events to be monitored¹. Stabilizing non-covalent interactions are at the origin of the energy barriers^{2,3}.

We propose to induce chemical modifications (covalent labeling) to cancel those interactions at hydrophilic residues and probe their contribution on the gas-phase structures and their energy landscapes. Model proteins (cytochrome c, ubiquitin) have been modified with NHS-ester derivatives, which selectively modify lysine sidechains. For each experimental condition, a broad number of modified proteins were produced. Each of these species (m/z) was monitored in native/denatured condition with the use of IM-MS, CIU and CID.

Our preliminary results suggest that the type of chemical modifications affects differently the energy landscape of the investigated proteins. Acetylation of cytochrome c lysines with NHS-ester leads to the progressive loss of extended conformations produced in CIU experiments, depending on the number of lysine side chains bearing modification. Moreover, larger NHS-ester derivatives amplify the phenomenon albeit these effects were protein dependent. Our research also highlights the complementarity of different exploited MS-based techniques. For ubiquitin, which possesses lysine residues involved in structuring salt bridges in solution, lysine acetylation stabilizes compact conformations instead of unfolding, as revealed by CIU. In contrast, survival yield experiments indicate that the acetylation increased collision energy required for fragmentation.

The role of non-covalent interactions in the gas phase for the conservation of the structures and the energy landscapes of the proteins can be probed with our proposed CIU/CID method combined with chemical modifications of key residues by covalent labeling.

Références

- 1 : Dixit, S. M. *et al.*, *Curr. Opin. Chem. Biol.* **2018**, 42:93-100
- 2 : Al-Jabiry, A. *et al.*, *Chem. Eur. J.* **2021**, 27:13783-13792
- 3 : Hanozin, E. *et al.*, *Anal. Chem.* **2019**, 91(20):12808-12818

0.13 : Supercritical Fluid Chromatography hyphenated to Ultra-High Resolution Mass Spectrometry for the characterization of advanced biofuels

Jason Devaux^{1,2,3}, Mélanie Mignot¹, Florent Rouvière², Sabine Heinisch², Carlos Afonso^{1,3}

1 : Chimie Organique et Bioorganique : Réactivité et Analyse (COBRA), Mont-Saint-Aignan, France

2 : Institut des Sciences Analytiques (ISA), Villeurbanne, France

3 : International – Complex Matrices Molecular Characterization (iC2MC), Harfleur, France

Thématiques : Développement Méthodologique ; Pétroléomique

Résumé

Bio-oils obtained by thermochemical conversion of microalgae represent a promising source of energy that could complement fossil fuels in the future. However, their high content of heteroatoms makes their use as biofuel impossible without upgrading treatments. To maximize the efficiency of these treatments, a thorough knowledge of the bio-oil samples is required. Their characterization is a challenging task as those are highly complex mixtures including thousands of compounds with a wide range of polarity and molecular mass. Their characterization is often performed by direct introduction into a Fourier transform ion cyclotron resonance mass spectrometer (FTICR-MS), allowing the assignment of one molecular formula to each m/z ratio. However, two major issues arise with a direct introduction: (1) the impossibility to differentiate the numerous isomers and (2) the possible matrix effects that prevent the detection of low concentration compounds.

To overcome such issues, chromatography is often hyphenated to a mass spectrometer. In particular it has been shown that Supercritical Fluid Chromatography (SFC) coupled to Time-of-Flight (ToF) Mass Spectrometry is of particular interest for bio-oils characterization¹. However, the relatively low resolving power of ToF yields to isobaric interferences, especially in microalgae-based bio-oils.

In this work, we developed a SFC-FTICR method by optimizing the stationary and mobile phases and the make-up solvent with quality descriptors including the retention space coverage and the peak intensity. The best results were obtained with an unbounded silica stationary phase and a mixture of methanol and water as a make-up to maximize intensity. Quadrupolar detection was used in on-line SFC-FTICR to increase the acquisition rate and the coupling allowed to combine the large separation power in SFC with the very high resolution of FTICR. Thousands of compounds were identified by their molecular formulas, many of which being found throughout the chromatogram, showing the isomeric complexity of microalgae bio-oils.

Références

- 1: Crepier, J. *et al.*, *J. Chromatogr. B*, **2018**, 1086:38–46

0.14 : Surface Plasmon Resonance coupled to Mass Spectrometry to study lectin-sugar interactions

Marina Diaz-Hermida¹, Salomé Poyer², Régis Daniel¹, William Buchmann¹

¹ : Laboratoire Analyse, Modélisation, Matériaux pour la Biologie et l'Environnement (LAMBE), Evry, France

² : Institut de Chimie des Substances Naturelles (ICSN), Gif-sur-Yvette, France

Thématiques : Développement Méthodologique ; Élucidation Structurale ; Imagerie

Résumé

Biomolecular interactions are at the heart of the functioning of all living systems. The study of bio-interactions is essential for understanding the global organization of the cellular machinery and their role in physiological processes. They constitute a significant challenge in analytical chemistry, diagnostics, and therapeutic research^{1,2}.

