

**Waters**  
THE SCIENCE OF  
WHAT'S POSSIBLE.®

**ThermoFisher**  
SCIENTIFIC

protein**simple**  
a biotechne brand

**BRUKER**

**SHIMADZU**  
*Solutions for Science*  
since 1875

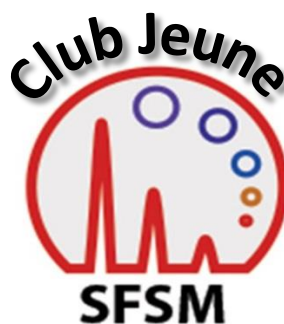
euriso-top®  
YOUR PARTNER FOR  
LABELLED COMPOUNDS  
(<sup>13</sup>C, <sup>15</sup>N, D, <sup>18</sup>O)

 **Agilent Technologies**



Ecole de printemps de la  
Société Française de  
Spectrométrie de Masse

XXI<sup>èmes</sup> Rencontres du  
Club Jeune de la SFSM



21 au 25 mars 2016

Monastère de Ségriès  
Moustiers-Sainte-Marie  
Alpes de Haute-Provence, Région  
Provence-Alpes-Côte d'Azur



# Programme détaillé

	Lundi	Mardi	Mercredi	Jeudi	Vendredi Avant 8h30 Fermeture des chambres et regroupement des valises
8h30		“La détection des ions en spectrométrie de masse” G. Bolbach	“Réseaux moléculaires” D. Touboul	“Réseaux moléculaires” D. Touboul	“TOF-SIMS” D. Touboul
		Pause café	Pause café	Pause café	Pause café
		Session 1 5 présentations	Session 3 5 présentations	Session 4 5 présentations	“Pétroléomique” F. Aubriet
		ProteinSimple	Agilent	Waters	
12h15		Pause déjeuner 12h15	Pause déjeuner 12h15	Pause déjeuner 12h15	Bruker <b>12h45</b> Départ en car du monastère Panier repas
14h00		ThermoFisher	Après-Midi Récréative	“Pétroléomique” F. Aubriet	<b>14h30</b> Arrivée à la gare d’Aix-en-Provence TGV
	Session 2 4 présentations				
	Pause café			Pause café	
	“La détection des ions en spectrométrie de masse” G. Bolbach			Session 5 5 présentations	
17h45				Shimadzu	
18h	Accueil sur le site				
19h00	Diner 19h	Diner 19h	Diner 19h	Diner 19h	
	Soirée d’accueil			Soirée de Gala	

## 08h30-10h15 : “La détection des ions en spectrométrie de masse”

**Gérard Bolbach**

Laboratoire des BioMolécules (UMR 7203), Université P & M Curie, Plate-forme Spectrométrie de Masse et Protéomique (IBPS), Paris



## 10h30-11h45 : Session 1

**10h30 O1** - “La chromatographie en phase supercritique couplée avec la spectrométrie de masse haute résolution, un outil pour étudier les nucléosides ?”

Laurent Laboureur, Vincent Guérineau, Alain Brunelle, David Touboul

**10h45 O2** - “Parents and fragments MS/MS at high resolution through software & hardware improvements of 2D FT-ICR MS”

Julien Bouclon, Philippe Pelupessy, Marc-André Delsuc, Geoffrey Bodenhausen, Christian Rolando

**11h00 O3** - “Evidence of Lasso and Branched-cyclic Structures using Ion Mobility – Mass Spectrometry”

Kevin Jeanne Dit Fouque, Hélène Lavanant, Séverine Zirah, Julian D. Hegemann, Marcel Zimmermann, Mohamed A. Marahiel, Sylvie Rebuffat, Carlos Afonso

**11h15 O4** - “A Quantitative Determination Method for the Analysis of Quaternary Ammonium Compounds Residues in Bovine Milk by HPLC-MS/MS”

Kahina Slimani, Aurélie Féret, Yvette Pirotais, Jean-Pierre Abjean, Pierre Maris, Dominique Hurtaud-Pessel

**11h30 O5** - “Targeted analysis in PRM mode towards clinical application : Optimization of experimental setup and data processing for accurate amyloid diagnosis”

Sophie Liuu, Emmanuelle Demey-Thomas, Emie Durighello, Gilles Grateau, Joëlle Vinh

**11h45-12h15 : Intervention de Stéphanie Lerat et Christophe Quétard, ProteinSimple**  
“Simple Western is here”

[stephanie.lerat@proteinsimple.com](mailto:stephanie.lerat@proteinsimple.com), [christophe.quetard@proteinsimple.com](mailto:christophe.quetard@proteinsimple.com)

Modérateur: Laurent Laboureur

**14h00-14h30 : Intervention de Gilles Schnell, ThermoFisher Scientific**  
“Apports de la haute résolution pour les approches quantitatives en protéomique”  
[gilles.schnell@thermofisher.com](mailto:gilles.schnell@thermofisher.com)

## 14h30-15h30 : Session 2

**14h30 O6** - “Caractérisation du métabolome secondaire de *Penicillium* par marquage isotopique et spectrométrie de masse haute résolution”

Thaïs Hautbergue, Olivier Puel, Lauriane Meneghetti, Souria Tadrist,  
Pascal Bourdaudhui, Laurent Debrauwer, Isabelle P. Oswald, Emilien L. Jamin

**14h45 O7** - “Study of Gel Permeation Chromatography High Resolution Inductively Coupled Plasma Mass Spectrometry parameters in petroleum product analysis”

Sara Gutierrez Sama, Alain Desprez, Gabriel Krier, Charles-Philippe Lienemann,  
Jérémy Barbier, Ryszard Lobinski, Caroline Mangote, Pierre Giusti,  
Brice Bouyssière

**15h00 O8** - “Cinétique et analyse protéomique différentielle associée à l’infection par *Dickeya dadantii* d’un modèle végétal : de la phase de découverte au transfert d’une méthode MRM ciblée”

Blandine Rougemont, Jean-Marie Lacroix, Jérôme Lemoine

**15h15 O9** - “SPIDERMASS: A Novel Mass Spectrometry Based Instrument for *in vivo* Real-Time Analysis with Low Invasiveness for Guided Surgery”

Philippe Saudemont, Benoit Fatou, Maxence Wisztorski, Cristian Focsa,  
Michel Salzet, Michael Ziskind, Isabelle Fournier



**15h45-17h45 : “La détection des ions en spectrométrie de masse”**

**Gérard Bolbach**

Laboratoire des BioMolécules (UMR 7203), Université P & M Curie, Plate-forme Spectrométrie de Masse et Protéomique (IBPS), Paris

## 08h30-10h15 : “Réseaux moléculaires”

**David Touboul**

Institut de Chimie des Substances Naturelles (ICSN, CNRS - UPR 2301), Université Paris-Saclay,  
Avenue de la Terrasse, 91198 Gif-sur-Yvette, France



## 10h30-11h45 : Session 3

- 10h30**    **O10** - “Tandem Mass Spectrometry Analysis of a Mixture of Linear and Cyclic Peptides Isomers using the Survival Yield Technique”  
  
Dany Jeanne Dit Fouque, Alicia Maroto, Rémy Lartia, Philippe Giamarchi,  
Antony Memboeuf
- 10h45**    **O11** - “Proteomic analysis of human endosulfatases HSulfs, key enzymes in the modulation of the sulfation pattern of heparan sulfate”  
  
Ilham SEFFOUH, Regis Daniel, Florence Gonnet, Cédric Przybylski
- 11h00**    **O12** - “iASAP: a new fast and easy way to characterize air sensitive compounds by mass spectrometry using atmospheric solid analysis probe”  
  
Mathilde Farenc, Carlos Afonso, Pierre Giusti
- 11h15**    **O13** - “Biophysical characterization of RNA-metabolite complexes by native MS”  
  
Stefano Piccolo et Valérie Gabelica
- 11h30**    **O14** - “High resolution imaging of maize stem with time-of-flight secondary ion mass spectrometry”  
  
Tingting Fu, Quentin Vanbellinghen, David Touboul, Serge Della-Negra,  
Alain Brunelle

**11h45-12h15 : Intervention de Emmanuel Sauvard, Agilent**  
[emmanuel.sauvard@agilent.com](mailto:emmanuel.sauvard@agilent.com)

Mercredi 23 mars

---



Après-Midi

Récréative



## 08h30-10h15 : "Réseaux moléculaires"

**David Touboul**

Institut de Chimie des Substances Naturelles (ICSN, CNRS - UPR 2301), Université Paris-Saclay, Avenue de la Terrasse, 91198 Gif-sur-Yvette, France



## 10h30-11h45 : Session 4

- 10h30 O15** - "Spectrométrie de mobilité ionique et spectrométrie de masse pour la caractérisation d'assemblages hybrides de polyoxométallates"
- Hupin S., Piot M., Lavanant H., Izzet G., Afonso C.
- 10h45 O16** - "Identifying the molecular targets of autoimmunity in type 1 diabetes by HLA-peptidomics"
- S. Gonzalez Duque, Y. Verdier, J. Vinh, R. Mallone
- 11h00 O17** - "Identification of fish proteins and their biological species in garum sauce using proteomics"
- Sergui Mansour, Stéphanie Devassine, Nicolas Garnier, Christian Rolando, Caroline Tokarski
- 11h15 O18** - "Substrate-Mediated Laser Ablation for Spatially-Resolved Biomolecules Analysis by Mass Spectrometry"
- Tony Maulouet, Benoit Fatou, Maxence Wisztorski, Cristian Focsa, Michel Salzet, Michael Ziskind, Isabelle Fournier
- 11h30 O19** - "Complementary use of gas chromatography-mass spectrometry and thin layer chromatography-mass spectrometry for chemical differentiation and identification of resinous materials"
- Zaineb Jemmali, Agnès Chartier, Claire Elfakir

## 11h45-12h15 : Intervention de Freddy Drouyé, Waters

"Vion IMS QTOF, avantage de la mobilité ionique en routine pour l'identification et la quantification"

[freddy\\_drouye@waters.com](mailto:freddy_drouye@waters.com)



Modérateur: *Sophie Liuu*

## 14h00-15h45 : “Analyse de pétroles par spectrométrie de masse - Pétroléomique”

**Frédéric Aubriet**

Université de Lorraine, Laboratoire de chimie et physique - Approche multi-échelles des milieux complexes (LCP-A2MC), 1 boulevard Arago, 57078 Metz Cedex 03, France



## 16h00-17h15 : Session 5

**16h00 O20** - “Comparative proteomic analysis of *Streptomyces coelicolor* A(3) and *Streptomyces lividans* TK24 using a quantitative label-free proteomic approach”

Aaron Millan-Oropeza, Céline Henry, Melisande Blein-Nicolas,  
Anne Aubert-Frambourg, Marie-Jöelle Virolle

**16h15 O21** - “Study of RNA kissing complexes and their interaction with Magnesium cations by native MS”

Clémence Rabin, Adrien Marchand, Joséphine Abi-Ghanem, Valérie Gabelica

**16h30 O22** - “Vers une méthode d’analyse par LDI et MALDI-FTICRMS de bio-huiles issues de la pyrolyse de la biomasse”

J. Hertzog, V. Carré, A. Dufour, F. Aubriet

**16h45 O23** - “Development of novel Thin Layer Chromatography coupled with Mass Spectrometry methodology for the identification of inhibitors and/or substrates in plant extracts”

J. Ferey, D. Da Silva, S. Veyrat, M. Rio, C. Colas, B. Maunit

**17h00 O24** - “New strategy for identification of secondary metabolites based on both mass spectrometry and bioinformatics.”

Mickaël Chevalier, Philippe Jacques, Maude Pupin, Valérie Leclere,  
Christophe Flahaut

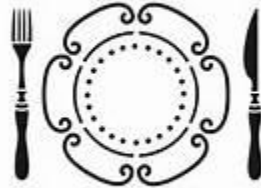
## 17h15-17h45 : Intervention de Doriane Toinon, Shimadzu

“Erexim™ (Energy-resolved oxonium ion monitoring)

Quantification et caractérisation des glycanes et glycopeptides par LC-MS/MS”

[dto@shimadzu.fr](mailto:dto@shimadzu.fr)

*Repas*



*&*

*Soirée de Gala*



*...Au Brésil...*



*Tenue correcte exigée!*



# Vendredi 25 mars

---

Modérateur: *Mathieu Beaumesnil*

## 08h30-10h15 : "TOF-SIMS"

**David Touboul**

Institut de Chimie des Substances Naturelles (ICSN, CNRS - UPR 2301), Université Paris-Saclay, Avenue de la Terrasse, 91198 Gif-sur-Yvette, France



## 10h30-12h15 : "La pétrologie et bio-carburants. Applications de la méthode pétrologie à d'autres champs d'investigation"

**Frédéric Aubriet**

Université de Lorraine, Laboratoire de chimie et physique - Approche multi-échelles des milieux complexes (LCP-A2MC), 1 boulevard Arago, 57078 Metz Cedex 03, France

**12h15-12h45 : Intervention de Andreas Hurbain, Bruker**  
[andreas.hurbain@bruker.com](mailto:andreas.hurbain@bruker.com)



## 12h45 : Départ en car du monastère

Arrivée prévue à la gare d'Aix-en-Provence TGV vers 14h30  
Paniers repas distribués dans le car



---

---

## Cours de la semaine

---

---

# La détection des ions en spectrométrie de masse

**Gérard Bolbach**

*Laboratoire des BioMolécules (UMR 7203), Université P & M Curie, Plate-forme Spectrométrie de Masse et Protéomique (IBPS), Paris*

Le système de détection des ions en spectrométrie de masse est le plus souvent ignoré comme allant de soi. On parle plus facilement des sources d'ions et des analyseurs et rarement du principe et des performances du détecteur et des systèmes électroniques qui lui sont associés. Or sans ces derniers aucune information ne peut être obtenue. Dans le même genre d'idées le spectromètre de masse n'est-il pas considéré comme un simple détecteur dans certaines analyses biologiques...

