

Fragmentation de l'estrone électro-ionisée

Stéphane Bouchonnet, Sophie Bourcier, Christophe
Genty, Michel Sablier

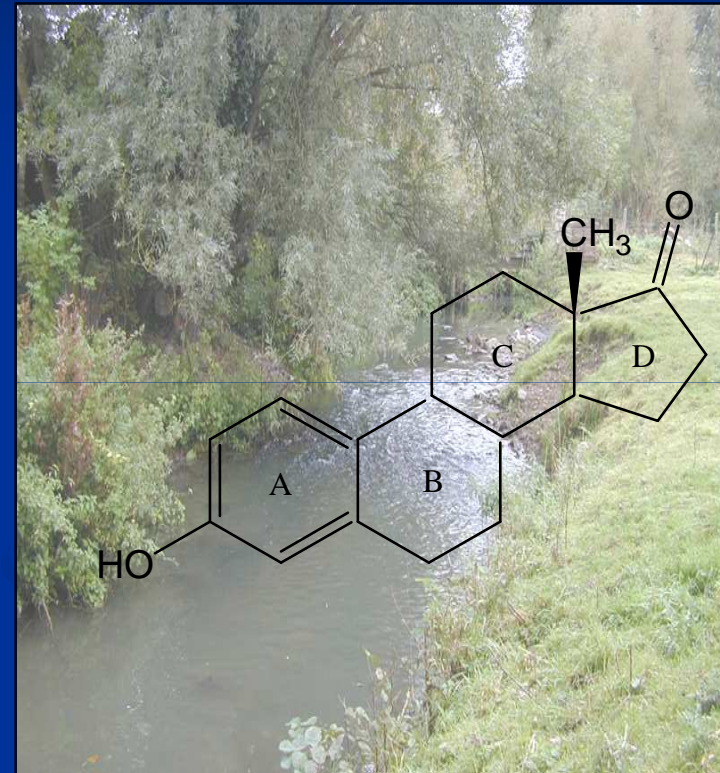
Laboratoire des Mécanismes Réactionnels, UMR
CNRS 7651 – Ecole Polytechnique

Plan de l'exposé

- Pourquoi s'intéresser à l'estrone ?
- Pourquoi étudier l'estrone en ionisation électronique ?
- Mécanismes de fragmentation – Structures des principaux ions fragments
- Perspectives

L'estrone (E1)