Lectins are proteins that specifically recognize edible sugars³. Our project aims to develop a coupling between Surface Plasmon Resonance Imaging and Mass Spectrometry (SPR_i-MS) to analyze protein-sugar interactions. The aim is to create a multiplex SPR biochip with immobilized lectins and then to use this biochip in coupling with MALDI-ToF-MS. This coupling allows the kinetics and thermodynamics of the interaction to be studied in real-time, together with the structural identification of the sugars captured from a complex mixture^{1,2,4}.

By SPR_i, this work confirmed significant interactions, between the lectin WGA and the neoglycosylated BSA grafted carrying the sugars N-acetylgalactosamine and N-acetylgalactosamine, and between the lectin AIA and neoglycosylated BSA carrying galactose and its N-acetylated form. We attempted the MS detection of captured glycosylated BSA directly from the biochip surface; however, the lack of sensitivity in MS detection hindered the development of the coupling. The sensitivity depends, on the amount of ligands retained on biochip surface, which itself depends, among other factors, on the chemical functionalization of the biochip surface, the nature of the receptors and their immobilization on the surface¹. Modifications of the MALDI-ToF-MS analysis conditions are being carried out with the use of MALDI imaging and the use of alternative receptors in order to evaluate their impact on the sensitivity of detection by SPR_i-MS.

Références

- 1 : Halushkina, A., *Thesis, Université Paris-Saclay* **2021**
- 2 : Bellon, S. *et al.*, *Anal. Chem.* **2009**, 81(18):7695-7702
- 3 : Naithani, S. *et al.*, *J. Plant Physiol.* **2021**, 266:153531
- 4 : Musso, J. *et al.*, *Anal. Bioanal. Chem.* **2015**, 407(5):1285-1294

0.15 : Contribution of Atmospheric Pressure Chemical Ionization Fourier Transform Ion Cyclotron Resonance Mass Spectrometry for the characterization of bio-oils from lignocellulosic biomass: comparison with Electrospray Ionization and Atmospheric Pressure Photoionization

Charlotte Mase^{1,2,3}, Marie Hubert-Roux^{1,3}, Carlos Afonso^{1,3}, Pierre Giusti^{1,2,3}

1 : Chimie Organique et Bioorganique : Réactivité et Analyse (COBRA), Mont-Saint-Aignan, France

2 : TotalEnergies OneTech, Total Recherche & Technologie, Harfleur, France

3 : International – Complex Matrices Molecular Characterization (iC2MC), Harfleur, France

Thématiques : Développement Méthodologique

Résumé

Bio-oils obtained from lignocellulosic biomass pyrolysis represent a very promising alternative to replace petroleum-based fuels. At the molecular level, these materials are highly complex mixtures comprising thousands of species covering a large range of mass and polarity. Compared to petroleum, they present a high amount of oxygen containing compounds, limiting their direct use in the classical refining system. To understand and improve both the conversion and upgrading processes, an advanced molecular description of the raw and upgraded bio-oils is required. The most powerful technique for this kind of sample, in terms of mass accuracy and resolving power, is Fourier Transform Ion Cyclotron Resonance Mass Spectrometry (FTICR MS). It allows assigning a unique molecular formula to each *m/z* signal. Besides, the use of different ionization sources ensures an extensive molecular description and enables to assess the efficiency of different catalytic chemical treatments. In this study, we report the characterization of a pine pyrolysis bio-oil by the three main atmospheric pressure ionization sources: Electrospray (ESI), Atmospheric Pressure Photoionization (APPI) and Atmospheric Pressure Chemical Ionization (APCI) in positive mode coupled to FTICR analyzer. In addition, different solvents and dopants were used to ensure a comprehensive description of the molecular content. Regardless of the atmospheric pressure ionization sources used, with lignocellulosic biomass-based bio-oils mainly molecules with CHO_x molecular formula are obtained. Nevertheless, depending on the ionization source the ions relative intensity are significantly in respect with their Double Bound Equivalent (DBE), Oxygen to Carbon ratio (O/C) and Hydrogen to Carbon ratio (H/C). APCI source has proven to be particularly useful ionization source for bio-oil characterization as it demonstrated the presence of an aliphatic distribution in addition to other bio-oil components ionized by APPI and ESI.