La pertinence des informations obtenues par spectrométrie de masse repose donc sur un ensemble de principes, techniques et méthodes qui forment un tout. Il importe donc de posséder un minimum de connaissances scientifiques dans tous les compartiments (source d'ions, analyseurs et détection/signal) pour utiliser au mieux les spectromètres de masse d'aujourd'hui. Il y a encore quelques dizaines d'années le chercheur devait construire le spectromètre dont il avait besoin, l'obligeant ainsi à mettre au point les différents étages et à en comprendre les principes, performances et limitations. Dans la période actuelle l'utilisation d'appareils commerciaux très performants implique bien souvent une connaissance réduite des différents éléments du spectromètre. Le but de ce cours est de donner les bases nécessaires pour mieux appréhender la partie détection des ions.

Les détecteurs constituent une vaste classe de dispositifs permettant de palier aux limites de nos moyens de détection naturels (nos sens de la perception: vision, touché, odorat, ouïe, chimioception, thermoception...) afin de nous renseigner sur des phénomènes physiques, chimiques et biologiques. Ces dispositifs sont très variés et présentent de multiples facettes. La détection de fumée par absorption optique, la détection de particules radioactives par ionisation d'un gaz, la mesure du taux d'oxygénation dans le sang par comparaison d'intensité lumineuse à deux longueurs d'onde, la mise en évidence de particules très énergétiques (trajectoire, masse, charge...) en physique des hautes énergies sont autant d'exemples nécessitant l'usage d'un détecteur approprié. La détection des ondes gravitationnelles, de protéines en protéomique et celle des variations du taux de CO<sub>2</sub> depuis des époques reculées sont autant de sujets récents qui ont nécessité la mise au point de détecteurs spécifiques. Le détecteur permet de délivrer en général un signal électronique de durée et d'amplitude données qui est retranscrit sous une forme sonore ou graphique directement interprétable par nos sens. Le dernier détecteur sera nos yeux par la visualisation d'un spectre.

Dans ce cours, nous présenterons les différents types de détecteurs d'ions utilisés en spectrométrie de masse, leurs principes physiques et leurs propriétés spécifiques. La gamme de masse ( $1u-10^7u$ ), la gamme de charge ( $z\sim 1-10^3$ ) et la gamme de vitesse ou d'énergie cinétique ( $\sim eV-MeV$ ) des ions vont conditionner les processus physiques susceptibles de les détecter. De plus, en spectrométrie de masse les ions produits doivent être préservés de toute dégradation (collisions avec des surfaces solides ou avec des molécules de gaz, excitation photonique...) afin de les analyser en termes de rapport  $m/z$ . Deux types de

détecteurs peuvent être considérés: celui qui nécessite que l'intégrité complète de l'ion soit préservée lors du processus de détection car faisant partie de la mesure du rapport  $m/z$  (ICR, Orbitrap) et celui pour lequel le processus de détection entraîne la perte l'intégrité de l'ion (quadripôle, piège ionique, temps de vol) avec création de particules secondaires. On peut également considérer le type de propriétés physiques impliquées dans le processus de détection : détection de charges électriques directes (mesure de courant avec une cage de Faraday, cas ICPMS), détection d'une force image induite par le mouvement d'un ion au voisinage d'une surface conductrice (cas FTICR, Orbitrap), détection d'électrons secondaires par impact d'un ion sur une surface conductrice ou semi-conductrice (multiplicateur d'électrons : cas quadripôle, piège ionique, temps de vol). Dans certaines applications des détecteurs hybrides basés sur des conversions plus sophistiqués (conversion ion /électron/photon/électron, ion/ion/électron) ou encore permettant d'obtenir des informations plus complètes (détecteurs de position en imagerie ionique, ou encore sur la conformation des ions) ont été développés.

Les détecteurs sont aussi associés à une électronique adaptée. C'est cet ensemble qui en fin de compte conduira au signal dont l'amplitude sera utilisée pour la reconstitution de l'ordonnée du spectre de masse en intensité et bien souvent abusivement en nombre d'ions.

Dans ce cours seront également abordés les caractéristiques des détecteurs : gain, efficacité de détection, bruit de fond, dynamique, modes continu et comptage, les effets de discrimination liés aux caractéristiques des ions (vitesse, masse, charge...) et l'implication du détecteur dans une approche quantitative.

Les détecteurs d'aujourd'hui sont très performants et permettent avec les progrès réalisés sur les sources et les analyseurs d'atteindre des sensibilités toujours plus élevées à l'origine du développement en particulier des sciences « omiques » et de l'imagerie par spectrométrie de masse.

Ces détecteurs souffrent bien entendu de certaines limitations sur la détection des ions de haute masse et faiblement chargés ainsi que sur les aspects quantitatifs interférant avec les effets de suppression en source par exemple. Des nouveaux détecteurs basés sur des principes physiques différents (détecteurs cryogéniques, détecteurs de charge, détecteurs à base de nanomatériaux...) sont en cours d'études et de développement.





---

---

# Présentations Sponsors

---

---

# Simple Western is here.

## Abstract

As MS experts you're probably familiar with other technics like 2d gel electrophoresis, chromatography and capillary electrophoresis.

At proteinsimple we do propose a Capillary Electrophoresis Immunoassay based instrumentation. Called Simple Western, this is a very revolutionary way of getting western blot data. This antibody based technic is fully automated reproducible, quantitative.

On a daily basis you may work on crude samples like lysates, biological fluids and try to detect and quantify specific proteins. Depending of the sample type, the protein Mw and/or post-translational modifications it might take you a lot of time and energy to develop specific protocols.

We will take the opportunity of this presentation:

- To explain how Simple Western works
- To introduce our instrument portfolio
- To present a panel of applications.

We will also take the time to explore whether this technology can answer some of your needs and enable you to provide a quicker answer when you have too many samples, or simply tricky samples or targets.

[www.simplewestern.com](http://www.simplewestern.com)

## Renseignements

Stéphanie Lerat | Sales Specialist | [stephanie.lerat@proteinsimple.com](mailto:stephanie.lerat@proteinsimple.com) | 33 786274894  
Christophe Quétard | Field Applications Scientist | [christophe.quetard@proteinsimple.com](mailto:christophe.quetard@proteinsimple.com)

# Apports de la haute résolution pour les approches quantitatives en protéomique

Gilles Schnell

[gilles.schnell@thermofisher.com](mailto:gilles.schnell@thermofisher.com)

La spectrométrie de masse a largement contribué à l'essor des approches quantitatives en protéomique. Il est désormais possible de réaliser la quantification de milliers de protéines dans une seule analyse. Cet essor est intimement lié à l'évolution instrumentale et à l'accessibilité à des instruments suffisamment rapides et résolutifs. Il existe globalement trois phases en protéomique quantitative : discovery, screening et routine. Au cours de cette présentation, nous verrons les spécificités de chacune de ces phases, notamment en termes de modes d'acquisitions utilisés en spectrométrie de masse. Nous montrerons également l'intérêt de l'utilisation des spectromètres de masse tribrides, et notamment l'Orbitrap Fusion Lumos, pour la réalisation de telles études.

# Vion IMS QTOF, avantage de la mobilité ionique en routine pour l'identification et la quantification

Freddy Drouyé

MS Specialist, Waters, BP 608, 78056 St Quentin en Yvelines, France

La combinaison de la mobilité ionique avec la spectrométrie de masse et la chromatographie permet de simplifier les spectres pour l'élucidation structurale et de mesurer en même temps des valeurs de section efficace de collision (CCS). La capacité à rassembler et à traiter les données de CCS comme critère physico-chimique additionnel permet d'obtenir des données plus fiables que celles obtenues à partir de la masse exacte et du temps de rétention seuls. Le gain en sélectivité apporté par l'incorporation de la mobilité ionique dans des expériences de spectrométrie de masse haute résolution améliore la qualité des résultats grâce à une identification et une quantification plus fiables des composés.

L'intérêt de la spectrométrie de masse à mobilité ionique a accru rapidement ces dernières années, facilité par les améliorations significatives des instruments commerciaux. Lors de cette présentation, nous décrirons comment les dernières avancées technologiques ont permis l'intégration de la mobilité ionique dans les modes d'acquisitions MS, MS/MS et MRM. Nous montrerons aussi comment son utilisation en routine dans les flux de travail analytiques à l'aide d'un nouveau logiciel permet de transformer rapidement les données en connaissance.

# **Erexim™ (Energy-resolved oxonium ion monitoring)**

## **Quantification et caractérisation des glycanes et glycopeptides par LC-MS/MS**

Doriane Toinon

Les glycanes sont des polymères composés de monosaccharides. Ils sont souvent trouvés liés aux protéines : glycoprotéines et protéoglycanes. Ils varient fortement en structure et en nombre selon les cellules et les organes.

Des études récentes ont démontré que les structures glycaniques avaient un impact direct sur l'activité des protéines ainsi que sur leur innocuité. En effet, dans certaines maladies auto-immunes ou auto-inflammatoires, l'organisme "attaque" certains de ses propres glycanes légèrement modifiés. Il arrive également qu'ils soient exploités par les virus pour infecter leur hôte (ex : l'acide sialique et le virus de la grippe). Ainsi la quantification et la qualification des glycanes et des glycoprotéines permettraient de les utiliser comme biomarqueurs pour le diagnostic et le suivi de certaines maladies ou encore pour mettre au point une prochaine génération de médicaments pour les maladies les impliquant (ex : parasite Helminthes).

Ainsi, Shimadzu a mis au point une solution : la plate-forme Erexim. Elle permet le suivi des ions glycanes (ions oxonium). Les modèles sont obtenus par analyse d'un profil de fragmentation à différentes énergies de collisions. L'ensemble des tracés des intensités des fragments en fonction de ces énergies est caractéristique d'un glycopeptide. Il est ainsi possible de distinguer des structures isobares et de les quantifier spécifiquement. L'analyse repose sur une digestion trypsique des protéines suivie d'une purification sur cartouche afin d'obtenir les glycopeptides. Par la suite ils sont séparés par HPLC en phase inverse et analysé par un LCMS-8050 Shimadzu. Le glycopeptide ciblé est sélectionné en Q1, la fragmentation est induite par différentes énergies de collision en Q2 et les fragments d'oligosaccharides sont quantitativement contrôlés en Q3. La plate-forme Erexim regroupe une méthode d'analyse quantitative et structurale des glycanes des glycopeptides en 10 min par spectrométrie de masse, une base de donnée des profils pour 45 composés différents ou isomériques (modifiable par l'utilisateur) et un générateur de méthode MRM pour la création de nouveaux profils.



Fort d'une expérience de 25 ans, Euriso-top synthétise et commercialise la plus large gamme de composés marqués par des isotopes (D, <sup>13</sup>C, <sup>15</sup>N, <sup>18</sup>O).

C'est ainsi que depuis sa création en plein cœur du CEA de Saclay, que l'entreprise Euriso-top s'est imposée comme le leader européen en solvants deutérés et en molécules marquées, en proposant plus de 15.000 références produits, couvrant de multiples domaines de la recherche.

Elle confirme ainsi sa vocation d'être, pour toute la communauté scientifique, le partenaire privilégié de leurs recherches.

**Renseignements:**

Romain Hubert

Responsable Marketing et Communication

[rhubert@eurisotop.com](mailto:rhubert@eurisotop.com)

---

---

# Résumés

---

---

# O1 - La chromatographie en phase supercritique couplée avec la spectrométrie de masse haute résolution, un outil pour étudier les nucléosides ?

Laurent Laboureur, Vincent Guérineau, Alain Brunelle, David Touboul

*Institut de Chimie des Substances Naturelles, CNRS UPR2301, Univ. Paris-Sud, Université Paris-Saclay, Avenue de la Terrasse, 91198 Gif-sur-Yvette, France*

Suite à la commercialisation relativement récente de nouveaux systèmes analytiques, la chromatographie en phase supercritique (SFC) peut aujourd'hui apparaître comme une alternative aux techniques HPLC/UPLC pour l'étude de composés hydrophobes. En effet, ses propriétés physico-chimiques font que le CO<sub>2</sub> supercritique permet une excellente solubilité de ce type d'analytes et l'obtention de performances analytiques égales ou supérieures à l'UPLC.

Les qualités séparatives de la SFC ont déjà été démontrées dans notre équipe sur des composés peu polaires[1]. Afin d'étendre le domaine d'application de la SFC, des nucléosides (bases nucléiques liés à un sucre) ont été choisis comme molécules modèles. En effet, quatre nucléosides constituent majoritairement l'ARN mais plus d'une centaine, dérivant des quatre majoritaires, sont connus pour être présents de façon minoritaire. À ce jour, aucune étude complète sur la séparation de ces molécules polaires par SFC n'a été décrite. La méthodologie mise en œuvre consiste à cribler une dizaine de phases stationnaires et à étudier l'influence du co-solvant et d'additif dans la phase mobile. Nos premiers résultats indiquent une bonne séparation chromatographique d'une douzaine de nucléosides en moins de 15 minutes, avec une sensibilité en électrospray compatible avec l'étude d'échantillons biologiques.

[1] M. Méjean, A. Brunelle, D. Touboul, *Anal. Bioanal. Chem.* 2015, 407, 5133.