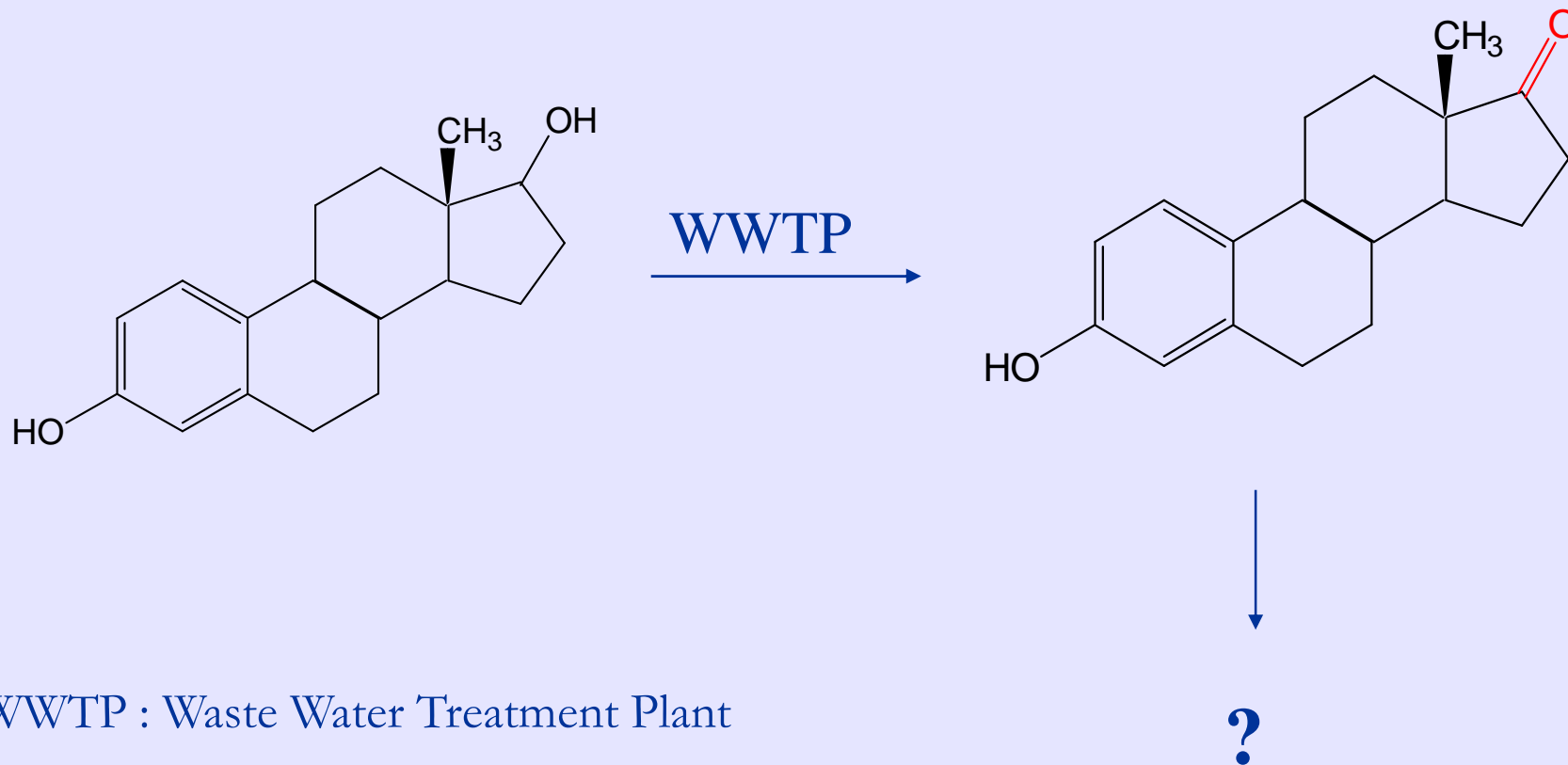
1. Perturbateur endocrinien avéré
2. E1 détectée en abondance dans nos milieux aquatiques
3. Parmi les P.E. les plus biologiquement actifs
4. Produit de dégradation de l'estradiol