0.16 : Lipidome de bactéries responsables d'infections chroniques : Cellules « Persister »

Delphine Vergoz^{1,2}, Hung Le¹, Annick Schaumann¹, Isabelle Schmitz², Carlos Afonso²,
Emmanuelle Dé¹, Corinne Loutelier-Bourhis², Stéphane Alexandre¹

1 : Polymères Biopolymères Surfaces (PBS), Mont-Saint-Aignan, France

2 : Chimie Organique et Bioorganique : Réactivité et Analyse (COBRA), Mont-Saint-Aignan, France

Thématisques : Développement Méthodologique ; Métabolomique ; Lipidomique

Résumé

Les cellules « persister » (persisters) sont une sous-population bactérienne capable de survivre à de fortes concentrations d'antibiotiques¹. Ce phénotype temporaire et réversible pourrait être impliqué dans la récurrence des infections et le développement de résistance génétique², deux problématiques majeures pour notre société actuelle. Il est donc essentiel de mieux comprendre ce phénomène pour mieux le limiter. Plusieurs mécanismes peuvent influencer la formation des persisters : certains systèmes toxine/antitoxine, la concentration de ppGpp ou de c-di-GMP, l'activation des réponses SOS ou le stress oxydatif. Une autre hypothèse est qu'une différence spontanée ou induite de la composition de la membrane, pourraient permettre aux bactéries de mieux tolérer des concentrations élevées d'antibiotiques. Pour examiner cette hypothèse, nous comparons le lipidome des persisters formées par *Acinetobacter baumannii* avec le lipidome des cellules témoins (cultivées sans antibiotique). *A. baumannii* a été choisi pour notre étude parce que c'est un agent pathogène responsable d'infection chronique classé en priorité I par l'organisation mondiale de la santé en raison de sa capacité à développer des résistances.

Pour générer des persisters, la souche *A. baumannii* ATCC 19606^T a été exposée à 50 µg/mL de ciprofloxacine en suivant un protocole déjà décrit³. Les persisters ont été examinées par imagerie confocale, Cytométrie de Flux et Microscopie à Force Atomique pour caractériser leur morphologie et leur physiologie. Les lipidomes des cellules témoins et des persisters ont été analysés, après lyse par Ionisation Désorption Laser Assistée Par Matrice - Résonance Cyclotronique Ionique à Transformée de Fourier (MALDI-FTICR), d'une part, et par Chromatographie Liquide-Spectrométrie de Masse en tandem (LC-ESI-MS/MS) après extraction par la méthode de Bligh et Dyer, d'autre part. Pour compléter cette étude, nous avons également étudié les protéines solubles en analyse différentielle par nanoLC-ESI-MS/MS.

Références

- 1 : Lewis, K., *Annu. Rev. Microbiol.* **2010**, 64:357-372
- 2 : Levin-Reisman, I. *et al.*, *Science* **2016**, 355:826-830
- 3 : Nicol, M. *et al.*, *Internat. J. Antimicrab. Agents* **2019**, 53:337-342

O.17 : Evaluation of DIP FT-ICR MS for the study of natural polymers pyrolysis

Théo Voellinger, Frédéric Aubriet, Sébastien Schramm

Laboratoire de Chimie et Physique-Approche Multi-échelles des Milieux Complexes (LCP-A2MC), Metz, France

Thématisques : Développement Méthodologique ; Polymères

Résumé

The production of bio-oils by pyrolysis of lignocellulosic biomass is a potential source of renewable chemicals and fuels. Bio-oils contain a high amount of oxygenated molecules, which reduce their stability and consequently their use. This bottleneck needs to be overcome by the use of upgrading catalytic treatments¹. In this regard, appropriate catalysts need to be found and their efficiency evaluated. The process of their research can be tedious and contain many steps including the production and the analysis of a new bio-oil at each step of the catalyst development.

Therefore, we try to shorten this process (especially in the case of catalytic flash pyrolysis) by developing an on-line High-resolution Mass Spectrometry analysis of pyrolysis products. Thus, a Direct Insertion Probe (DIP) is used to heat/pyrolyze the biomass raw material. The produced compounds are then ionized by APCI (Atmospheric Pressure Chemical Ionization). This methodology ensures the rapid characterization of the biomass thermal degradation products by FT-ICR MS (Fourier-transform Ion Cyclotron Resonance Mass Spectrometry). Before to try and use this technique on biomass with catalysts, we need to better understand the reactions occurring in the probe and prove that they are from pyrolysis processes.

In this regard, we chose to analyze carbohydrates such as glucose and cellulose (one of the components of biomass). The reactions occurring during the pyrolysis of such compounds are well documented² and lead to well-known pyrolysis markers³ such as cellobiosan and levoglucosan. Our first analyses reveal their formation. This is confirmed by MS/MS experiments. Combined with the observation of other reactions pathways, such as depolymerization, dehydration, and production of aromatic compounds, it appears possible to induce in-source pyrolysis reactions and to study the pyrolysis products.

Références

- 1: Hertzog, J. *et al.*, *ACS Sustain. Chem. Eng.* **2018**, 6(4):4717-4728
- 2: Collard, F.-X. & Blin, J., *Renew. Sustain. Energy Rev.* **2014**, 38:594-608
- 3: Zhu, X. & Lu, Q., in: Benteke Momba, M. N. (Ed.), *Biomass*, IntechOpen **2010**, 147-164

0.18 : PyC2MC: an open-source software solution for visualization and treatment of High-Resolution Mass Spectrometry data

Maxime Sueur^{1,2}, Julien F. Maillard^{1,2}, Oscar Lacroix-Andrivet^{1,2,3},
Christopher P. Rüger^{2,4}, Pierre Giusti^{1,2,3}, Hélène Lavanant¹, Carlos Afonso^{1,2}