## O2 - Parents and fragments MS/MS at high resolution through software & hardware improvements of 2D FT-ICR MS

Julien Bouclon, Philippe Pelupessy, Marc-André Delsuc, Geoffrey Bodenhausen, Christian Rolando

*Laboratoire des Biomolécules, UMR 7203, Ecole Normale Supérieure, Paris  
Miniaturisation pour la Synthèse, l'Analyse et la Protéomique (MSAP-Lille 1),  
USR-CNRS 3290, Villeneuve d'Ascq*

*Institut de Génétique et de Biologie Moléculaire et Cellulaire (IGBMC), UMR-CNRS 7104, Illkirch*

Mass spectrometry provide two kinds of information: molecular mass of molecules, obtained all at once, and structure through fragmentation, painfully obtained one by one. Proposed in 1987 and inspired from 2D-NMR techniques, two-dimensional FT-ICR-MS allow simultaneous parallel acquisition of structural information whatever the number of molecules, opening a new way to analyze complex sample without prior chromatography separation. Since its discovery, few studies were performed on this method, due to limits in computer and electronics, poor control of ion motion and the lack of processing algorithms for the huge data generated. Since 2010, our laboratory have revisited FT-ICR 2D in the frame of a consortium including NMR and Informatics teams. We demonstrated that resolution is preserved using gas-free fragmentation mode such as IRMPD and ECD. Nevertheless, the resolution of our first spectra was still low (parents 100, fragments 1000). Since this work, we reached high resolution on parents and full ICR resolution on fragments by using non uniform sampling and optimization of the pulse sequence. We recorded 2D spectra of Substance P ionized by nanoESI and fragmented by ECD at 2k×128k points (parents/fragments) using NUS factors (skipped divided by acquired points) of 2, 4, 6, 8, 16 in 30 min each. By increasing the NUS factor from 2 to 16, the parent resolution increase from 100 to 10000, conserving the classical 2D spectrum aspect. In this presentation ongoing improvements will be presented: (i) 2D spectrum simulator to investigate the effect of time, amplitude and phase of pulses on the phase and orbit radius of precursors and fragments by using Lorentz equations; (ii) new algorithms for deconvoluting NUS acquisition. Examples of 2D FT-ICR spectra of complex mixture will be presented including square acquisition at 256k×256k (around resolution 10,000 at  $m/z$  400).

### O3 - Evidence of Lasso and Branched-cyclic Structures using Ion Mobility – Mass Spectrometry

Kevin Jeanne Dit Fouque,<sup>†</sup> H  l  ne Lavanant,<sup>†</sup> S  verine Zirah,<sup>‡</sup> Julian D. Hegemann,<sup>§</sup> Marcel Zimmermann,<sup>§</sup> Mohamed A. Marahiel,<sup>§</sup> Sylvie Rebuffat,<sup>‡</sup> Carlos Afonso<sup>†</sup>

<sup>†</sup> Normandie Univ, COBRA, UMR 6014 et FR 3038; Universit   de Rouen; INSA Rouen; CNRS, IRCOF, 1 Rue Tesni  re, 76821 Mont-Saint-Aignan Cedex, France.

<sup>‡</sup> Mus  um National d'Histoire Naturelle, Sorbonne Universit  s, Laboratoire Mol  cules de Communication et Adaptation des Microorganismes, UMR 7245 CNRS-MNHN, CP 54, 57 rue Cuvier, 75005 Paris, France.

<sup>§</sup> Department of Chemistry, Biochemistry; LOEWE Center for Synthetic Microbiology, Philipps-University Marburg, Hans-Meerwein-Strasse 4, 35032, Marburg, Germany.

Lasso peptides constitute a structurally unique class of bioactive peptides characterized by a mechanically interlocked structure, where the C-terminal tail of the peptide is threaded and trapped within an N-terminal macrolactam ring. Their compact and stable structure has a significant impact on their biological and physical properties that make them highly interesting for drug development. Ion mobility - mass spectrometry (IM-MS) has proved particularly effective to discriminate the lasso structure from their corresponding branched-cyclic topoisomers, in which the C-terminal tail is unthreaded. In fact, previous comparison of the IM-MS data of the two topologies has yielded three trends that allow differentiation of the lasso form from the branched-cyclic structure.<sup>1</sup> These three trends are (1) the low change in collision cross sections (CCS) with increasing the charge state, (2) the low intensity of highly charged ions and (3) the narrow ion mobility peak width. A three-dimensional graph was plotted using three indicators, CCS extent, mean charge, and mean ion mobility peak width designed to follow the three trends previously evidenced in order to investigate the range covered for each indicator by lasso and branched-cyclic structures. This study was extended to eight standard peptides among which two macrocyclic and one disulfide constrained peptides in order to test how the value of each indicator might be used to attribute the presence of a constrained conformation. This strategy was also applied to variant peptides of MccJ25 obtained by site-directed mutagenesis. The effect of each mutation on the lasso topology was assessed. It was confirmed that the lasso structure of MccJ25 is tolerant to deletions of the loop region above the ring and insertions of the C-terminal tail below the ring. However, the size of the macrolactame ring and the C-terminal residues (Y20 and G21) are critical to maintaining the lasso structure.<sup>2</sup>

<sup>1</sup> Jeanne Dit Fouque, K.; Afonso, C.; Zirah, S.; Hegemann, J. D.; Zimmermann, M.; Marahiel, M. A.; Rebuffat, S.; Lavanant, H. *Anal Chem* **2015**, *87*, 1166-1172.

<sup>2</sup> Ducasse, R.; Yan, K. P.; Goulard, C.; Blond, A.; Li, Y.; Lescop, E.; Guittet, E.; Rebuffat, S.; Zirah, S. *Chembiochem: a European journal of chemical biology* **2012**, *13*, 371-380.

## **O4 - A Quantitative Determination Method for the Analysis of Quaternary Ammonium Compounds Residues in Bovine Milk by HPLC-MS/MS**

Kahina Slimani, Aurélie Féret, Yvette Pirotais, Jean-Pierre Abjean, Pierre Maris, Dominique Hurtaud-Pessel

*Agence nationale de sécurité sanitaire de l'alimentation, de l'environnement et du travail (ANSES), Laboratoire de Fougères, France*

Quaternary Ammonium Compounds (QACs) are both cationic surfactants and biocide substances. These are widely used in industrial and commercial formulations, including disinfectants, detergents, pharmaceuticals and cosmetics. Benzalkonium (BACs) and dialkyldimethylammonium chlorides (DDACs) are predominant in the disinfecting formulations used in the food industry. The application of QACs during the cleaning-disinfection surfaces process throughout dairy production chain, may lead to residues of these substances in milk products. To date, no specific maximum residue levels (MRL) exist, thus the default MRL for QACs has been set at 100 µg/kg by European Commission. A validated method will be presented for the quantitative determination of nine quaternary ammonium residues in milk by High Performance Liquid Chromatography coupled with tandem mass spectrometry (HPLC-MS/MS). BACs and DDACs were extracted using liquid-liquid extraction procedure where acetonitrile and ethyl acetate were used as the extraction solvents. After evaporation of the organic phase, the residue was filled up to 400µL with methanol and the analysis was performed employing a Thermo Surveyor HPLC instrument with TSQ Quantum triple quadrupole detector operating in positive ESI mode. In order to improve the quantification by mass spectrometry, five deuterated internal standard were used. Given that no European standard exists for biocides, the method has been validated according to the European Commission Decision 657/2002/CE used for veterinary drugs residues and the NF V03-110 standard for agricultural and food products in order to conclude on method performances and acceptability for the control. Parameters such as limit of detection (LOD), limit of quantification (LOQ), linearity, recovery, repeatability and within-laboratory reproducibility, were evaluated by e.noval® 3.0 software. Results obtained will be presented and discussed. In conclusion, we have an accurate and reliable method for determination of QACs which permits to control foodstuffs from dairy industries.

## **O5 - Targeted analysis in PRM mode towards clinical application : Optimization of experimental setup and data processing for accurate amyloid diagnosis**

Sophie Liuu<sup>1</sup>, Emmanuelle Demey-Thomas<sup>1</sup>, Emie Durighello<sup>1</sup>, Gilles  
Gateau<sup>2</sup>, Joëlle Vinh<sup>1A</sup>

*1 Spectrométrie de Masse Biologique et Protéomique, ESPCI-ParisTech, PSL Research  
University, CNRS USR 3149, Paris.*

*2 Service de médecine interne, Hôpital Tenon, UPMC, INSERM U933, Paris, France.*

Contact : [sophie.liuu@jouy.inra.fr](mailto:sophie.liuu@jouy.inra.fr)

Amyloidosis is a disease whose prevalence is rare and which suffers from a lack of accurate diagnosis tools. This disease results from a wrong folding of specific amyloidogenic proteins and their identification is essential for proper medical care. Today most patients' cases are identified thanks to immunohistochemistry analysis after surgery or biopsy on the defective tissues. However they can be inconclusive on certain cases, leading to a lack of information about the underlying ethiology.

Recent reports have shown that subtyping could be feasible combining laser capture microdissection (LCM) and mass spectrometry [1]. We showed that ultrasonic treatment could help for the completion of enzymatic proteolysis, in 90s instead of 15h incubation, of either fixed or raw biopsy samples even without LCM and to get closer to the clinical routine application for amyloidosis subtyping.

In discovery phase, abundance species were evaluated according to the Top 3 Protein Quantification [4] and data were manually classified. Protein quantification has also been assessed with MaxQuant labelfree software and classified with the statistical Perseus Tool [5].

In order to implement our approach in the French clinical departments, a targeted proteomics method has been evaluated. Parallel reaction monitoring (PRM) based on high resolution and accurate mass (HR/AM) measurement in MS/MS mode was performed with a hybrid quadrupole-Orbitrap mass spectrometer. Up to 29 amyloidogenic proteins with a maximum of 8 peptides per proteins have been targeted. We aim at developing a specific protocol that allows to blindly discriminate healthy and pathological biopsies first and to classify the pathological samples in a second class.

[1] S. Sethi, et al. *Clin. J. Am. Soc. Nephrol.*, 2010; 5(12): 2180-7.

[2] L. Fernandez, et al *JOMICS*, 2011, 1(1): 144-150.

[3] S.Liuu et al. *Proceedings of the XIIIth International Symposium on Amyloidosis*, 2012 May 6-10; Groningen, The Netherlands, GUARD, 201p.

[4] J.C. Silva, et al. *MCP*. 2006;5(1):144-150.

[5] J. Cox and M. Mann, 2008, *Nat Biotechnol* 26, 1367-72.

## O6 - Caractérisation du métabolome secondaire de *Penicillium* par marquage isotopique et spectrométrie de masse haute résolution

Thaïs Hautbergue<sup>1,2</sup>, Olivier Puel<sup>1</sup>, Lauriane Meneghetti<sup>1,2</sup>, Souria Tadriss<sup>1</sup>, Pascal Bourdaudhui<sup>1</sup>, Laurent Debrauwer<sup>1,2</sup>, Isabelle P. Oswald<sup>1</sup>, Emilien L. Jamin<sup>1,2</sup>

<sup>1</sup> INRA, UMR 1331 Toxalim, Université de Toulouse, INP, Toulouse, France

<sup>2</sup> INRA, Plateforme MetaboHUB-MetaToul-AXIOM, Toulouse, France

Les moisissures sont des champignons filamenteux capables de produire de nombreux métabolites secondaires. Ces molécules peuvent présenter des propriétés bénéfiques pour l'Homme et sont couramment utilisées en industrie pharmaceutique (pénicilline, cyclosporine...), alimentaire ou cosmétique. Au contraire, certains de ces métabolites sont appelés « mycotoxines » en raison de leurs propriétés pathogènes. La caractérisation du métabolome des moisissures présente donc des intérêts économiques et sanitaires majeurs. Dans ce contexte, une méthode permettant de caractériser l'ensemble du métabolome secondaire de moisissures en croissance sur substrat marqué avec des isotopes stables a été précédemment développée (Cano P. *et al.* Anal. Chem. (2013) 85 8412), et appliquée à la caractérisation du métabolome secondaire de *Penicillium nordicum* et *Penicillium verrucosum*.

Le substrat représentant l'unique source de carbone et d'azote des moisissures, *Penicillium verrucosum* (NCPT387) et *Penicillium nordicum* (NCPT388) ont été mis en culture sur des grains de blé (*Triticumaestivum*) différemment marqués: (i) grains naturels, (ii) grains marqués à 97% de <sup>13</sup>C, et (iii) grains marqués à 53% <sup>13</sup>C et 97% de <sup>15</sup>N. Les extraits de chacune des trois cultures ont été analysés par HPLC couplée à un spectromètre de masse haute résolution LTQ-Orbitrap XL, équipé d'une ionisation par Electrospray opérant en mode positif ou négatif. Puis les métabolites secondaires ont été spécifiquement détectés grâce à la reconnaissance de massifs isotopiques particuliers pour chacun des enrichissements. La comparaison des rapports *m/z* entre les différents marquages a ensuite permis la détermination du nombre d'atomes de carbone et d'azote présents dans la molécule. L'unique formule brute a ainsi été caractérisée pour chacun des métabolites détectés. La consultation d'une base de données spécifique (Antibase) a permis de suggérer la production de métabolites secondaires connus. La validation de ces derniers a nécessité une analyse MS/MS et une comparaison avec leur standard. Concernant les métabolites secondaires inconnus, certains d'entre eux ont pu être annotés grâce à l'utilisation de réseaux moléculaires de similarités MS/MS (Watrous J. *et al.*; PNAS (2012) 109 E1743).

L'étude de *Penicillium verrucosum* et *Penicillium nordicum* a permis de détecter 176 métabolites secondaires. 16 d'entre eux sont suspectés comme étant connus d'après la base de données utilisée. Parmi ces métabolites, deux ont été confirmés par comparaison avec leurs standards (ochratoxine A et citrinine). Dans l'objectif d'identifier de nouveaux métabolites secondaires, des modélisations de réseaux moléculaires ont été utilisés. Ces réseaux permettent de mettre en évidence des spectres MS/MS similaires, donc des structures éventuellement similaires. Si parmi ces structures similaires certaines sont connues, il nous est alors possible d'identifier de nouveaux composés présentant des structures proches. Ainsi, un groupe de 17 métabolites inconnus se fragmentant de façon similaire a été détecté. La détermination des structures de ces composés sera réalisée après analyses structurales approfondies (MS<sup>n</sup>, RMN...).

