

17-20 SEPTEMBRE

2012

ORÉEANS

SFSM

Société Française de Spectrométrie de Masse

SFSM

29èmes Journées Françaises de Spectrométrie de Masse

*Analyse structurale, Biologie
Environnement, Espace
Imagerie*

Instrumentation

Interactions non-covalentes

Mécanismes fondamentaux

Métabolomique, Glycomique, Lipidomique

Méthodes quantitatives

Petites molécules

Protéomique



JFSM 2012

Programme et Résumés

ORLÉANS

Centres de Conférences

17-20 Septembre 2012

29 èmes Journées Françaises de Spectrométrie de Masse

Mot de Bienvenue

Nous avons le plaisir de vous accueillir à Orléans, aux 29èmes Journées Françaises de Spectrométrie de Masse. Ces journées sont organisées sous l'égide de la Société Française de Spectrométrie de Masse. L'accent est mis sur la qualité du programme scientifique, de l'exposition et de l'accueil gastronomique et culturel.

Les membres du Conseil Scientifique et du Comité Local d'Organisation vous souhaitent la bienvenue au Centre de Conférences d'Orléans et s'efforceront, avec votre participation, de faire de ce congrès une réussite et un évènement mémorable pour tous les participants.

Les 29èmes Journées Françaises de Spectrométrie de Masse rassemblent une large communauté française de scientifiques en chimie, biochimie, sciences de la vie, pharmacologie et physique. Les participants appartiennent au CNRS, au CEA, à l'INSERM, à l'INRA, aux Universités, mais aussi à de grandes sociétés industrielles ainsi qu'à des sociétés d'instrumentation.

Ces journées auront l'ambition de traiter des domaines passionnants et variés tels que instrumentation et mécanismes fondamentaux ; petites molécules (médicaments, cosmétiques...) ; analyse structurale et biologie ; interactions non-covalentes ; protéomique, métabolomique, glycomique et lipidomique ; imagerie ; méthodes quantitatives ainsi qu'environnement et espace.

Ces journées se veulent un moment d'échanges, de partage des connaissances, de réflexion, de convivialité entre chercheurs de tous horizons afin de favoriser l'émergence de nouveaux projets et collaborations scientifiques interdisciplinaires centrés sur la spectrométrie de masse.

Les organisateurs.

TABLE DES MATIÈRES

Organisation	5
Liste des Exposants.....	6
Plan du Centre de Conférences.....	7
Informations Utiles.....	8
Informations Générales.....	9
Manifestations	11
Programme Synthétique	13
Programme Détailé	19
Conférences Inaugurales et de Clôture	29
Conférences Invitées	35
Communications Orales	53
Conférences du Club Jeunes.....	95
Communications par Affiches	101
Environnement, Espace	103
Petites molécules	117
Méthodes quantitatives	133
Interactions non-covalentes.....	147
Analyse structurale, Biologie	157
Protéomique.....	175
Imagerie.....	209
Métabolomique, Glycomique, Lipidomique.....	215
Instrumentation, Mécanismes réactionnels	227
Index des Auteurs.....	245
Liste des Participants.....	253

ORGANISATION

Comité Scientifique

Gérard Bolbach - IBI, Paris
Martine Cadène - CBM, Orléans
Brian T. Chait – The Rockefeller University
Pierre Gareil - ENSCP, Paris
Benoît Maunit - ICOA, Orléans

Estelle Pujos-Guillot - INRA, Clermont-Theix
Peter Roepstorff – Univ. of Southern Denmark
Guillaume van der Rest - LCP, Orsay
Joëlle Vinh - ESPCI, Paris

Comité Local d'Organisation

Martine Cadène - CBM, Orléans
Benoît Maunit - ICOA, Orléans
Martine Beaufour - CBM, Orléans
Christelle Briois - LPC2E, Orléans
Cyril Colas - CBM-ICOA, Orléans
Patrick Emond - Université de Tours

Laëtitia Fougère - ICOA, Orléans
Guillaume Gabant - CBM, Orléans
Catherine Guette - CHR Angers
Sandrine Lefevre - CHR Orléans
Patricia Legland - CBM, Orléans
Xavier Poisson - Technologie Servier, Orléans

Conseil d'Administration de la SFSM

Guillaume van der Rest - LCP, Orsay
Michel Salzet - LSMBFA, Lille
Jean Armengaud - CEA, Marcoule
Joëlle Vinh - ESPCI, Paris