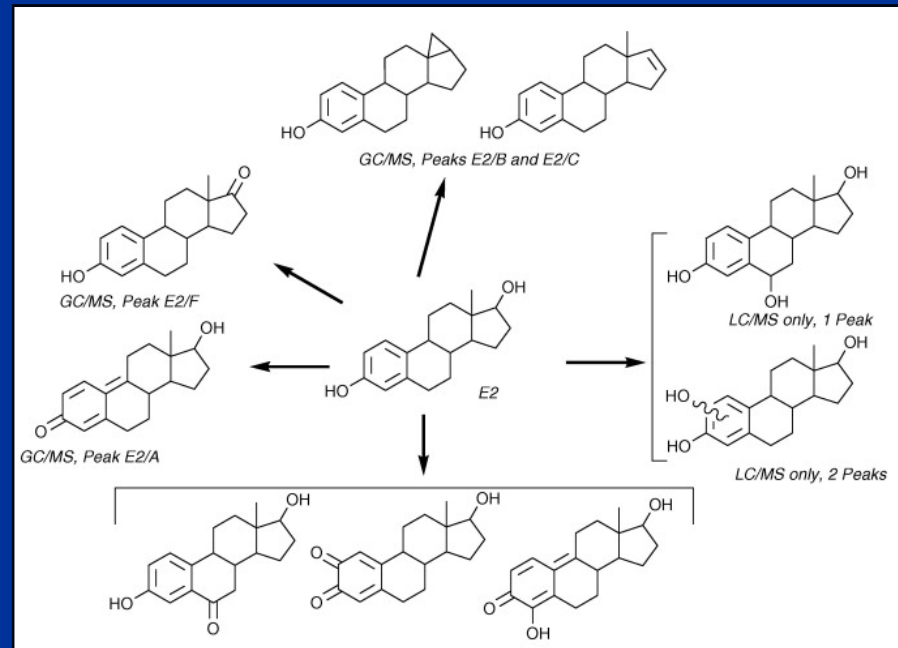
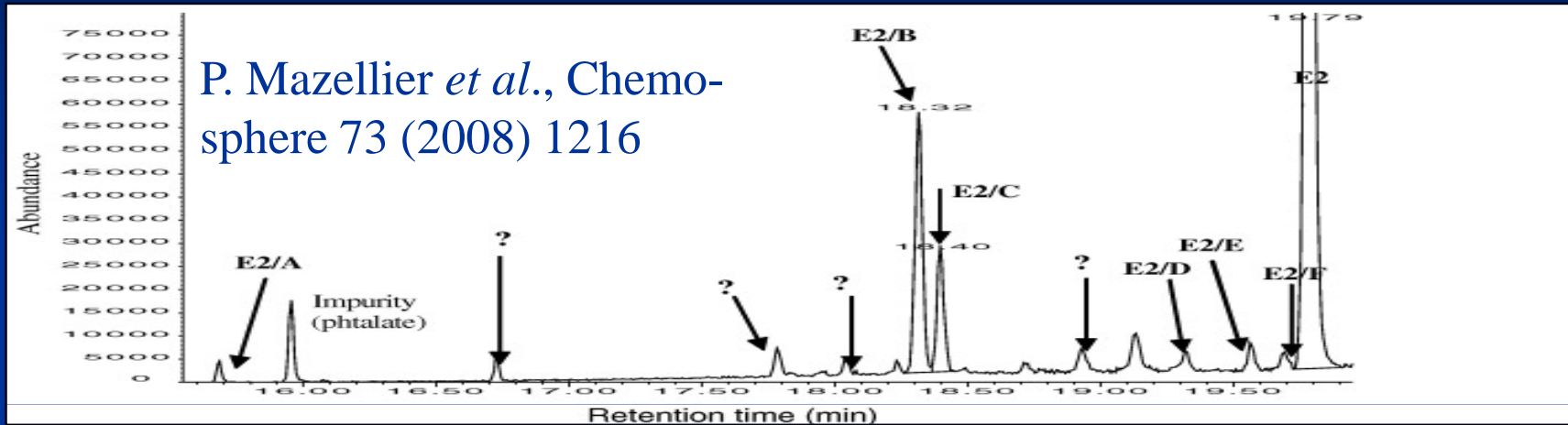
Etude préliminaire dans un contexte plus général de modélisation de la dégradation de E1