## **O7 - Study of Gel Permeation Chromatography High Resolution Inductively Coupled Plasma Mass Spectrometry parameters in petroleum product analysis**

Sara GUTIERREZ SAMA<sup>ac</sup>, Alain DESPREZ<sup>abc</sup>, Gabriel KRIER<sup>b</sup>, Charles-Philippe LIENEMANN<sup>d</sup>, Jérémie BARBIER<sup>d</sup>, Ryszard LOBINSKI<sup>a</sup>, Caroline MANGOTE<sup>c</sup>, Pierre GIUSTI<sup>c</sup>, Brice BOUYSSIERE<sup>a</sup>

<sup>a</sup> CNRS/UPPA, UMR 5254, LCABIE, Hélioparc, 2 Av. Pr. Angot, 64053 Pau, France

<sup>b</sup> UL, LCP-A2MC, 1 Bd. Arago, Technopôle Metz 2000, 57070 Metz, France

<sup>c</sup> TOTAL Raffinage Chimie, TRTG, BP 27, 76700 Harfleur, France

<sup>d</sup> IFPEN, Rond Point de l'échangeur, 69360 Solaize, France

Crude oil (CO) is a complex hydrocarbon mixture containing a low percentage of S, N and O compounds and trace amounts of heavy metals (mainly V and Ni) and other elements. A CO can be separated by distillation, according to the boiling points, in different fractions. Heavy fractions of crude oil (with high boiling point), such as Vacuum Residues (VR), have to be transformed by catalytic cracking processes into light products for being used as energy sources, but they are contaminated with metals (mainly V and Ni) or heteroelements such as sulfur. These elements can cause the deactivation of refining catalysts, corrosion of the equipment and environmental pollution, and must therefore be extracted by demetallation and desulphurization. Characterization of heavy oils by metal and non-metal speciation in petroleum samples is important to improve the efficiency of such processes. Gel Permeation Chromatography (GPC) gives us information on the hydrodynamic volume of the molecule or aggregate.

Hyphenation between GPC and multi elemental analysis by High Resolution Inductively Coupled Plasma Mass Spectrometry (HR ICP MS) of S, V and Ni-containing compounds was done to one CO and a VR. Different sets of columns, eluents (tetrahydrofuran (THF) and stabilized THF) and solvent flow rates were tested in order to determine which parameter has the most important impact on size distribution.

In previous studies, different types of aggregates of different size were observed, which aggregated overtime mainly during the first month after the preparation of the solutions, so samples were prepared freshly every day to compare the results between different conditions of elution.

The conclusion of this study is that the solvent flow rate and the columns used seem to have an influence on the size distribution of V, Ni and S compounds, whereas the presence of the stabilizer in THF does not seem to have an important role. Therefore, the optimization of these parameters is needed to work at the lowest shear rate possible, what would allow the study of the native aggregation of the compounds in the sample.

## O8 - Cinétique et analyse protéomique différentielle associée à l'infection par *Dickeya dadantii* d'un modèle végétal : de la phase de découverte au transfert d'une méthode MRM ciblée

Blandine Rougemont<sup>1</sup>, Jean-Marie Lacroix<sup>2</sup>, Jérôme Lemoine<sup>1</sup>

<sup>1</sup> UMR 5280 CNRS, Université de Lyon, Institut des Sciences Analytiques, Villeurbanne, France

<sup>2</sup> UMR 8576 CNRS, Université des Sciences et Technologies de Lille, Unité de Glycobiologie Structurale et Fonctionnelle, Villeneuve d'Ascq, France

*Dickeya dadantii*, ou *Erwinia chrysantemi*, est un phytopathogène impliqué dans la pourriture de différentes plantes d'intérêt agronomique telles que la pomme de terre ou l'endive. L'infection par *Dickeya dadantii* passe tout d'abord par une colonisation de la surface de la plante suivie d'une expression de mécanismes de résistance aux systèmes de défense de la plante (stress oxydatif, peptides antimicrobiens) et enfin par une synthèse d'enzymes de dégradation (pectinases, cellulases). Cette virulence a été caractérisée par des approches génomiques et transcriptomiques<sup>1-3</sup>. Celles-ci ont mis en évidence, entre autre, une régulation par des systèmes à deux composants, des gènes impliqués dans la mobilité et les glucanes périplasmiques osmorégulés. Cependant, peu d'études protéomiques ont été menées permettant de connaître les niveaux d'expression des protéines impliquées dans ces mécanismes<sup>4</sup>. Dans ce contexte, nous avons réalisé une analyse protéomique quantitative sans marquage afin d'étudier l'expression différentielle des protéines entre culture en milieu liquide et croissance sur feuille d'endive à respectivement 24H, 48H et 72H après inoculation.

Des analyses protéomiques non ciblées ont d'abord été conduites sur la bactérie cultivée en milieu liquide et sur la plante au temps 48H par le biais d'un couplage entre un QExactive Orbitrap opérant en mode DDA et deux colonnes Aeris Peptide (2.1x150mm, 3.6µm) montées en série. A partir d'un gradient chromatographique de 120 minutes, nous avons pu identifier 475 protéines (retenues avec au moins 2 peptides, ProteinProspector, FDR = 1%). L'analyse statistique (MSStats-Skyline) a mis en évidence 142 protéines ayant une régulation significative de leur expression (log<sub>2</sub> Fold Change +/- supérieur à 2 entre l'échantillon exposé 48H et le témoin).

Afin de disposer d'une méthode de dosage plus aisément transposable entre laboratoires et modèles biologiques, nous avons ensuite développé une méthode MRM ciblant 142 protéines régulées ainsi que 303 protéines non régulées (soit 782 peptides ou 2838 transitions). Cette méthode a été appliquée à tous les points de la cinétique. Le protocole a été reproduit 3 fois pour chaque condition, CV médian = 7%. Ainsi, 98% des protéines recherchées ont pu être confirmées et 82% ont été quantifiées (CV <20%).

(1) Bontemps-Gallo, S.; Madec, E.; Lacroix, J.-M. *Environ. Microbiol.* **2015**, *17* (11), 4415–4428.

(2) Bontemps-Gallo, S.; Madec, E.; Dondeyne, J.; Delrue, B.; Robbe-Masselot, C.; Vidal, O.; Prouvost, A.-F.; Boussemart, G.; Bohin, J.-P.; Lacroix, J.-M. *Environ. Microbiol.* **2013**, *15* (3), 881–894.

(3) Bontemps-Gallo, S.; Madec, E.; Lacroix, J.-M. *Microbiology* **2014**, *160* (Pt 4), 766–777.

(4) Bouchart, F.; Delangle, A.; Lemoine, J.; Bohin, J.-P.; Lacroix, J.-M. *Microbiology* **2007**, *153* (Pt 3), 760–767.

## **O9 - SPIDERMASS: A Novel Mass Spectrometry Based Instrument for in vivo Real-Time Analysis with Low Invasiveness for Guided Surgery**

Philippe Saudemont, Benoit Fatou, Maxence Wisztorski, Cristian Focsa, Michel Salzet, Michael Ziskind, Isabelle Fournier

*Univ. Lille, INSERM, U1192 - Laboratoire Protéomique, Réponse Inflammatoire et Spectrométrie de Masse-PRISM, F-59000 Lille, France*

The early diagnosis of a solid cancer is critical for the surgeons to improve the patient's healthcare. Since two decades, Mass Spectrometry (MS) technology has shown the ability to generate molecular signatures from ex vivo cancer biopsies with different histological classes for clinical studies. However, there is a crucial need to use MS as closely as possible to the operating rooms to get a fast diagnosis or to visualize in real-time the margins between both benign and cancer areas. To date, the iKnife, developed by Z. Takats, is the only instrument giving an histological indication using MS inside a surgical room. It is based on the aspiration of smokes generated by an electrical scalpel while cutting tissues.

There is a clear unmet need for an instrument working in a less destructive manner. The one we develop, called SPIDERMASS, is based on tissue sampling by surface laser ablation using a nanosecond pulsed IR-laser tuned at 2,94  $\mu\text{m}$ . To perform real-time analysis, the ablated material is transferred to the mass spectrometer through a tubing connected to a pump. Various optimisations have been realised on bovine liver tissues and human skin that demonstrate the real-time conditions and the application for in vivo uses.

To evaluate the SpiderMass's clinical potential, we are currently working on ovarian biopsies and have established a first classification model able to distinguish benign from tumoral tissues giving 96% of good classification using the Support Vector Machine (SVM) algorithm.

The preliminary data demonstrate the potential of the future instrument we are developing for in vivo real-time MS analysis. SPIDERMASS is a new invasiveness and painless technology that can find various applications such as clinical surgery, dermatology or cosmetology.



# O10 - Tandem Mass Spectrometry Analysis of a Mixture of Linear and Cyclic Peptides Isomers using the Survival Yield Technique

Dany Jeanne Dit Fouque<sup>1</sup>, Alicia Maroto<sup>1</sup>, Rémy Lartia<sup>2</sup>, Philippe Giamarchi<sup>1</sup>, Antony Memboeuf<sup>1</sup>

<sup>1</sup> Université de Brest, UMR-CNRS 6521, 6 avenue le Gorgeu, 29200 Brest, FRANCE.

<sup>2</sup> Université de Grenoble Alpes, UMR CNRS 5250, ICMG FR-2607, 38000 Grenoble, FRANCE.

Cyclic peptides and related structures have an increasing contribution in drug discovery and treatment of several diseases<sup>[1]</sup>. They also have greater potential as therapeutic agents than linear peptides. The copper catalyzed Huisgen cycloaddition, referred as a “click chemistry reaction”, is a powerful tool for peptide cyclization<sup>[2]</sup> due to the formation of a triazole scaffold that increases its stability. Although the Huisgen cycloaddition is very efficient, trace amounts of linear peptides can still be present thus affecting the performance of the synthesized compounds. It is therefore important to evaluate the degree of remaining linear precursors in such a procedure.

Traditional characterization techniques (<sup>1</sup>H NMR), high performance liquid chromatography and MALDI are not sensitive enough to detect small amounts of linear peptides. Ion-mobility can be used to discriminate between cyclic and linear peptides<sup>[3]</sup>. In this study, we propose an alternative method for quantifying isomeric mixtures of linear and cyclic peptides by using a tandem mass spectrometric approach and the Survival Yield (SY) technique<sup>[4],[5],[6]</sup>.

MS/MS spectra of the isomeric peptides were performed on a quadrupole ion trap (HCT, Bruker). The Survival Yield curves showed that cyclic peptides fragment at significantly higher voltage amplitudes than linear peptides. For mixtures of linear and cyclic peptide isomers, a plateau appears on the SY curve instead of the continuous decrease obtained for the pure compounds. We observed the position of the plateau obtained on the SY depends linearly on the linear/cyclic peptides ratio in solution. The standard addition method was then used to detect small traces of linear peptides and to quantify the yield of cyclization. The performance parameters of the method are under study.

[1] F. Tahoori, S. Balalaie, R. SheikhnejadM. SadjadiP. Boloori. Design and synthesis of anti-cancer cyclopeptides containing triazole skeleton. *Amino Acids*. **2014**, 46, 1033-1046.

[2] S. Punna, J. Kuzelka, Q. Wang and M.G. Finn, Head-to-Tail Peptide Cyclodimerization by Copper-Catalyzed Azide–Alkyne Cycloaddition *Angewandte. Chem., Int. Ed.*, **2005**, 44, 2215

[3] J. N. Hoskins, S. Trimpin and S. M. Grayson, *Macromolecules*, **2011**, 44, 6915.

[4] T. Josse, J. De Winter, P. Dubois, O. Coulembier, P. Gerbaux and A Memboeuf. A tandem mass spectrometry-based method to assess the architectural purity of synthetic polymers: a case of a cyclic polylactide obtained by click chemistry. *Polym. Chem.*, **2015**, 6, 64

[5] A. Memboeuf, L. Jullien, R. Lartia, B. Brasme and Y. Gimbert, Tandem Mass Spectrometric Analysis of a Mixture of Isobars Using the Survival Yield Technique. *JASMS*, **2011**, 22, 1744-1752.

[6] A. Memboeuf, A. Nasioudis, S. Indelicato, F. Pollreis, A. Kuki, S. Kéki, O. van den Brink, K. Vékey, and L. Drahos. Size Effect on Fragmentation in Tandem Mass Spectrometry. *Anal. Chem.* **2010**, 82, 2294–2302

## **O11 - Proteomic analysis of human endosulfatases HSulfs, key enzymes in the modulation of the sulfation pattern of heparan sulfate**

Ilham SEFFOUH ([ilham.seffouh@gmail.com](mailto:ilham.seffouh@gmail.com))

Supervisors: Regis Daniel, Florence Gonnet and Cédric Przybylski

*Laboratoire Analyse et Modélisation pour la Biologie et l'Environnement, Université d'Evry Val d'Essonne, CNRS UMR 8587, Evry, France*

The human endosulfatases HSulf-1 and HSulf-2 are two extracellular 6-O-endosulfatase enzymes recently discovered. They remove 6-O sulfate group from glucosamine residue in heparan sulfate (HS), a glycosaminoglycan located on cell surface. It is assumed that HS sulfation pattern may host an informational content governing the recognition and the interaction of HS with various ligands. By varying the HS sulfation pattern, HSulf-1 and HSulf-2 have a strong impact on HS-ligand interactions, and consequently they are involved in many physiological and pathological processes.