1 : Chimie Organique et Bioorganique : Réactivité et Analyse (COBRA), Mont-Saint-Aignan, France

2 : International – Complex Matrices Molecular Characterization (iC2MC), Harfleur, France

3 : TotalEnergies OneTech, Total Recherche & Technologie, Harfleur, France

4 : Joint Mass Spectrometry Centre/Chair of Analytical Chemistry, Rostock, Germany

Thématiques : Traitement de Données

Résumé

Complex molecular mixtures are encountered in almost all research disciplines, such as biomedical omics, petroleomics, and environmental sciences. State-of-the-art characterization of sample materials related to these fields, deploying high-end instrumentation, allow for gathering humongous quantity of molecular composition data. One established technological platform is Ultrahigh-Resolution Mass Spectrometry, *e.g.*, Fourier-Transform Mass Spectrometry (FT-MS). However, the huge amounts of data acquired in FT-MS often result in tedious data treatment and visualization. FT-MS analysis of complex matrices can easily lead to single mass spectra with more than 10,000 attributed unique molecular formulae. Sophisticated software solutions to conduct these treatment and visualization attempts from commercial and non-commercial origins exist. However, existing applications have distinct drawbacks, such as focusing on only one type of graphic representation, being unable to handle large datasets, or not being publicly available. In this respect, we developed a software, within the international complex matrices molecular characterization joint lab (iC2MC), named “python tools for complex matrices molecular characterization” (PyC2MC). This piece of software will be open-source and free to use. PyC2MC is written under python 3.9.7 and relies on well-known libraries such as pandas, NumPy, or SciPy. It is provided with a graphical user interface developed under PyQt5. The two options for execution, 1) user-friendly route with pre-packed executable file or 2) running the main python script through a Python interpreter, ensure a high applicability but also an open characteristic for further development by the community. Both are available on the GitHub platform (https://github.com/iC2MC/PyC2MC_viewer).

O.19 : Towards a high-throughput Mass Spectrometry methodology to fish peptide toxins from crude venoms by affinity capture on cell membrane receptors

Lou Freuville¹, Fernanda Gobbi Amorim¹, Romain Vitello², Rudy Fourmy³, Aude Violette³,
Jean-François Liégeois², Alain Brans⁴, Loïc Quinton¹

¹ : Laboratoire de Spectrométrie de Masse (MSLab), Liège, Belgique

² : Centre Interdisciplinaire de Recherche sur le Médicament (CIRM), Liège, Belgique

³ : Laboratoire Alphabiotoxine sprl, Montrœul-au-Bois, Belgique

⁴ : Centre d'Ingénierie des Protéines (CIP), Liège, Belgique

Thématiques : Développement Méthodologique ; Protéomique

Résumé

Animal venoms are complex chemical cocktails, containing a wide range of biologically active peptides whose selectivity and efficiency act against membrane targets, such as ion channels. Venom peptides are largely used in pharmaceutical and medical domains as their molecular targets are involved in various human pathologies such as cancer, neurodegenerative diseases and depression. The scope of venoms for drug discovery is rapidly emerging but is still mostly undone, mainly due to the low availability of compounds, the species size and the complexity of venoms, but also due to the low throughput observed when venoms have to be screened towards various molecular receptors of interest¹.

In this context, our work aims to propose a fast methodology of toxin selection based on affinity capture on cellular membranes and monitored by mass spectrometry. To reach this goal, a set of ten arthropod species was selected due to their high content of toxins potentially targeting potassium channels, which are one of our receptors of interest.

The venoms were firstly analyzed by shotgun proteomics (Q-Exactive), following the classical bottom-up approach (reduction, alkylation and digestion with trypsin). The sequences of peptides obtained by digestion were compared to toxins already known to be active on potassium channels.

Cellular membranes overexpressing potassium channels were produced, purified and prepared in-house, from transfected HEK293 cells. The receptor concentrations were measured with saturation binding experiments, where membranes were incubated with increasing concentrations of radioligand.

Cellular membranes were incubated together with chromatographic fractions of venoms. Toxins displaying affinities for the overexpressed ion channels bind to the membranes, whereas toxins without affinity are maintained in solution. The mixture containing the candidates is analyzed by MALDI mass spectrometry to identify the potential ligands^{2,3}.

This study aims at enables us to highlight potential new toxins targeting potassium channels with a high-throughput filtration method.