Dégradation des phéno-œstrogènes

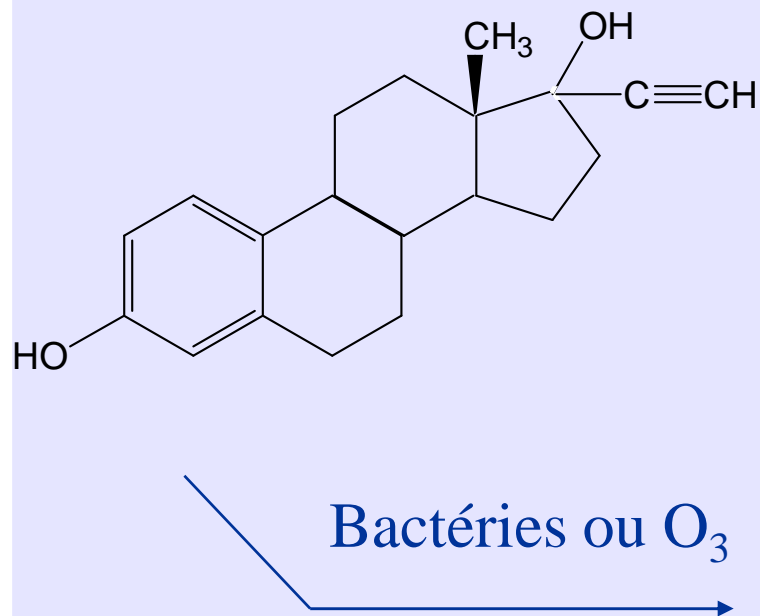
Etat de l'art 2009



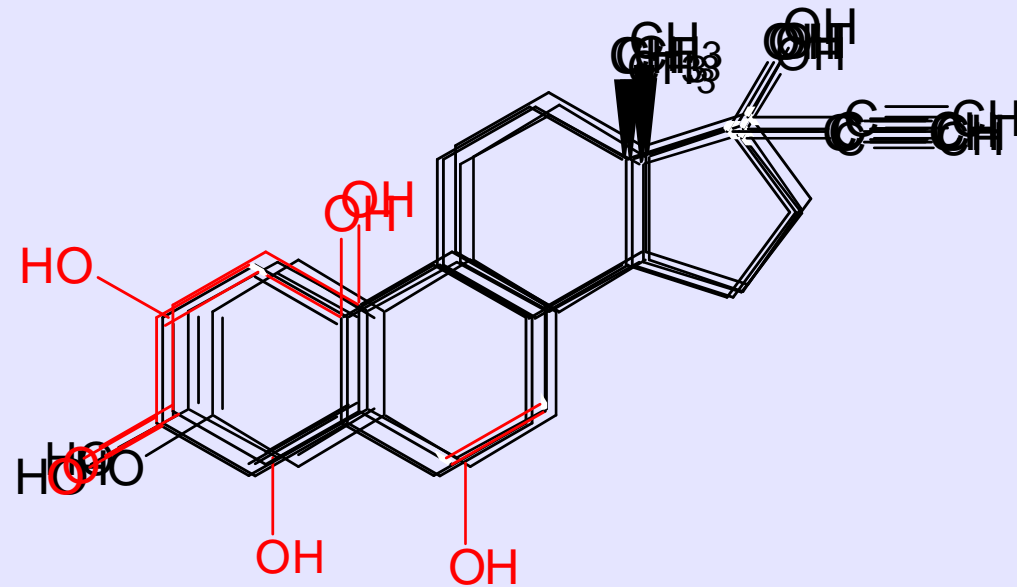
Dégradation des phéno-œstrogènes - Etat de l'art 2009



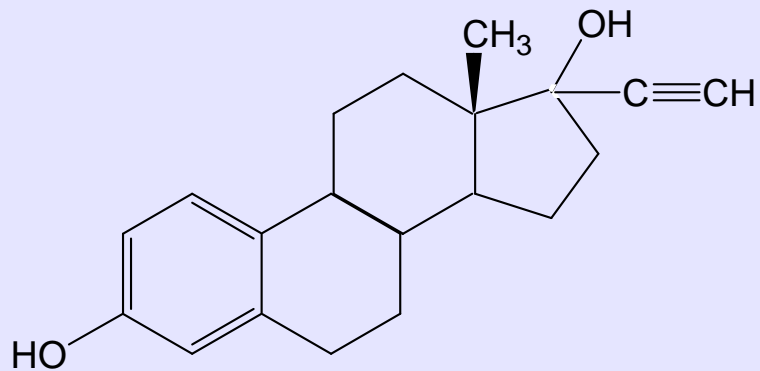
Dégradation des phéno-œstrogènes - Etat de l'art 2009