To date, the structural organization of HSulfs remains elusive. Some pieces of information revealed that both HSulf isoforms have a common molecular organization consisting of two chains presumably linked by disulfide bonds, and their maturation into active form requires a cleavage by furin. The objectives of this work are to achieve the fine structural characterization of HSulfs and elucidate their properties of interaction using top-down and bottom-up mass spectrometry (MS) approaches. Particular attention will be paid to the determination of post-translational modifications (disulfide bond, glycosylation) using differential chemical labeling and electron transfer dissociation (ETD) MS. Moreover, the enzymes will be also studied by hydroxyl radical footprinting combined with MS analysis.

All the data obtained will help to determine the structural organization of HSulfs, and to establish the molecular basis of HSulfs / HS interaction.

## O12 - iASAP: a new fast and easy way to characterize air sensitive compounds by mass spectrometry using atmospheric solid analysis probe

Mathilde Farenc,<sup>a,b</sup> Carlos Afonso,<sup>a</sup> Pierre Giusti<sup>b</sup>

a) *Université de Normandie, Mont Saint Aignan*

b) *TOTAL Raffinage Chimie, Gonfreville l'Orcher*

Metallocenes were discovered in 1951 and are mostly used as highly active Ziegler-Natta catalyst. The chemical industry uses these catalysts for olefin polymerization.<sup>1</sup> Characterization by mass spectrometry<sup>2</sup> with atmospheric pressure ion sources is difficult due to their high sensitivity to moisture and oxygen. To that end, the principal challenge is to transfer the catalyst from the inert atmosphere to the ion source of the instrument. An innovative method was developed allowing the direct introduction of the sample with a glass capillary filled with the analyte solution or powder and closed by a paraffin plug in a glove box. By this way it is possible to transport the compound from the inert atmosphere of the glove box to the ion source of the mass spectrometer. The capillary is attached to the ASAP probe which is introduced in the source. A hot nitrogen flow yields to the melting of the paraffin, releasing the sample that is ionized by the nitrogen plasma. This method was used successfully to analyze metallocenes. The low ionization efficiency of the paraffin molecules allows to obtain simple mass spectra. Furthermore, the results obtained with atmospheric pressure photoionization (APPI) and atmospheric pressure chemical ionization (APCI) were compared. The coupling of ion mobility spectrometry with mass spectrometry yielded a second dimension of separation allowing to obtain new insight in the gas phase conformation of these species.

1. Kaminsky, W.; Funck, A.; Hahsen, H., *New application for metallocene catalysts in olefin polymerization. Dalton Trans.* **2009**, (41), 8803-8810.
2. Dorcier, A.; Dyson, P. J.; McIndoe, J. S., *Analysis of coordination and organometallic compounds using photoionisation mass spectrometric techniques. Eur. J. Inorg. Chem.* **2003**, (24), 4294-4297.

## O13 - Biophysical characterization of RNA-metabolite complexes by native MS

Stefano Piccolo<sup>1,2,3</sup> et Valérie Gabelica<sup>1,2,3</sup>

<sup>1</sup> Univ. Bordeaux, IECB, ARNA Laboratory, F-33600 Pessac, France.

<sup>2</sup> Inserm, U1212, ARNA Laboratory, F-33000 Bordeaux, France.

<sup>3</sup> CNRS, UMR 5320, ARNA Laboratory, F-33000 Pessac, France.

Aptamers are oligonucleotide or peptide molecules that bind to a specific target molecule, ranging from small ions to large biomolecules. They are usually selected from a large random sequence pool (by SELEX methods), but natural oligonucleotide aptamers also exist in riboswitches where they play a crucial role for gene expression regulation. Their high specificity and variable affinity (from mM to nM) is related to their three-dimensional structure and how it changes upon binding. In vitro aptamers are normally smaller than natural ones (from 20 to 90 nt)<sup>1</sup>, this makes them credible models to understand natural aptamers, yet more manageable samples in MS. With *native* electrospray ionization mass spectrometry we are able to gently ionize and preserve these non-covalent complexes *in vacuo*<sup>2</sup>. As a label-free technique, it can provide aptamer-ligand stoichiometry and  $K_D$ s of binding in vitro. Furthermore, ESI-MS coupled to ion mobility spectrometry (IMS) gives access to binding and shape information at the same time.

Our starting point is the study of some well characterized couples aptamer-ligand as Neomicine<sup>3</sup>, Tobramycin<sup>4,5</sup>, FMN<sup>6,7</sup> and AMP/ATP<sup>8,9</sup> aptamers. It will facilitate the initial fundamental study of these couples by *native* MS and ion mobility (stability in gas phase, ESI response upon structural changing). Oligonucleotides are purchased from IDT and are diluted in an ammonium acetate solution (NH<sub>4</sub>OAc 100 mM), easily tolerated by the spectrometer<sup>10</sup>. Before use, the stock solutions are prepared in NH<sub>4</sub>OAc or TMAA without heating, or heated at 95°C then immediately cooled on ice to allow proper folding of the RNA hairpins. An Agilent 6560 ESI-IMS-Q-TOF mass spectrometer in negative mode is used to assess all the experiments. We have tested two type of buffers (TMAA and NH<sub>4</sub>OAc), looking for the best conditions (adducts distribution, signal enhancement), and are currently investigating the stoichiometry of these complexes and calculated their  $K_D$ s. The presentation will explain in what respects the native MS results are in line with or different from the published data.

This work is funded by the EU H2020 (Marie Curie ITN "MetaRNA")

(1) Mayer, G. *Angewandte Chemie International Edition* **2009**, 48, 2672.

(2) Abi-Ghanem, J.; Gabelica, V. *Physical chemistry chemical physics : PCCP* **2014**, 16, 21204.

(3) Jiang, L.; Majumdar, A.; Hu, W.; Jaishree, T. J.; Xu, W.; Patel, D. J. *Structure* **1999**, 7, 817.

(4) Jiang, L.; Patel, D. J. *Nat Struct Biol* **1998**, 5, 769.

(5) Jiang, L.; Suri, A. K.; Fiala, R.; Patel, D. J. *Chemistry & Biology* **1997**, 4, 35.

(6) Fan, P.; Suri, A. K.; Fiala, R.; Live, D.; Patel, D. J. *Journal of molecular biology* **1996**, 258, 480.

(7) Keller, K. M.; Breeden, M. M.; Zhang, J.; Ellington, A. D.; Brodbelt, J. S. *Journal of mass spectrometry : JMS* **2005**, 40, 1327.

(8) Jiang, F.; Kumar, R. A.; Jones, R. A.; Patel, D. J. *Nature* **1996**, 382, 183.

(9) Dieckmann, T.; Suzuki, E.; Nakamura, G. K.; Feigon, J. *Rna* **1996**, 2, 628.

(10) Rosu, F.; De Pauw, E.; Gabelica, V. *Biochimie* **2008**, 90, 1074.

## O14 - High resolution imaging of maize stem with time-of-flight secondary ion mass spectrometry

Tingting Fu,<sup>a,b</sup> Quentin Vanbellingen,<sup>a</sup> David Touboul,<sup>a</sup> Serge Della-Negra,<sup>b</sup> and Alain Brunelle<sup>a</sup>

<sup>a</sup>*Institut de Chimie des Substances Naturelles, CNRS-ICSN UPR2301, Université Paris-Sud, Avenue de la Terrasse, 91198, Gif-sur-Yvette, France*

<sup>b</sup>*Institut de Physique Nucléaire, UMR8608, IN2P3-CNRS, Université Paris-Sud, 91406, Orsay, France*

In the study of converting cellulosic plants into biofuel and biomaterials, much attention has been paid to maize stalk for its vast biomass production and great potential in bioethanol and cellulose fiber generation [1-5]. However, high lignification of cell walls in maize stem has significantly prevented the accessibility of enzymes, microorganisms or chemicals to cell wall polysaccharides, thus leading to a low efficiency in these conversions [6]. Our objective is to analyze lignin distribution and evaluate the lignification in maize stems from different genotypes by TOF-SIMS imaging, which will facilitate the selection for biofuel and biomaterial production as well as to provide clues in building new genotypes to obtain desired lignin distribution pattern or to downregulate general lignin production.

Preliminary imaging experiments were performed with a commercial TOF-SIMS IV mass spectrometer (ION-TOF GmbH, Münster, Germany) with bismuth cluster ions ( $\text{Bi}_3^+$ , 25 keV) as the primary ion beam. The so-called burst alignment ion beam focusing mode was utilized to obtain a high spatial resolution, followed by applying a delayed extraction of secondary ions to retain the high mass resolution routinely generated in high current bunched ion beam focusing mode [7]. To neutralize the charges accumulated on the insulating surface, a low energy pulsed electron flood gun was applied during all the acquisitions. Small areas of  $400 \mu\text{m} \times 400 \mu\text{m}$  corresponding to vascular bundle and ground tissue of maize stem section were mapped respectively.

With above instrumental settings, the distribution of different lignin types on maize stem section was mapped with high mass and spatial resolution. The ion images of G- and S-type lignin unambiguously show that different cell types in the tissues have different S/G ratios, namely different extent of lignification. In addition, the localization of inorganic metal ions ( $\text{Na}^+$ ,  $\text{K}^+$ , and  $\text{Ca}^+$ ) might help to reveal the related growing mechanism in maize.

[1] Ragauskas, A. J., et al. *Science* **2006**, 311, 484-489.

[2] Torney, F., et al. *Current Opinion in Biotechnology* **2007**, 18, 193-199.

[3] Daud, Z., et al. *Australian Journal of Basic and Applied Sciences* **2013**, 7, 401-405.

[4] Abolfazl, K., et al. *Bioresources* **2011**, 6, 1147-1157.

[5] Daud, Z., et al. *Bioresources* **2014**, 9, 872-880.

[6] Anderson, W. F., et al. *Journal of Industrial Microbiology and Biotechnology* **2008**, 35, 355-366.

[7] Vanbellingen, Q. P., et al. *Rapid Communications in Mass Spectrometry* **2015**, 29, 1187-1195.

## O15 - Spectrométrie de mobilité ionique et spectrométrie de masse pour la caractérisation d'assemblages hybrides de polyoxométallates

Hupin S<sup>1</sup>, Piot M<sup>2</sup>, Lavanant H<sup>1</sup>, Izzet G<sup>2</sup>, Afonso C<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Normandie Université, COBRA, UMR6014 and FR3038; Université de Rouen, INSA de Rouen; CNRS, IRCOF, 1 rue Tesnière, 76821 Mont-Saint-Aignan Cedex (France).

<sup>2</sup>Institut Parisien de Chimie Moléculaire UMR CNRS 8232, Sorbonne Universités, UPMC-Paris 6, 4 Place Jussieu, 75005 Paris (France).

Les polyoxométallates (POM) sont des molécules ioniques, constitués de plusieurs oxoanions de métaux de transition  $A_xO_y^{z-}$  reliés entre eux par leurs atomes d'oxygène. Les atomes métalliques sont généralement des métaux de transition du groupe 5 ou du groupe 6 dans des états d'oxydation élevés, tel que le vanadium (V), le molybdène (Mo) ou le tungstène (W).

Les POMs ont longtemps été reconnus comme des molécules très intéressantes en médecine en tant que potentiels médicaments avec des activités antivirales, antibactériennes et anti-tumorales<sup>1</sup>. L'élaboration de nouveaux POMs hybrides organiques-inorganiques avec des molécules organiques est donc particulièrement attrayante, mais leur caractérisation reste un défi.

La spectrométrie de masse avec ionisation *electrospray* (ESI-MS) est déjà reconnue comme une technique puissante et essentielle pour l'analyse des dérivés de POMs<sup>2</sup>. Par ailleurs, la mobilité ionique couplée à la spectrométrie de masse (IMMS) est en train de devenir une méthode très attrayante pour la caractérisation de ces nanostructures, offrant une nouvelle dimension de séparation<sup>3,4</sup>. L'IMMS permet de déterminer des valeurs de sections efficaces de collision (CCS) et d'obtenir ainsi des informations sur la conformation des ions en phase gazeuse.

Dans ce contexte, nous avons analysé par ESI-MS et ESI-IMMS des POMs et des POMs hybrides organiques-inorganiques fournies par l'équipe E-POM du laboratoire IPCM, de l'université Paris 6. La faible disponibilité de composés étalons ayant des CCS connues en mode d'ionisation négatif, nous a conduit à proposer plusieurs POM standards comme calibrants potentiels pour la mesure de POMs hybrides organiques-inorganiques par mobilité ionique TWIM (Traveling Wave Ion Mobility).

1. Katsoulis, D. E. A survey of applications of polyoxometalates. *Chem. Rev.* 98, 359–388 (1998).

2. Miras, H. N., Wilson, E. F. & Cronin, L. Unravelling the complexities of inorganic and supramolecular self-assembly in solution with electrospray and cryospray mass spectrometry. *Chem. Commun.* 1297 (2009). doi:10.1039/b819534j

3. Robbins, P. J., Surman, A. J., Thiel, J., Long, D.-L. & Cronin, L. Use of ion-mobility mass spectrometry (IMS-MS) to map polyoxometalate Keplerate clusters and their supramolecular assemblies. *Chem. Commun.* 49, 1909 (2013).

4. Xuan, W., Surman, A. J., Miras, H. N., Long, D.-L. & Cronin, L. Controlling the Ring Curvature, Solution Assembly, and Reactivity of Gigantic Molybdenum Blue Wheels. *J. Am. Chem. Soc.* 136, 14114–14120 (2014).

