

# **Spectroscopie d'intermédiaires réactifs en phase gaz par couplage du LEL CLIO avec un spectromètre de masse à transformée de Fourier**

*Philippe Maître, Sophie Le Caër, Aude Simon,  
Joël Lemaire, Hélène Mestdagh, Michel Heninger, Gérard Mauclair, Pierre Boissel*  
Laboratoire de Chimie Physique (CNRS-UMR-8000)  
Université de Paris XI, Bâtiment 350  
91405 Orsay Cedex, FRANCE  
*Jean-Michel Ortega, Rui Prazeres, François Glotin,*  
CLIO-LURE  
Université de Paris XI, Bâtiment 209D, BP 34  
91898 Orsay Cedex, FRANCE

## Résumé :

Les études d'ions moléculaires et d'agrégats en phase gaz fournissent une compréhension étendue de leurs propriétés physiques et chimiques. Elles sont d'un grand intérêt en chimie, en astrophysique ainsi qu'en biochimie. La spectrométrie de masse à résonance cyclotronique ionique à transformée de Fourier (FT-ICR-MS) permet de piéger, de sélectionner et d'identifier avec précision les différentes molécules, préalablement ionisées, présentes dans une cellule, au sein de laquelle on étudie différentes réactions. Cette méthode permet d'obtenir une résolution et une précision très élevée sur la mesure des masses. Chaque ion étant caractérisé par sa fréquence cyclotron, il suffit de calculer la transformée de Fourier du courant induit par les ions (après excitation) pour obtenir le spectre de masse complet. Par contre, celui-ci ne permet pas de distinguer entre les différents isomères d'une molécule. Or, on sait que sa conformation détermine la réactivité d'une espèce, particulièrement en ce qui concerne les grosses molécules telles que celles que l'on rencontre dans les processus biologiques. Seul, le spectre de vibration permet de distinguer ces différents isomères, d'où la nécessité d'une spectroscopie infrarouge. Cette spectroscopie ne peut pas se faire par les méthodes habituelles étant donné la très faible absorption dans un milieu dilué. La solution consiste à irradier avec une source très puissante afin que des cycles successifs (absorption – redistribution vibrationnelle) finissent par faire éclater l'ion (MPD = multiphoton dissociation). L'ion parent et ses fragments sont détectés grâce à la très haute sensibilité du FT-ICR-MS. Malgré la non-linéarité du processus de MPD, on obtient des spectres infrarouges qui peuvent être comparés aux calculs théoriques effectués sur les configurations de basse énergie de l'ion. La source infrarouge suffisamment puissante et accordable sur un large spectre est constituée d'un LEL infrarouge. Avec le LEL CLIO et un spectromètre fabriqué au LCP, nous avons montré que la conformation de divers intermédiaires de réaction pouvait être caractérisée par cette méthode. Il s'agit là d'une des applications les plus spécifiques des LEL infrarouge et qui va se développer dans tous les centres du même type. Pour CLIO, l'étape suivante est de s'intéresser à des molécules d'intérêt biologiques, en relation avec des groupes spécialisés ainsi que de se procurer un FT-ICR-MS commercial pouvant produire un champ magnétique de 7 T (au lieu de 1.2 actuellement) afin d'augmenter la résolution en masse et la limite haute du domaine de masse accessible.