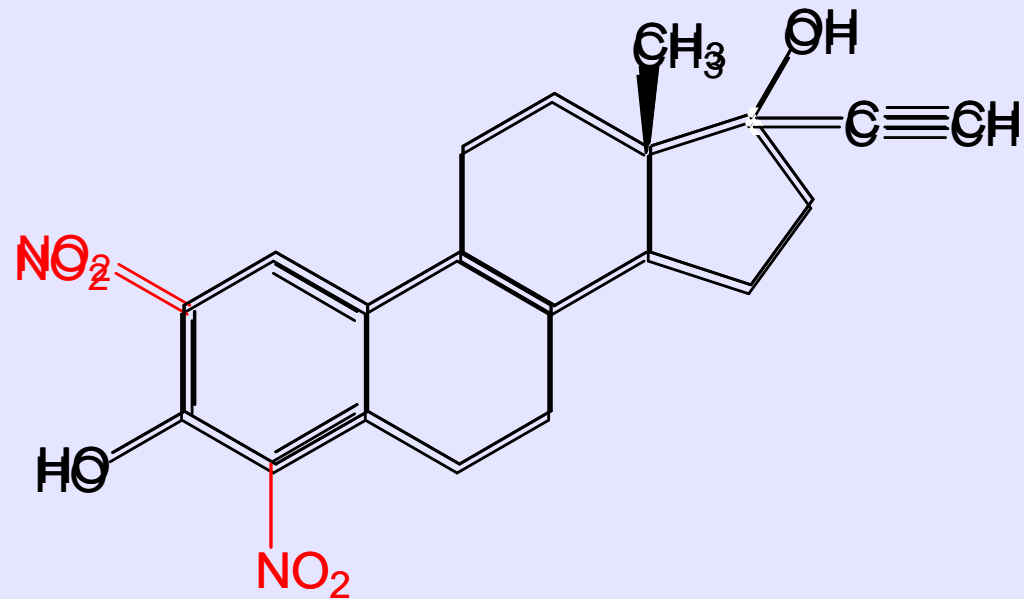
Bactéries ou O₃



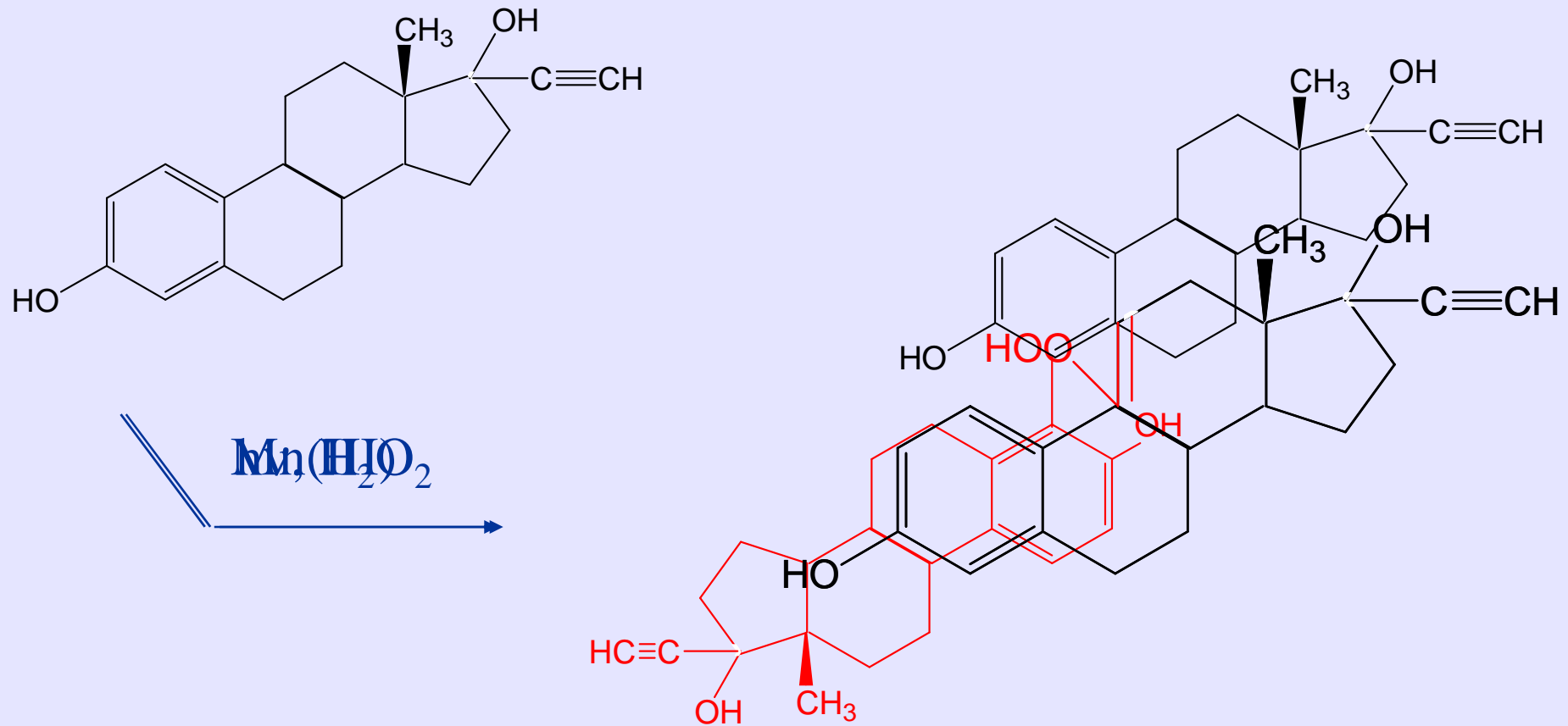
Dégradation des phéno-œstrogènes - Etat de l'art 2009