## **O16 - Identifying the molecular targets of autoimmunity in type 1 diabetes by HLA-peptidomics**

S. Gonzalez Duque<sup>1,2</sup>, Y. Verdier<sup>2</sup>, J. Vinh<sup>2</sup> & R. Mallone<sup>1</sup>

Type 1 diabetes (T1D) is an autoimmune disease in which autoreactive CD8+ T-cells destroy pancreatic insulin-secreting  $\beta$ -cells. This is triggered by the recognition of epitopes, derived from  $\beta$ -cell antigens and presented at their surface in the pocket of HLA class I molecules. We aimed at identifying these epitopes by HLA peptidomics. This strategy consists in purifying the peptide-HLA complexes from  $\beta$ -cells to analyze the eluted peptides by mass spectrometry. A selection strategy was developed to analyze these data and validated based: 1) on the aminoacid length of the identified peptides (HLA pocket size constraint criteria); 2) the peptide signature, (anchoring residues required for binding to the HLA pocket); and 3) the fact that certain identified peptides correspond to already described major CD8+ T-cell epitopes from proinsulin. This allowed us to compile a catalogue of 65 unique peptides derived from 49  $\beta$ -cell proteins. Preproinsulin, chromogranin-A, IA-2, IAPP, GAD and ZnT8 are already known as major  $\beta$ -cell antigens, and novel candidate epitopes were identified within their sequences. The remaining 43 proteins represent novel candidate antigens. Among them, the most represented proteins, in terms of number of identified peptides, are expressed in insulin granules and are substrates for proconvertase enzyme, which process their precursors to obtain bioactive products. Herein, we hypothesize that processing of  $\beta$ -cell protein precursors within the  $\beta$ -cell represent a major source of autoimmune epitopes. The proteins/epitopes candidates thus identified may lead to the development of new disease biomarkers; and to novel therapeutic strategies (immunotherapy agents) to neutralize the cognate T-cells.

## O17 - Identification of fish proteins and their biological species in garum sauce using proteomics

Sergui Mansour,<sup>(1)</sup> Stéphanie Devassine,<sup>(1)</sup> Nicolas Garnier,<sup>(2)</sup> Christian Rolando<sup>(1)</sup> and Caroline Tokarski<sup>(1)</sup>

(1) *Miniaturisation pour l'Analyse, la Synthèse & la Protéomique (MSAP), USR CNRS 3290 Université de Lille 1 Sciences et Technologies, 59655 Villeneuve d'Ascq Cedex, France*

(2) *SARL Laboratoire Nicolas Garnier, 63270 Vic le Comte, France*

Ceramic material represents essential witness of human activities through years. The ceramic study is mainly performed using typology, clay composition, sealing methods and presence of resinous material coating inner walls. Coated amphorae are supposed to contain aqueous commodity as wines or sauces. These observations are unfortunately limited and have to be completed by analyses of amphorae contents.

Garum is a fermented fish sauce used as condiment by Romans and Greeks in the past. It was prepared from fish blood, intestines, muscles. Various species were used as sardines, tuna, anchovies. Fish proteins are thought to be fully hydrolyzed to amino acids, losing information on proteins.

The aim of this work is to identify fish proteins and their biological species from garum residues trapped in ancient ceramics. The work is challenging because (i) proteins are easily leached during burial and (ii) databases contain few fish species. In 2000s, we introduced proteomics to study protein residues in archaeological samples. Here, we propose to adapt proteomics approaches to study garum prepared with ancient recipes from sardines. Our results, based on MALDI-TOF analyses of desalted garum, demonstrate for the first time the presence of native proteins. An adapted bottom-up approach (Orbitrap) allowed identifying 317 proteins among which cell-cytoskeleton/muscle proteins and blood proteins (+contaminants: *Salmonella bacterium*). Most of proteins were identified using sequence homologies to other fish species (TrEMBL:only 195 sardine-proteins). However several never described peptides were identified as LLVSPWTQR from hemoglobin showing the substitution of isoleucine (referenced for *Salmo salar*) by valine. Currently, we are analyzing protein-residues from garum impregnated in model ceramics. This presentation will detail all analytical procedures and results.



## **O18 - Substrate-Mediated Laser Ablation for Spatially-Resolved Biomolecules Analysis by Mass Spectrometry**

Tony MAULOQUET<sup>1,2</sup>, Benoit FATOU<sup>1,2</sup>, Maxence WISZTORSKI<sup>1</sup>, Cristian FOCSA<sup>2</sup>, Michel SALZET<sup>1</sup>, Michael ZISKIND<sup>2</sup>, Isabelle FOURNIER<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Laboratoire PRISM INSERM U1192, Université Lille 1, Villeneuve d'Ascq, France

<sup>2</sup>Laboratoire PhLAM-CNRS UMR 8523, Université Lille 1, Villeneuve d'Ascq, France

Over the past decade the use and performance of MS instruments has greatly advanced, leading to increased sensitivity and the use of smaller sample sizes. This allows us to compare the different spatially resolved regions of biological tissues. Previous studies reported an increased need for better micro-sampling methods, leading to the use of micro-extraction for proteomic analysis. However this method is greatly limited by the spatial resolution (about 600  $\mu\text{m}$  - 1 mm). The use of MALDI-MS imaging in combination with micro-sampling strategies provides more information about the location and identity of compounds in tissues. However MALDI-MS is limited by proper protein extraction and preparation. To overcome both issues, Laser Ablation (LA) offers an alternative to micro-sampling as it able to directly measure on the sample and modulate the target area while having an increased spatial resolution at smaller areas (few 100  $\mu\text{m}$ ). In this context, we developed a micro-sampling device using laser ablation at a wavelength of 532 nm and a droplet capture method for the ablated sample. This device can be applied for both lipidomics and proteomics studies.

## **O19 - Complementary use of gas chromatography-mass spectrometry and thin layer chromatography-mass spectrometry for chemical differentiation and identification of resinous materials**

Zaineb Jemmali, Agnès Chartier, Claire Elfakir

*Université d'Orléans, Institut de Chimie Organique et Analytique (ICOA), CNRS UMR 7311  
B.P. 6759, 2 rue de Chartres, 45067 Orléans, Cedex 2, France*

Resins are hydrocarbon secretions of many plants and well known for their protective benefits. They have been used over the course of history for a wide range of applications (cosmetic, pharmaceutical, painting...) and are composed mainly of terpenes. Terpenes constitute the most abundant and structurally diverse group of plant secondary metabolites playing an important role in plant interactions.

It is well established that the composition of plant material may vary depending on the know-how and the place of harvest, thus there is a true need for exhaustive analytical methods to certify the origin and ensure the quality control of resinous material. However the chemical characterization of this material is a complex task due to the wide range polarity of its constituents and numerous overlapping peaks observed during chromatographic separation. Furthermore, in these complex mixtures, some terpenes are major compounds whereas some others are present in trace amounts.

First, the study was carried using a gas chromatography with a single quadrupole mass spectrometer using electron ionization (EI). A tentative identification of the terpenes in different resins was based on their MS spectra and their retention time in comparison with standards. Additional information was given by using positive chemical ionization (CI) with methane as reagent gas. Thus molecular ions could be observed easily. To identify minor compounds, single ion monitoring (SIM) was used in order to increase the sensitivity for specific ion though an increased scanning dwell time for that ion.

A second approach has been investigated using thin layer chromatography which is an inexpensive, fast and useful separative technique for phytochemical characterization. Directly combined to TLC, matrix assisted laser desorption / ionization and time of flight mass spectrometry (MALDI-TOF) was optimized (choice of the matrix, ionization mode ...). This innovating coupling gave a clear identification of TLC spots with significant spatial resolution which allows the chemical differentiation of various resins.

## **O20 - Comparative proteomic analysis of *Streptomyces coelicolor* A(3) and *Streptomyces lividans* TK24 using a quantitative label-free proteomic approach**

Aaron Millan-Oropeza<sup>1</sup>, Céline Henry<sup>2</sup>, Melisande Blein-Nicolas<sup>2</sup>, Anne Aubert-Frambourg<sup>2</sup>, Marie-Jöelle Virolle<sup>1</sup>

<sup>1</sup> Institut de Biologie Intégrative de la Cellule (I2BC) de l'Université Paris Sud, UMR 8621, Métabolisme Energétique des Streptomyces (MES), Orsay, France.

<sup>2</sup> INRA, UMR 1319, Micalis - PAPPSO, <sup>3</sup> INRA-AgroParisTech, Domaine de Vilvert, Jouy en Josas, France.

*Streptomyces* are filamentous Gram positive soil bacteria producing more than two thirds of all known antibiotics; however the regulation of antibiotic biosynthesis and its links with primary metabolism are still not fully understood. *S. lividans* and *S. coelicolor*, that are closely phylogenetically related, constitute model strains to tackle this question. These strains have contrasted abilities to produce antibiotics and accumulate TriAcylGlycerol (TAG) upon growth in the presence of glucose. *S. coelicolor* produces abundantly antibiotics and does not accumulate TAG whereas *S. lividans* accumulates TAG but does not produce antibiotics. A gel-free shotgun proteomic approach was developed to determine the nature of the metabolic differences existing between these two strains that likely govern the different routing of acetylCoA, toward TAG or antibiotic biosynthesis in *S. lividans* and *S. coelicolor*, respectively. This strategy involves a simple protein extraction followed by proteolysis in solution. LC-MS/MS analysis was carried out in a Q-Exactive MS (Thermo Fisher). More than 2000 proteins were identified on X!TandemPipeline, corresponding approximately to 25% of the genome in both strains. Quantitative analysis was performed using two approaches: Spectral Counting (SC) and eXtracted Ion Chromatograms (XIC). The analysis of variance (ANOVA) included strain (*S. lividans* / *S. coelicolor*) and time of culture (36h / 48h / 72h) as factors. This study revealed remarkable differences in the abundance of proteins involved in central carbon metabolism between the two strains. Indeed, glycolytic enzymes were more abundant in *S. lividans* than in *S. coelicolor* whereas enzymes of the Krebs cycle, respiratory chain and gluconeogenesis were more abundant in *S. coelicolor* than in *S. lividans*. This indicated that *S. lividans* metabolism was mainly glycolytic, generating sufficient glycerol-3P and acetylCoA to support TAG biosynthesis. In contrast, *S. coelicolor* metabolism was mainly oxidative unable to generate sufficient glycerol-3P to promote TAG biosynthesis. In consequence the acetylCoA generated could not be stored as TAG and remains available for Krebs cycle fueling and antibiotic biosynthesis. An explanatory model linking an oxidative metabolism to antibiotic production will be proposed.

## O21 - Study of RNA kissing complexes and their interaction with Magnesium cations by *native MS*

Clémence Rabin\*(1,2,3), Adrien Marchand (1,2,3), Joséphine Abi-Ghanem (1,2,3)  
& Valérie Gabelica (1,2,3)

(1) Univ. Bordeaux, IECB, ARNA Laboratory, F-33600 Pessac, France.

(2) Inserm, U1212, ARNA Laboratory, F-33000 Bordeaux, France.

(3) CNRS, UMR 5320, ARNA Laboratory, F-33000 Pessac, France.

*This work was funded by the ERC (ERC-2013-CoG- 616551-DNAFOLDIMS).*

Native mass spectrometry (MS) uses gentle conditions (buffers, ionization conditions) to maintain the structures of complexes from solution to gas phase. Folding preservation has been validated for various biomolecules, but it is still widely unaddressed for RNA. We started by exploring the behavior of RNA kissing complexes (small RNA hairpins that dimerize through their loops) and their interaction with  $Mg^{2+}$  cations using native MS. For that we used different models. One of them is the *trans*-activating responsive (TAR) RNA element of HIV1 viral genome and its kissing complex with the aptamer R06, which structure has been solved by NMR<sup>1</sup> and X-ray crystallography<sup>2</sup>.

First, ESI-MS allowed us to detect specifically RNA-RNA kissing complexes that are present in solutions doped with magnesium acetate up to 1 mM. We showed that adding  $Mg^{2+}$  cations in the solution helps to detect larger amount of dimers. These studies indicate that  $Mg^{2+}$  cations always increase dimer stabilization but are not always mandatory for their formation. To deduce the number of  $Mg^{2+}$  adducts specifically pertaining to the loop-loop kissing motif, we designed sequences forming a duplex RNA of the same length and base pairs. By mathematical subtraction of the non-specific adducts, we can deduce that there are potentially 2  $Mg^{2+}$  specific ions into the kissing loop complex<sup>3</sup>.

From this study, we also have seen that monomers and dimers with and without  $Mg^{2+}$  seem to have different response factors, and this is why it was difficult to do an absolute quantification of the RNA. Nevertheless, the recent results about specific  $Mg^{2+}$  binding will help us to determine response factors and so determine a possible mechanism and binding constants for the formation of kissing complexes. These results are promising and can bring new structural knowledge about RNA kissing complexes. Ion mobility spectrometry will eventually allow us to separate the different conformations present in solution, and determine the potential impact of  $Mg^{2+}$  cations on kissing complexes structures. Collision cross section analysis to determine gas-phase vs. solution phase structure is currently under way.

(1) Melckebeke, H. Van. *PNAS*. **2008**, 105 (27), 9210.

(2) Lebars, I.; Legrand, P.; Aimé, A.; Pinaud, N.; Fribourg, S.; Di Primo, C. *Nucleic Acids Res.* **2008**, 36 (22), 7146.

(3) Marchand, A. and al. *JACS*. **2015**, 137 (2), 750.

## O22 - Vers une méthode d'analyse par LDI et MALDI-FTICRMS de bio-huiles issues de la pyrolyse de la biomasse

J. Hertzog<sup>a\*</sup>, V. Carré<sup>a,b</sup>, A. Dufour<sup>c</sup>, F. Aubriet<sup>a,b</sup>

*a Université de Lorraine, LCP-A2MC, ICPM, 1 boulevard Arago, 57078 Metz Cedex 03, France  
b FR 3624 Réseau National de Spectrométrie de Masse FT-ICR à très haut champ c CNRS,  
Université de Lorraine, LRGF, ENSIC, 1, Rue Grandville, 54000 Nancy, France*

[jasmine.hertzog@univ-lorraine.fr](mailto:jasmine.hertzog@univ-lorraine.fr)

L'emploi de bio-huiles issues de la pyrolyse de la biomasse est une alternative prometteuse aux énergies fossiles et aux différents problèmes qui leurs sont associés. En effet, ces bio-huiles permettent l'accès à des biocarburants de deuxième génération, qui contrairement aux biocarburants de première génération, n'entrent pas en concurrence avec les ressources alimentaires comme les huiles végétales (bio-esters) ou la canne à sucre et la betterave (bioéthanol). Leur valorisation, d'un point de vue pétrochimique, nécessite une connaissance approfondie de leur composition par une étude exhaustive. La composition de ces bio-huiles est très complexe puisqu'elles contiennent généralement plusieurs milliers d'espèces différentes.