William Buchmann - LAMBE, Évry
Hélène Lavanant - COBRA, Rouen
Estelle Pujos-Guillot - INRA, Clermont-Theix
Sandrine Sagan - UPMC, Paris
David Touboul - ICSN, Gif-sur-Yvette

Remerciements

Le Comité d'Organisation remercie chaleureusement ses partenaires financiers publics et industriels : le Centre de Biophysique Moléculaire, l’Institut de Chimie Organique et Analytique, le Conseil Général de la Région Centre, la Mairie d’Orléans, l’Université d’Orléans, le Centre National de la Recherche Scientifique, l’Observatoire des Sciences de l’Univers du Centre, l’Institut de Chimie des Substances Naturelles, l’Institut de Cancérologie de l’Ouest Paul Papin, le Centre Hospitalier Régional d’Orléans, l’Institut National de la Santé et de la Recherche Médicale, AB Sciex, Agilent Technologies, Bruker, Thermo Scientific et Waters.

Le Comité d'Organisation tient également à remercier Isabelle Frapart et Lucie Jaquillard pour leur participation à la préparation de ce Congrès, Marielle Rogeau pour le graphisme ainsi que Dior pour les Prix de Poster.

COMMUNICATIONS ORALES



LOCALIZATION OF NON-COVALENT PROTEIN-LIGAND BINDING SITES
BY TOP-DOWN MASS SPECTROMETRY
BASED ON VACUUM ULTRA-VIOLET (VUV) ACTIVATION

Francis Canon^{1,2}, Aleksandar Milosavljevic³, Guillaume van der Rest⁴, Matthieu Réfrégier¹, Christophe Nicolas¹, Pascale Sarni-Manchado⁵, Véronique Cheynier⁵, Laurent Nahon¹, Alexandre Giuliani^{1,6}

1 - SOLEIL, l'Orme des Merisiers, St Aubin, BP48, 91192 Gif sur Yvette Cedex, France

2 - INRA, UMR1324 Centre des Sciences du Goût et de l'Alimentation, F-21000 Dijon, France

3 - Institute of Physics Belgrade, University of Belgrade, Pregrevica 118, 11080 Belgrade, Serbia

4 - Laboratoire DCMR UMR9128 PALAISEAU cedex, France

5 - INRA, UMR 1083 Sciences pour l'Œnologie, 2 place Viala, F-34060 Montpellier, France

6 - Cepia, Institut National de la Recherche Agronomique (INRA), BP 71627, 44316 Nantes Cedex 3, France

Since the last decade, numerous researches have shown that many proteins are completely or partially disordered in their functional state. These observations question the usual paradigm in biology establishing that a well-defined three-dimensional structure is a prerequisite for the function of a protein. The high flexibility of these proteins, called Intrinsically Disordered Proteins (IDPs), gives them advantages to carry out their function and in particular to interact with their partners. Therefore, these proteins are able to interact with different and/or several partners leading to complex mixture. The structural study of such mixtures and flexible objects with classical bio-structural techniques is still challenging and time consuming. Therefore, the study of these proteins requires additional techniques. Top-down approaches using electron capture dissociation have demonstrated their ability to provide information on the primary structure of the full protein. They are also able to identify the protein binding site with its ligand. However, the sequences of IDP are particularly rich in proline residues whose cyclic ring precludes the formation of *c*- and *z*-type ions. Here, we present a method based on the coupling of VUV-synchrotron radiation and mass spectrometry in order to localize the noncovalent binding site of B2 3'O-gallate, a ligand tannin, on IB5, a human basic salivary proline-rich proteins (PRPs). PRPs belong to IDPs and their main function is to scavenge tannins. Tannins are harmful substances with anti-nutritional effects, which are widespread in plant-based foods.

Firstly, we have compared the effect of four wavelengths 193 (6.4 eV), 157 (7.8 eV), 94 (13.2 eV) and 77.5 nm (16 eV) with classical MS/MS techniques such as CID and ECD on the fragmentation of IB5. Secondly, we have studied the noncovalent binding site of B2 3'O-gallate on IB5 using VUV-radiation at 77.5 nm.

Regarding the fragmentation of IB5, our results show two different regimes of fragmentation as a function of the wavelengths. Below the threshold of the IB5 photoionization, we observed only *a*- and *x*-type fragment, while above, all types of fragments are generated. The best sequence coverage from all experiments has been obtained with VUV-excitation at 77.5 nm. Regarding the localization of the binding site on IB5, we have identified almost fifty fragments still linked to the ligand. Finally, our results allow to localize the noncovalent binding site of B2 3'OG on IB5.