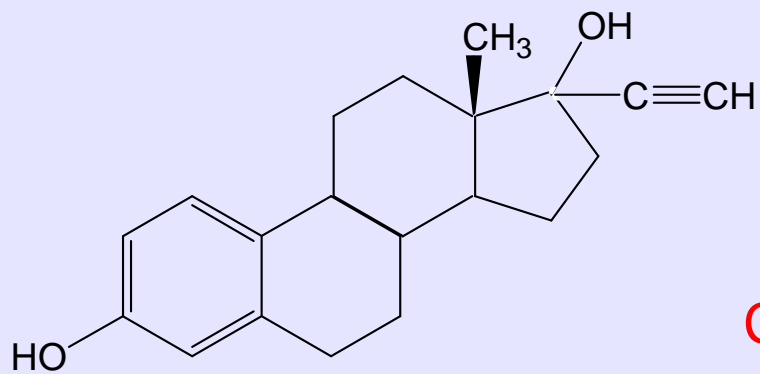
Bactéries



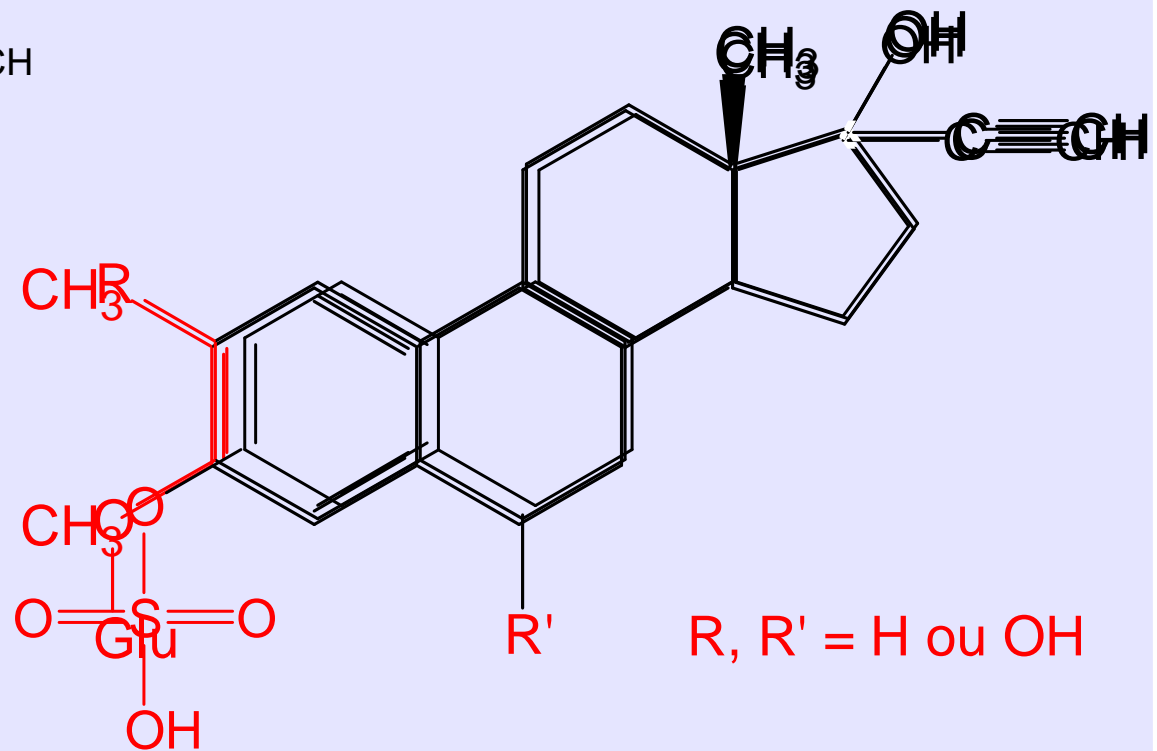
Dégradation des phéno-œstrogènes - Etat de l'art 2009