Pour les caractériser, il est nécessaire de développer des méthodes analytiques avancées en employant par exemple la spectrométrie de masse de très haute résolution couplée à différents modes d'ionisation. Cela permet d'en obtenir la composition la plus exhaustive possible en accédant à la formule moléculaire des différents composants présent en leur sein. A partir du profil pétrochimique obtenu pour les différentes bio-huiles étudiées, il est possible de les comparer en lien avec la nature de la matière première et des conditions pyrolyse utilisées.

Une méthode d'analyse robuste par spectrométrie de masse à résonance cyclotronique ionique couplée à l'électro-nébulisation (ESI-FTICRMS) a déjà été mise en place en étudiant les paramètres d'ionisation (solvants, température et dopants) en mode de détection positif et négatif. Nous proposons ici d'adopter une approche similaire de caractérisation d'une bio-huile issue de la pyrolyse du bois (chêne) par désorption/ionisation laser avec ou sans matrice (MALDI-FTICRMS et LDI-FTICRMS). Les premiers résultats montreront qu'il est possible d'avoir accès à des classes de composés présentant une polarité moindre que celles déjà caractérisées par ESI-FTICRMS.

## **O23 - Development of novel Thin Layer Chromatography coupled with Mass Spectrometry methodology for the identification of inhibitors and/or substrates in plant extracts**

J. Ferey, D. Da Silva, S. Veyrat, M. Rio, C. Colas, B. Maunit

*Univ.Orleans, ICOA, CNRS, UMR 7311, F-45067, Orleans, France.*

Plants are naturally rich sources of bioactive molecules that are of interest for many applications in various fields (cosmetic, therapeutic). Although screening methodologies of primary and secondary plant metabolites are widely developed, the research for new approaches stays of current events. In this context, Thin Layer Chromatography has decisive advantages. Easy to operate, low expensive, with high throughput screening and large panel of molecule revelations with specific reagents make an advanced technique in the phytochemical characterization and more recently in detection of bioactive molecules (TLC-Bioassay). Our work blends in this context through the development of innovative methodologies to study Ligand/Enzyme interactions by TLC and TLC@MALDI-TOFMS.

The first approach was to assess a new quantitative methodology for a characterization of the kinetic parameters ( $V_{max}$ ,  $K_M$ ) of a biological enzyme by TLC-UV. For this development, the Invertase was selected as model and the results obtained are in agreement with literature data. Thereby, a classification of substrate's affinity for the Invertase enzyme was able to be realized.

Another part of our study concerned the screening of substrates / inhibitors present in plants (carbohydrates and polyphenols). We developed an innovative methodology based on TLC@MALDI-TOFMS coupling and use immobilized enzymes on solid support. With this methodology, specific and selective, Invertase substrates and Tyrosinase inhibitors detection and identification were obtained, and that with a higher confidence. Therefore, we could identify three Invertase substrates and four Tyrosinase inhibitors.

The coupling TLC@MALDI-TOFMS is proved to be a powerful technique for screening applications thanks to the wealth of information available such as the separative dimension, bioassay, and specific identification by mass spectrometry.

## O24 - New strategy for identification of secondary metabolites based on both mass spectrometry and bioinformatics.

Mickaël CHEVALIER<sup>1</sup>, Philippe JACQUES<sup>1</sup>, Maude PUPIN<sup>2</sup>, Valérie LECLERE<sup>1,2</sup>  
and Christophe FLAHAUT<sup>1</sup>

<sup>1</sup> Univ. Lille, INRA, ISA, Univ. Artois, Univ. Littoral Côte d'Opale, EA 7394 - ICV - Institut Charles Viollette, 59000, Lille, France.

<sup>2</sup> Univ. Lille, CNRS, Centrale Lille, UMR 9189-CRISTAL-Centre de Recherche en Informatique Signal et Automatique de Lille, 59000 Lille, France ; Inria Lille Nord Europe, Bonsai team, Parc scientifique de la Haute Borne, 40 avenue Halley, 59650 Villeneuve d'Ascq, France.

Nonribosomal peptides (NRPs) are secondary metabolites produced by microorganisms, synthesized by large enzymatic complexes called nonribosomal peptide synthetases (NRPSs). NRPSs are modularly organized, each module being responsible for the incorporation of a specific monomer. The NRPs building blocks include many monomers (proteogenic and non proteogenic amino acids, modified amino acids, hydroxy acids, fatty acid chains and many others). Moreover, the NRPs can be linear, cyclic, branched, and branch-cyclic NRPs. This leads to a particularity of these compounds displaying a broad structural biodiversity responsible for their numerous activities (antibacterial, antifungal, siderophores, biosurfactants...), interesting different application area (cosmetic, health, agro-food, phytosanitary...). Therefore, the characterization of NRPs structures with peptide/protein or genome database searches and *de novo* peptide sequencing algorithms are not effective and remains a challenge.

We propose a new strategy for the identification of new NRPs based on bioinformatics approach developed from several experimental datasets from mass spectrometry.

The first dataset will include MALDI-MS profiles of a collection of more than 1000 bacterial strains of the genus *Pseudomonas* which produce a variety of siderophores and lipopeptides. The second dataset will

be constituted by the UV absorbance spectra (PDA) and the different mass spectra fragmentation of secondary metabolites purified and used to search the common signal which will then be used as the signature MS/MS. We will use mass spectrometry techniques like high resolution ESI MS/MS, FT MS/MS or LC ESI MS/MS coupling.

This database will be connected to Norine database to understand and establish the specific fragmentations rules own NRPs.

This project is part of a broader program of conception of tools coupling bioinformatics and mass spectrometry. In collaboration with the Geneva Swiss Institute of Bioinformatics (SIB) which is currently developing bioinformatics tools to identify secondary metabolites.





---

---

## Liste des participants

---

---

**BOLBACH Gérard**

Université Pierre et Marie Curie, Laboratoire des BioMolécules (LBM), UMR 7203  
Campus de Jussieu, BatA-6<sup>e</sup>  
75005 Paris  
[gerard.bolbach@upmc.fr](mailto:gerard.bolbach@upmc.fr)

**TOUBOUL David**

Institut de Chimie des Substances Naturelles (ICSN), CNRS - UPR 2301  
Bâtiment 27,  
1, avenue de la Terrasse  
91198 Gif-sur-Yvette Cedex  
[david.touboul@icsn.cnrs-gif.fr](mailto:david.touboul@icsn.cnrs-gif.fr)

**AUBRIET Frédéric**

Laboratoire de Chimie et de Physique Approche Multi-échelles des Milieux Complexes  
(LCP A2MC), Institut de Chimie Physique et Matériaux (ICPM)  
1 boulevard Arago - CP 878 11  
57078 Metz  
[frederic.aubriet@univ-lorraine.fr](mailto:frederic.aubriet@univ-lorraine.fr)

## Sponsors

---

---

**LERAT Stéphanie - QUÉTARD Christophe**

Sales specialist - Field application specialist  
ProteinSimple  
3001 Orchard Parkway  
San Jose, CA 95134  
[stephanie.lerat@proteinsimple.com](mailto:stephanie.lerat@proteinsimple.com)  
[christophe.quetard@proteinsimple.com](mailto:christophe.quetard@proteinsimple.com)

**DROUYE Freddy**

MS specialist  
Waters  
BP 608  
78056 Saint-Quentin en Yvelinnes Cedex  
[freddy\\_drouye@waters.com](mailto:freddy_drouye@waters.com)

**SCHNELL Gilles**

Thermo SAS  
16 avenue du Québec  
91941 Courtaboeuf Cedex  
[gilles.schnell@thermofisher.com](mailto:gilles.schnell@thermofisher.com)

**TOINON Doriane**

Shimadzu France  
Boulevard Salvador Allende  
77186 Noisel  
[dto@shimadzu.fr](mailto:dto@shimadzu.fr)

**SAUVARD Emmanuel**

Agilent  
3 avenue du Canada  
91970 Les Ulis  
[emmanuel.sauvard@agilent.com](mailto:emmanuel.sauvard@agilent.com)

**HURBAIN Andreas**

Bruker  
24 rue de l'Industrie  
67166 Wissembourg Cedex  
[andreas.hurbain@bruker.com](mailto:andreas.hurbain@bruker.com)

# Participants aux RCJSM

---

**BEAUMESNIL Mathieu**

Laboratoire COBRA  
Bâtiment IRCOF  
1 rue Tesnière  
76821 Mont Saint Aignan  
[mathieu.beaumesnil@etu.univ-rouen.fr](mailto:mathieu.beaumesnil@etu.univ-rouen.fr)

**BOTZANOWSKI Thomas**

Laboratoire de Spectrométrie de Masse  
BioOrganique (LSMBO)  
Université de Strasbourg, IPHC  
25 rue Becquerel  
67087 Strasbourg Cedex  
[thomas.botzanowski@etu.unistra.fr](mailto:thomas.botzanowski@etu.unistra.fr)

**BOUCLON Julien**

Ecole Normale Supérieure  
Département de Chimie  
24 rue Lhomond  
75005 Paris  
[julien.bouclon@ens.fr](mailto:julien.bouclon@ens.fr)

**CALVARESI Valeria**

Institut Pasteur  
Unité de Spectrométrie de Masse  
Structurale et Protéomique  
25-28 rue du Docteur Roux  
75015 Paris  
[valeria.calvaresi@live.it](mailto:valeria.calvaresi@live.it)

**CHEVALIER Mickaël**

Institut Charles Violette  
Boulevard Paul Langevin, Cité Scientifique  
Bât Polytech'Lille  
59650 Villeneuve D'Ascq  
[mickael.chevalier1@polytech-lille.fr](mailto:mickael.chevalier1@polytech-lille.fr)

**DELAHAYE Solenne**

INSERM ARNA U1212  
Institut Européen de Chimie et Biologie  
2 rue Robert Escarpit  
33602 Pessac  
[solenne.delahaye@etu.univ-paris-diderot.fr](mailto:solenne.delahaye@etu.univ-paris-diderot.fr)

**DOM Inès**

Anses - Laboratoire de sécurité des aliments  
14 rue Pierre et Marie Curie  
94701 Maisons-Alfort  
[ines.dom@anses.fr](mailto:ines.dom@anses.fr)

**DOUX Suzie**

Synchrotron Soleil  
L'Orme des Merisiers  
91190 Saint Aubin  
[suzie.doux@synchrotron-soleil.fr](mailto:suzie.doux@synchrotron-soleil.fr)

**FARENC Mathilde**

Laboratoire COBRA  
1 rue Lucien Tesnière  
76130 Mont Saint Aignan  
[mathildefarenc@gmail.com](mailto:mathildefarenc@gmail.com)

**FATOU Benoit**

Laboratoire PRISM INSERM U1192  
Bâtiment SN3, 1<sup>er</sup> étage, Université Lille 1  
Cité Scientifique  
59655 Villeneuve d'Ascq  
[benoit.fatou@univ-lille1.fr](mailto:benoit.fatou@univ-lille1.fr)

**FEREY Justine**

Institut de Chimie Organique et Analytique  
Rue de Chartres  
45100 Orléans  
[justine.ferey@etu.univ-orleans.fr](mailto:justine.ferey@etu.univ-orleans.fr)

**FRESNAIS Margaux**

LSMIS – UMR 7140 CNRS  
Université de Strasbourg  
1 rue Blaise Pascal  
67008 Strasbourg  
[margaux.fresnais@etu.unistra.fr](mailto:margaux.fresnais@etu.unistra.fr)

**FU Tingting**

Institut de Chimie des Substances  
Naturelles, CNRS, UPR 2301  
Bât 27, 1 avenue de la Terrasse  
91190 Gif-sur-Yvette  
[tingting.fu@cnrs.fr](mailto:tingting.fu@cnrs.fr)

**FUMEX Maud**

Laboratoire du LAMBE  
Université d'Evry Val d'Essonne  
Boulevard François Mitterrand  
91025 Evry Cedex  
[maud.fumex@yahoo.fr](mailto:maud.fumex@yahoo.fr)

**GONZALEZ DUQUE Sergio**

INSERM  
10 rue Vauquelin  
75011 Paris  
[sergio.gonzalez-duque@espci.fr](mailto:sergio.gonzalez-duque@espci.fr)

**GUTIERREZ SAMA Sara**

LCABIE/IPREM  
Hélioparc, 2 avenue du Président  
Pierre Angot  
64000 Pau  
[sara.gutierrezsama@univ-pau.fr](mailto:sara.gutierrezsama@univ-pau.fr)

**HAUTBERGUE Thaïs**

Toxalim  
180 chemin de Tournefeuille  
31300 Toulouse  
[thaubergue@gmail.com](mailto:thaubergue@gmail.com)

**HERTZOG Jasmine**

LCP A2MC  
Université de Lorraine  
1 boulevard Arago - CP 878 11  
57078 Metz  
[jasmine.hertzog@univ-lorraine.fr](mailto:jasmine.hertzog@univ-lorraine.fr)

**HUPIN Sébastien**

Laboratoire COBRA  
Bâtiment IRCOF  
1 rue Tesnière  
76821 Mont Saint Aignan  
[sebastien.hupin@etu.univ-rouen.fr](mailto:sebastien.hupin@etu.univ-rouen.fr)