Références

- 1: Daly, N. L. & Wilson, D., *Toxicology* **2018**, 152:46-56
- 2: Echterbille, J. *et al.*, *Toxicology* **2017**, 130:1-10
- 3: Ciolek, J. *et al.*, *PNAS* **2017**, 114(27):7154-7159

O.20 : Cysteine redox proteomic study on Hela- μ S cell model from survival to apoptosis

Xhesika Limaj¹, Agnès Delaunay-Moisan², Iman Haddad¹, Joëlle Vinh¹, Giovanni Chiappetta¹

1 : École Supérieure de Physique et de Chimie Industrielles (ESPCI), Paris, France

2 : Institut de Biologie Intégrative de la Cellule (IBIC), Paris, France

Thématiques : Protéomique, Redox, Biologie Moléculaire

Résumé

The Endoplasmic Reticulum (ER) is the cell organelle where secreted and membrane proteins transit for glycosylation, disulfide bond formation and folding. The Unfolded Protein Response (UPR) is a set of compensatory mechanisms triggered by an impaired folding capacity of the ER. The UPR signaling can restore the ER homeostasis, leading to cell survival, or trigger the programmed cell death when the stress is too acute to be resolved¹. The elucidation of the molecular mechanisms underlying cell fate, regulated by the UPR, may have important implications on the understanding of the etiology of many human pathologies like cancer and diabetes². The accumulation of unfolded proteins can alter the ER redox homeostasis and the cysteine residues in proteins are considered one of the most sensitive targets of oxidative/reductive stress. Indeed, cysteine redox switches have been observed during UPR and other ER mechanisms, but their role is still poorly understood³. The engineered Hela- μ S cells have been established to generate a reproducible ER stress model⁴. The aim of this study is to depict the proteome and the cysteine redoxome (cysteine oxidation state at proteomic scale) of the Hela- μ S cells during unresolved ER stress. This has been performed by a SILAC based biotin switch, consisting in the reduced cysteines blocking by iodoacetamide (IAM) followed by the HPDP-biotin labeling of the oxidized cysteines to promote their MS detection. Protein identification and quantification has been performed by MaxQuant software package, while data mining was performed by an in-house R script. Results show an increased and sustained expression of UPR related proteins (such as HSPA5, PRDX4, HYOU1 and HSPB9OB1) and cysteine redox modifications after 64 hours treatment.

Références

- 1 : Hetz, C. & Feroz R. P., *Mol. Cell* **2018**, 69(2):169-181
- 2 : Wang, S. & Kaufman, R. J., *J. Cell Biol.* **2012**, 197(7):857-867
- 3 : Eletto, D. *et al.*, *J. Cell Sci.* **2014**, 127(17):3649-3658
- 4 : Bakunts, A. *et al.*, *eLIFE* **2017**, 6:e27518

O.21 : Antivenomics by Mass Spectrometry: Use of magnetic beads

Rémi Moulian^{1,2}, Julien Maillard^{2,3}, Marie Hubert-Roux^{1,2}, Carlos Afonso^{1,2},
Pierre Giusti^{2,3}, Caroline Mangote^{2,3}

1 : Laboratoire de Spectrométrie de Masse (MSLab), Liège, Belgique

2 : Centre for Snakebite Research & Interventions, Liverpool, U.K.

3 : Centre for Drugs & Diagnostics, Liverpool, U.K.

Thématiques : Développement Méthodologique ; Quantification ; Protéomique

Résumé

Snakebite is classified as a Category A neglected tropical disease by the WHO, as it causes the death of about 150,000 people every year, and up to 4 times more people suffer long-term morbidity, mostly in rural and poor areas of the world. Snake envenoming is classically treated by injecting antivenoms containing antitoxin antibodies (Igs), produced by hyperimmunized animals. As antitoxin Igs represent only 10-15 % of the total antivenom Ig content, such treatments have poor efficacy and the administration of animal Igs may induce immunological adverse reactions, possibly severe for the patient. Moreover, venom compositions strongly differ from species, gender, and habitat, explaining why providing broadly effective antivenoms is a real challenge. An effort has been made to reduce snakebite deaths and disability by 50 % by 2030!

In this context, quantitatively evaluating the toxin-binding (/neutralizing) capability of any antivenom is crucial to improve the production of effective snakebite therapeutics. In this study, we propose an alternative methodology for the so-called 'antivenomics' methodology. Indeed, affinity columns coupled to Mass Spectrometry have been demonstrated performant², but their preparation and their lifetime represent strong constraints to the increase of antivenom evaluation throughput. In this work, we exploit the potential of magnetic beads, LC-MS and shotgun proteomics Mass Spectrometry to speed up antivenom efficacy characterization. The antivenom Igs are bound to magnetic beads, before being incubated in the presence of various venoms. Comparative MS analysis of the toxins remaining in suspension (not recognized by Ig) and those remaining on the beads (recognized by Ig) allows the binding selectivity of the antivenom to be determined. The strategy is demonstrated here with venom from the medically important African viper *Echis ocellatus*.

Références

- 1 : William, D; J. et al., *PLoS Negl. Trop. Dis.* **2019**, 13(2):e0007059
- 2 : Pla, D. et al., *Toxins* **2017**, 9(5):158

0.22 : Spéciation des principaux sucres dans l'huile de pyrolyse de bois par HPTLC-MALDI-FT-ICR-MS et HPTLC-UV

**Damien Redureau¹, Thomas Crasset¹, Fernanda Gobbi Amorim¹, Stefanie Menzies^{2,3},
Gabriel Mazzucchelli¹, Nicholas Casewell^{2,3}, Quinton Loïc¹**

1 : Chimie Organique et Bioorganique : Réactivité et Analyse (COBRA), Mont-Saint-Aignan, France

2 : International – Complex Matrices Molecular Characterization (iC2MC), Harfleur, France

3 : TotalEnergies OneTech, Total Recherche & Technologie, Harfleur, France

Thématiques : Instrumentation ; Quantification ; Élucidation Structurale

Résumé

L'épuisement des ressources en pétrole fossile et leur impact sur l'environnement sont devenus la principale raison de développer des sources d'énergie durables. L'huile de pyrolyse suscite un intérêt considérable en tant que source renouvelable de carburants. Après pyrolyse, la cellulose et l'hémicellulose produisent une grande variété de sucres à un cycle ou deux et la lignine produit principalement des phénols.

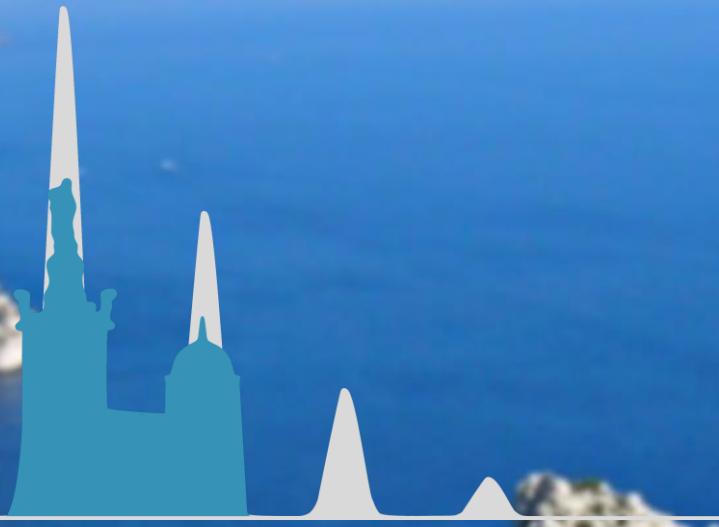
L'huile peut être analysée directement par des techniques de spectrométrie de masse, mais entre une matrice complexe et donc une préférence d'ionisation pour certains composés et tout une série d'isomère de sucres présent dans l'échantillon, il est préférable au préalable de passer par une étape de chromatographie. Dans ce travail, la Chromatographie Liquide Haute Performance sur Couche Mince (HPTLC) est appliquée à la détermination des sucres dans l'huile de pyrolyse de bois. Cette technique permet d'analyser 20 échantillons avec une seule plaque à usage unique sans préparation d'échantillon. Ensuite les échantillons présents sur la plaque peuvent être analysés par Matrix Assisted Laser Desorption Ionization-Fourier Transformation-Ion Cyclotron-Mass Spectrometry (MALDI-FT-ICR-MS) en présence d'oxyde de graphène¹ qui permet de d'identifier les sucres présents en fonction de la distance d'élution.

Le recouplement des données entre UV et FT-ICR-MS permet de confirmer la présence des principaux sucres suspectés par l'UV. La procédure proposée permet la séparation et la quantification par UV des anhydrosucres levoglucosan, cellobiosan, glucose, arabinose, xylose et cellobiose². Les résultats de calibration donnent un $R^2 > 0.98$ pour 5 standards et la séparation a permis de les quantifier dans les échantillons. Il apparaît que le lévoglucosan est le principal sucre présent dans ces échantillons avec environ 3 % du contenu en masse. De plus l'analyse par MALDI-FT-ICR-MS a mis en évidence la présence d'autres sucres qui jusqu'à présent étaient détectés mais non identifiés par UV.

Références

1 : Dabin, L. et al., *Food Chem.* **2021, *342*:128356**

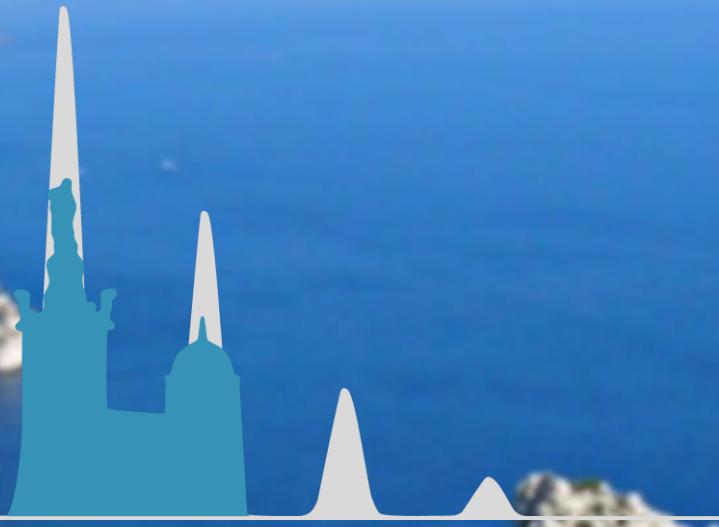
2 : Tessini, C. et al., *J. Chromatogr. A* **2011, *1218*(24):3811-5**



MARSEILLE

The background image shows a dramatic coastal landscape with large, light-colored limestone rock formations rising from the sea. The water is a vibrant blue, and the sky is clear and bright.