**JEANNE DIT FOUQUE Dany**

Laboratoire CEMCA UMR 6521  
6 avenue le Gorgeu  
29200 Brest  
[dany.jeanneditfouque@bbox.fr](mailto:dany.jeanneditfouque@bbox.fr)

**JEANNE DIT FOUQUE Kévin**

Laboratoire COBRA  
1 rue Lucien Tesnière  
76130 Mont Saint Aignan  
[kevin.jeanne-dit-fouque@etu.univ-rouen.fr](mailto:kevin.jeanne-dit-fouque@etu.univ-rouen.fr)

**JEMMALI Zaineb**

ICOA  
Pôle de Chimie, rue de Chartres  
45100 Orléans  
[zaineb.jemmali@etu.univ-orleans.fr](mailto:zaineb.jemmali@etu.univ-orleans.fr)

**KAMISSOKO Adama**

LCP A2MC  
Institut de Chimie Physique et Matériaux  
1 boulevard Arago - CP 878 11  
57078 Metz  
[kamisgn@gmail.com](mailto:kamisgn@gmail.com)

**KNIGHT Geoffrey**

Institut Lumière Matière, UMR 5306 CNRS  
Université Claude Bernard Lyon 1  
Campus Lyon-Tech – La Doua  
Bâtiment Kastler, 10 rue Ada Byron  
69622 Villeurbanne Cedex  
[geoffrey.knight@univ-lyon1.fr](mailto:geoffrey.knight@univ-lyon1.fr)

**LABOUREUR Laurent**

Institut de Chimie des Substances  
Naturelles  
ICSN, CNRS, UPR 2301  
Bât 27, 1 avenue de la Terrasse  
91198 Gif-sur-Yvette Cedex  
[laurent.laboureur@cnrs.fr](mailto:laurent.laboureur@cnrs.fr)

**LE BERRE Adeline**

USR CNRS 3149 Spectrométrie Masse  
Biologique et Protéomique, ESPCI  
10 rue Vauquelin  
75005 Paris  
[adeline.le-berre@hotmail.fr](mailto:adeline.le-berre@hotmail.fr)

**LIUU Sophie**

INRA MICALIS / PAPPSO  
Domaine de Vilvert  
78352 Jouy-en-Josas  
[sophie.liuu@jouy.inra.fr](mailto:sophie.liuu@jouy.inra.fr)

**LIVET Sandrine**

INSERM ARNA U1212  
Institut Européen de Chimie et Biologie  
2 rue Robert Escarpit  
33602 Pessac  
[s.livet@iecb.u-bordeaux.fr](mailto:s.livet@iecb.u-bordeaux.fr)

**MANSOUR Sergui**

Université Lille 1 – Sciences et Technologies  
Cité Scientifique  
59650 Villeneuve Villeneuve D'Ascq  
[sergui.mansour@gmail.com](mailto:sergui.mansour@gmail.com)

**MAULOUE T Tony**

Laboratoire PRISM/PhLAM  
Université Lille 1  
Bâtiment SN3, Campus  
59655 Villeneuve d'Ascq  
[tony.maulouet@univ-lille1.fr](mailto:tony.maulouet@univ-lille1.fr)

**MENDES SIQUEIRA Anna Luiza**

Laboratoire COBRA  
Université de Rouen  
Bât IRCOF, 1 rue Tesnière  
76821 Mont Saint Aignan  
[annaluiza.msiqueira@gmail.com](mailto:annaluiza.msiqueira@gmail.com)

**MILLAN OROPEZA Aaron**

CNRS I2BC UMR 9198  
Université Paris Sud, Bât 409  
Rue G Mendel  
91400 Orsay  
[aaron.millan-oropeza@i2bc.paris-saclay.fr](mailto:aaron.millan-oropeza@i2bc.paris-saclay.fr)

**PICCOLO Stefano**

Institut Européen de Chimie et Biologie  
INSERM U1212  
2 rue Robert Escarpit  
33607 Pessac  
[stefano.piccolo@inserm.fr](mailto:stefano.piccolo@inserm.fr)

**RABIN Clémence**

INSERM ARNA U1212  
Institut Européen de Chimie et Biologie  
2 rue Robert Escarpit  
33602 Pessac  
[clemence.rabin@inserm.fr](mailto:clemence.rabin@inserm.fr)

**ROUGEMONT Blandine**

Institut des Sciences Analytiques  
Université Lyon 1  
5 rue de la Doua  
69100 Villeurbanne  
[blainde.rougemont@univ-lyon1.fr](mailto:blainde.rougemont@univ-lyon1.fr)

**SAUDEMONT Philippe**

Laboratoire PRISM INSERM U1192  
Bâtiment SN3, 1<sup>er</sup> étage, Université Lille 1  
Cité Scientifique  
59650 Villeneuve d'Ascq  
[philippe.saudemont@etudiant.univ-lille1.fr](mailto:philippe.saudemont@etudiant.univ-lille1.fr)

**SCHINDLER Baptiste**

UMR 5306 CNRS  
Université Claude Bernard Lyon 1  
Campus Lyon Tech – La Doua  
Bât Kastler, 10 rue Ada Byron  
69622 Villeurbanne Cedex  
[baptiste.schindler@univ-lyon1.fr](mailto:baptiste.schindler@univ-lyon1.fr)

**SEFFOUH Ilham**

LAMBE  
Université Evry Val d'Essonne  
Boulevard François Mitterrand  
91900 Evry  
[ilham.seffouh@gmail.com](mailto:ilham.seffouh@gmail.com)

**SLIMANI Kahina**

ANSES  
Laboratoire de Fougères  
11B rue Claude Bourgelat  
35133 Javené  
[kahina.slimani@anses.fr](mailto:kahina.slimani@anses.fr)

## Questionnaire rencontres CJSM 2015

1. Comment jugez-vous le contenu scientifique des rencontres (qualité des cours, niveau, organisation, répartition cours/présentations...) ?
  
2. Que pensez-vous du centre d'hébergement (chambres, repas, lieux communs, salle de cours...) ?
  
3. Que pensez-vous de l'organisation générale des rencontres ?
  
4. Que pensez-vous des différentes animations (soirées, après midi récréative)
  
5. Suggestions pour l'année prochaine :
  - 5-1) Thématiques de cours que vous souhaiteriez aborder
  
  - 5-2) Idée(s) de site
  
  - 5-3) Autres (exprimez-vous!)

**Merci d'avance pour vos réponses !**

## Et maintenant votez pour élire votre orateur(-rice)/ présentation favorit(e) !

Pour cela il vous suffit d'inscrire pour chaque critère un, deux ou trois smileys  
ou un, deux, trois symboles « + » pour ceux qui n'aimeraient pas le dessin ;-)



Orateur(-trice)	Notation	Total
<i>Exemple</i>	<ol style="list-style-type: none"> <li>1. Contenu scientifique +++</li> <li>2. Présentation didactique ++</li> <li>3. Qualité du diaporama +</li> </ol>	6
<b>Laurent Laboureur</b> - La chromatographie en phase supercritique couplée avec la spectrométrie de masse haute résolution, un outil pour étudier les nucléosides	<ol style="list-style-type: none"> <li>1. Contenu scientifique</li> <li>2. Présentation didactique</li> <li>3. Qualité du diaporama</li> </ol>	
<b>Julien Bouclon</b> - Parents and fragments MS/MS at high resolution through software & hardware improvements of 2D FT-ICR MS	<ol style="list-style-type: none"> <li>1. Contenu scientifique</li> <li>2. Présentation didactique</li> <li>3. Qualité du diaporama</li> </ol>	
<b>Kévin Jeanne-Dit-Fouque</b> - Evidence of Lasso and Branched-cyclic Structures using Ion Mobility – Mass Spectrometry	<ol style="list-style-type: none"> <li>1. Contenu scientifique</li> <li>2. Présentation didactique</li> <li>3. Qualité du diaporama</li> </ol>	
<b>Kahina Slimani</b> - A Quantitative Determination Method for the Analysis of Quaternary Ammonium Compounds Residues in Bovine Milk by HPLC-MS/MS	<ol style="list-style-type: none"> <li>1. Contenu scientifique</li> <li>2. Présentation didactique</li> <li>3. Qualité du diaporama</li> </ol>	
<b>Sophie Liuu</b> - Targeted analysis in PRM mode towards clinical application : Optimization of experimental setup and data processing for accurate amyloid diagnosis	<ol style="list-style-type: none"> <li>1. Contenu scientifique</li> <li>2. Présentation didactique</li> <li>3. Qualité du diaporama</li> </ol>	
<b>Thaïs Hautbergue</b> - Caractérisation du métabolome secondaire de <i>Penicillium</i> par marquage isotopique et spectrométrie de masse haute résolution	<ol style="list-style-type: none"> <li>1. Contenu scientifique</li> <li>2. Présentation didactique</li> <li>3. Qualité du diaporama</li> </ol>	
<b>Sara Gutierrez Sama</b> - Study of Gel Permeation Chromatography High Resolution Inductively Coupled Plasma Mass Spectrometry parameters in petroleum product analysis	<ol style="list-style-type: none"> <li>1. Contenu scientifique</li> <li>2. Présentation didactique</li> <li>3. Qualité du diaporama</li> </ol>	
<b>Blandine Rougemont</b> - Cinétique et analyse protéomique différentielle associée à l'infection par <i>Dickeya dadantii</i> d'un modèle végétal : de la phase de découverte au transfert d'une méthode MRM ciblée.	<ol style="list-style-type: none"> <li>1. Contenu scientifique</li> <li>2. Présentation didactique</li> <li>3. Qualité du diaporama</li> </ol>	
<b>Philippe Saudemont</b> - SPIDERMASS: A Novel Mass Spectrometry Based Instrument for in vivo Real-Time Analysis with Low Invasiveness for Guided Surgery	<ol style="list-style-type: none"> <li>1. Contenu scientifique</li> <li>2. Présentation didactique</li> <li>3. Qualité du diaporama</li> </ol>	

Orateur(-trice)	Notation	Total
<b>Dany Jeanne-dit-Fouque</b> - Tandem Mass Spectrometry Analysis of a Mixture of Linear and Cyclic Peptides Isomers using the Survival Yield Technique	1. Contenu scientifique 2. Présentation didactique 3. Qualité du diaporama	
<b>Ilham Seffouh</b> - Proteomic analysis of human endosulfatases HSulfs, key enzymes in the modulation of the sulfation pattern of heparan sulfate	1. Contenu scientifique 2. Présentation didactique 3. Qualité du diaporama	
<b>Mathilde Farenc</b> - iASAP: a new fast and easy way to characterize air sensitive compounds by mass spectrometry	1. Contenu scientifique 2. Présentation didactique 3. Qualité du diaporama	
<b>Stefano Piccolo</b> - Biophysical characterization of RNA-metabolite complexes by native MS	1. Contenu scientifique 2. Présentation didactique 3. Qualité du diaporama	
<b>Tingting Fu</b> - High resolution imaging of maize stem with time-of-flight secondary ion mass spectrometry	1. Contenu scientifique 2. Présentation didactique 3. Qualité du diaporama	
<b>Sébastien Hupin</b> - Spectrométrie de mobilité ionique et spectrométrie de masse pour la caractérisation d'assemblages hybrides de polyoxométallates	1. Contenu scientifique 2. Présentation didactique 3. Qualité du diaporama	
<b>Sergio Gonzalez Duque</b> - Identifying the molecular targets of autoimmunity in type 1 diabetes by HLA-peptidomics	1. Contenu scientifique 2. Présentation didactique 3. Qualité du diaporama	
<b>Sergui Mansour</b> - Identification of fish proteins and their biological species in garum sauce using proteomics	1. Contenu scientifique 2. Présentation didactique 3. Qualité du diaporama	
<b>Tony Maulouet</b> - Substrate-Mediated Laser Ablation for Spatially-Resolved Biomolecules Analysis by Mass Spectrometry	1. Contenu scientifique 2. Présentation didactique 3. Qualité du diaporama	
<b>Zaineb Jemmali</b> - Complementary use of gas chromatography-mass spectrometry and thin layer chromatography-mass spectrometry for chemical differentiation and identification of resinous materials	1. Contenu scientifique 2. Présentation didactique 3. Qualité du diaporama	
<b>Aaron Millan-Oropeza</b> - Comparative proteomic analysis of <i>Streptomyces coelicolor</i> A(3) and <i>Streptomyces lividans</i> TK24 using a quantitative label-free proteomic approach	1. Contenu scientifique 2. Présentation didactique 3. Qualité du diaporama	



Orateur(-trice)	Notation	Total
<p><b>Clémence Rabin</b> - Study of RNA kissing complexes and their interaction with Magnesium cations by <i>native MS</i></p>	<ol style="list-style-type: none"> <li>1. Contenu scientifique</li> <li>2. Présentation didactique</li> <li>3. Qualité du diaporama</li> </ol>	
<p><b>Jasmine Hertzog</b> - Vers une méthode d'analyse par LDI et MALDI-FTICRMS de bio-huiles issues de la pyrolyse de la biomasse</p>	<ol style="list-style-type: none"> <li>1. Contenu scientifique</li> <li>2. Présentation didactique</li> <li>3. Qualité du diaporama</li> </ol>	
<p><b>Justine Ferey</b> - Development of novel Thin Layer Chromatography coupled with Mass Spectrometry methodology for the identification of inhibitors and/or substrates in plant extracts</p>	<ol style="list-style-type: none"> <li>1. Contenu scientifique</li> <li>2. Présentation didactique</li> <li>3. Qualité du diaporama</li> </ol>	
<p><b>Mickaël Chevalier</b> - New strategy for identification of secondary metabolites based on both mass spectrometry and bioinformatics</p>	<ol style="list-style-type: none"> <li>1. Contenu scientifique</li> <li>2. Présentation didactique</li> <li>3. Qualité du diaporama</li> </ol>	