Communications des Partenaires



MARSEILLE

S.01 : New generation of High-Resolution Mass Spectrometers based on Multi-Reflecting Time-of-Flight technology and on Cyclic Ion Mobility separation

Par José Portela✉



Waters

✉ : jose_portela@waters.com

S.02 : Un nouvel outil JEOL au service de l'élucidation structurale

Par Imane Senoussaoui✉



Jeol

✉ : senoussaoui@jeol.fr

S.03 : Modifying your Mass Spectrometer to Extend its Capabilities

Par Steven Daly✉



MS Vision

✉ : sd@msvision.com

S.04 : TIMS, intégrer la 4ème dimension dans les applications OMICS

Par Sabine Jourdain✉

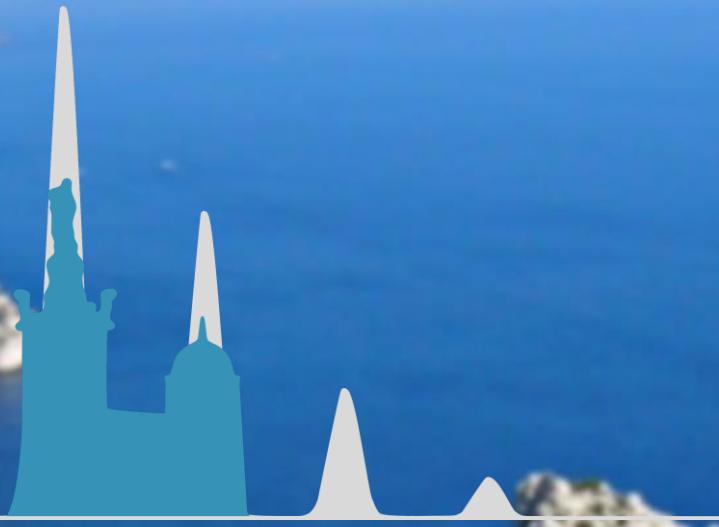


Bruker

✉ : sabine.jourdain@bruker.com

S.0A : Thermo Fisher Scientific

Thermo
SCIENTIFIC



MARSEILLE

The background image shows a dramatic coastal landscape. In the foreground, there are large, light-colored, craggy rock formations with patches of green vegetation. The middle ground features a deep blue sea with some lighter blue areas where sunlight reflects off the water. In the distance, more rocky islands or peninsulas are visible under a clear, light blue sky.

Liste des Participants



MARSEILLE

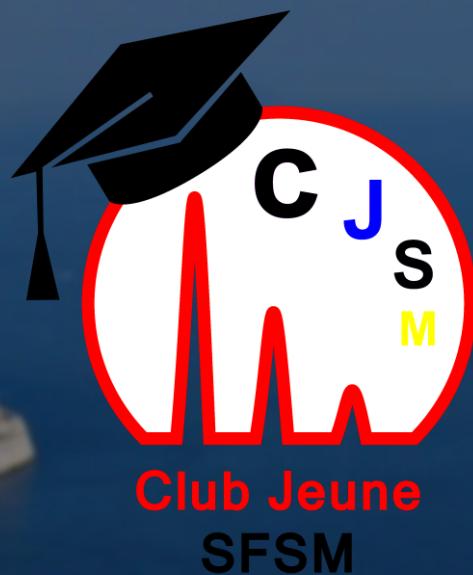
NOM Prénom	Etablissement	Poste	Com.	Adresse électronique
Participants				
ALMASRI Bayan	MSAP, Lille	Doctorat 2e année	0.04	bayan.almasri1234@gmail.com
AUCHERE Noémie	IFPEN, Solaize	Doctorat le année		noemie.auchere@ifpen.fr
AVERTY Estelle	COBRA, Rouen	Master		avertyestelle.ea@gmail.com
BURGUET Pierre	MSLab, Liège	Doctorat 3e année	0.05	pburguet@uliege.be
CASTILLA Clément	COBRA, Rouen	Post-Doctorat	0.08	castilla.clement@gmail.com
CÔME Joseph	IPREM, Pau	Doctorat 2e année		joseph.come@univ-pau.fr
DEVAUX Jason	COBRA, Rouen	Doctorat 2e année	0.13	jason.devaux@insa-rouen.fr
DIAZ-HERMIDA Marina	LAMBE, Évry	Doctorat le année	0.14	marina.diazhermida@univ-evry.fr
DURLACH Arnaud	IPREM, Pau	Master		arnaud.durlach@etud.univ-pau.fr
EL OUAR Ilias	IFPEN, Solaize	Doctorat le année		ilias.el-ouar@ifpen.fr
FATAKA Alexia	CRCM, Marseille	Ingénieur d'Étude		alexiafataka@gmail.com
FREUVILLE Lou	MSLab, Liège	Doctorat 2e année	0.19	lfreuville@uliege.be
GARCIA Adeline	PIIM, Marseille	Doctorat 3e année	0.07	adeline.garcia@univ-amu.fr
GEORGE Anaïs	COBRA, Rouen	Doctorat 3e année	0.09	anais.george@univ-rouen.fr
GIRALDO-DAVILA Deisy	IPREM, Pau	Doctorat 3e année		deisy.deisy-giraldo-davila@univ-pau.fr
HAJJAR Zeina	MSLab, Liège	Doctorat le année	0.10	zeinahajjar98@hotmail.com
LIMAJ Xhesika	ESPCI, Paris	Doctorat 2e année	0.20	xhesika.limaj@espci.fr
LIMOUSIN Guillaume	COBRA, Rouen	Master		guillaume.limousin01@gmail.com
MAMJOUD Amal	MNHN, Paris	Doctorat 3e année		amal.mamjoud@gmail.com
MASE Charlotte	COBRA, Rouen	Doctorat 3e année	0.15	charlotte.masel312@gmail.com
MOULIAN Rémi	COBRA, Rouen	Post-Doctorat	0.21	remi.moulian@univ-rouen.fr
MULLER Hugo	MSLab, Liège	Doctorat 2e année		hugo.muller@uliege.be
ORLANDI Carla	Toxalim, Toulouse	Doctorat le année		carla.orlandi@inrae.fr
PACHOLSKI Pierre	LCP-A2MC, Metz	Doctorat 2e année	0.03	pierre.pacholski@gmail.com
PHAN Minh-Trang	Sanofi, Lyon	Alternance		minh.trangphan221199@gmail.com
REDUREAU Damien	MSLab, Liège	Doctorat 2e année	0.22	damien-red@hotmail.com
SOEP Clément	IPCM, Paris	Doctorat le année		clement.soep@sorbonne-universite.fr
TILMANT Thomas	MSLab, Liège	Doctorat 3e année	0.12	ttilmant@uliege.be
TSIRKOU Aikaterini	ILM, Lyon	Doctorat 2e année	0.11	kttkaterina@gmail.com
VERGOZ Delphine	COBRA, Rouen	Doctorat 2e année	0.16	delphine.vergoz@univ-rouen.fr
VIZZINI Lisa	Sanofi, Lyon	Alternance		lisa.vizzini@etu.univ-lyon1.fr
VOELLINGER Théo	LCP-A2MC, Metz	Doctorat le année	0.17	theo.voellinger@univ-lorraine.fr

NOM Prénom	Etablissement	Poste	Com.	Adresse électronique
Participants-Organisateurs				
GHOSSON Hikmat				hikmatghosson@gmail.com
HISLER Gaëlle	FSCM, Marseille	Ingénieur d'Étude		gaelle.hisler@univ-amu.fr
PERRUCHON Olivier	COBRA, Rouen	Post-Doctorat		olivier.perruchon@univ-rouen.fr
POINDRON Adrien	PIIM, Marseille	Ingénieur de Recherche	0.02	adrien.poindron@univ-amu.fr
ROSÉ Gauthier	LAMS, Paris	Doctorat 2e année	0.06	gauthier.rose.raila@hotmail.com
SERGENT Isaure	ICR, Marseille	Doctorat 2e année	0.01	isaure.sargent@univ-amu.fr
SUEUR Maxime	COBRA, Rouen	Doctorat 3e année	0.18	maxime.sueur@univ-rouen.fr
Enseignants				
CHARLES Laurence	ICR, Marseille	Professeur des Universités	C.04	laurence.charles@univ-amu.fr
GIAI GIANETTO Quentin	MSBio, Paris	Ingénieur de Recherche	C.02	quentin.giaigianetto@pasteur.fr
MACALEESE Luke	ILM, Lyon	Chargé de Recherche	C.0A	luke.mac-aleese@univ-lyon1.fr
MARCOUX Julien	IPBS, Toulouse	Chargé de Recherche	C.03	julien.marcoux@ipbs.fr
NOBLE Jennifer	PIIM, Marseille	Chargé de Recherche	0.01	jennifer.noble@univ-amu.fr
Représentants Partenaires Industriels				
DALY Steven	MS Vision		S.03	sd@msvision.com
JOURDAIN Sabine	Bruker		S.04	sabine.jourdain@bruker.com
PORTELA José	Waters		S.01	jose_portela@waters.com
SENOUSSAOUI Imane	JEOL		S.02	senoussaoui@jeol.fr
THIRIET Yannick	Thermo Fisher Scientific		S.0A	yannick.thiriet@thermofisher.com



MARSEILLE

Le Club Jeune de la Société Française de Spectrométrie de Masse



Pour nous suivre :



www.cjsm.s fsm.fr



www.linkedin.com/company/cjsmsfsm



www.twitter.com/Clubjeune



www.facebook.com/ClubJeuneSFSM

Pour nous contacter :



clubjeunesm@gmail.com