Dégradation des phéno-œstrogènes - Etat de l'art 2009



Bactéries ou
micro-algues



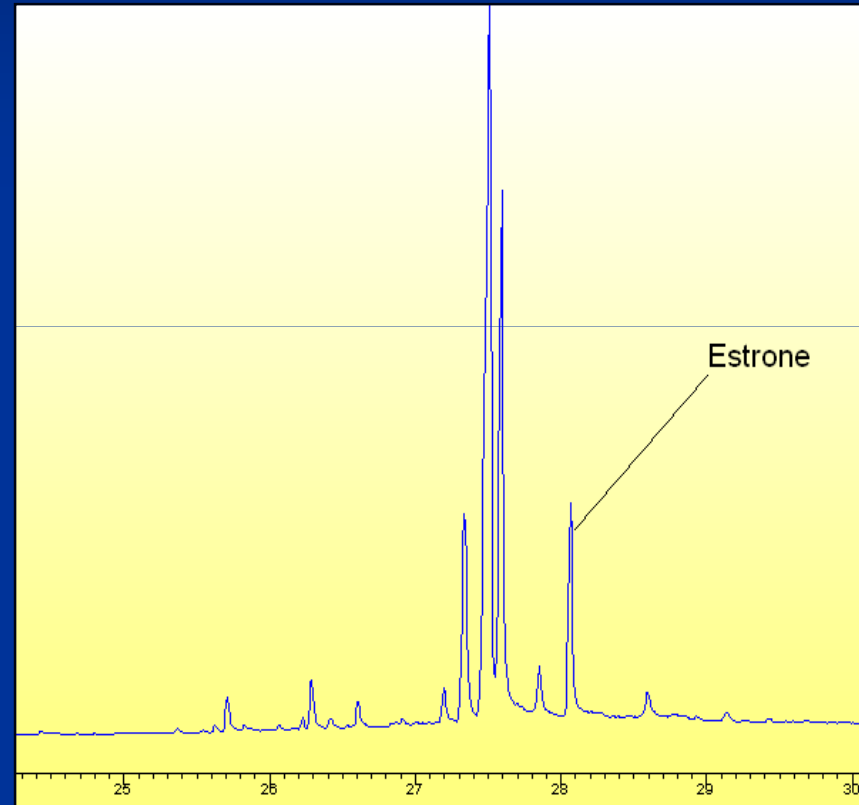
Limites des études sur la dégradation des phéno-œstrogènes

1. Molécules très peu solubles dans l'eau => trop peu d'échantillon pour RMN ou cristallographie
2. Les structures proposées sont rarement démontrées, elles sont le plus souvent basées sur les poids moléculaires et les temps de rétention en GC-MS ou en LC-MS

Les produits de transformation ne perturbent pas ou peu l'activité endocrinienne mais qu'en est-il de leur toxicité ?

Pourquoi l'ionisation électronique ?

1. Parce que les produits de dégradation de l'estrone ne sont peut-être pas aussi polaires que E1 elle-même
2. Parce que l'EI fournit beaucoup d'informations structurales



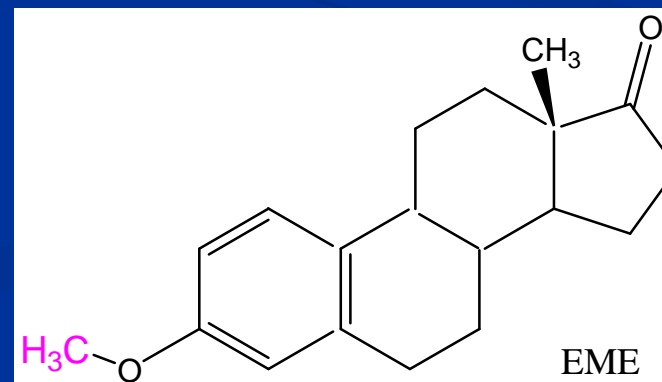
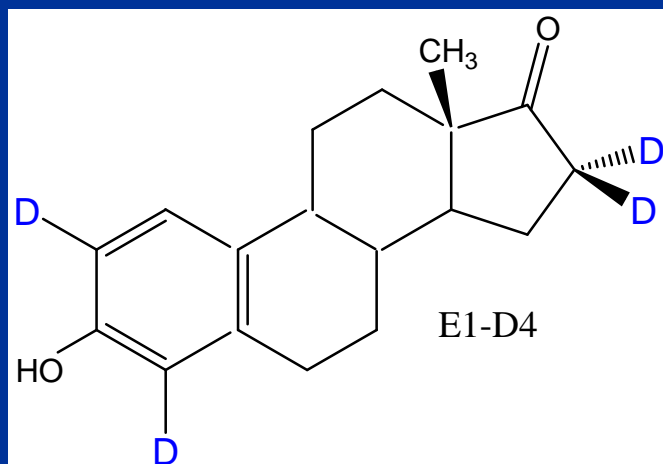
Outils à disposition

GC-MS trappe ionique => MSⁿ

Spectromètre de masse à champ magnétique => mesures haute résolution

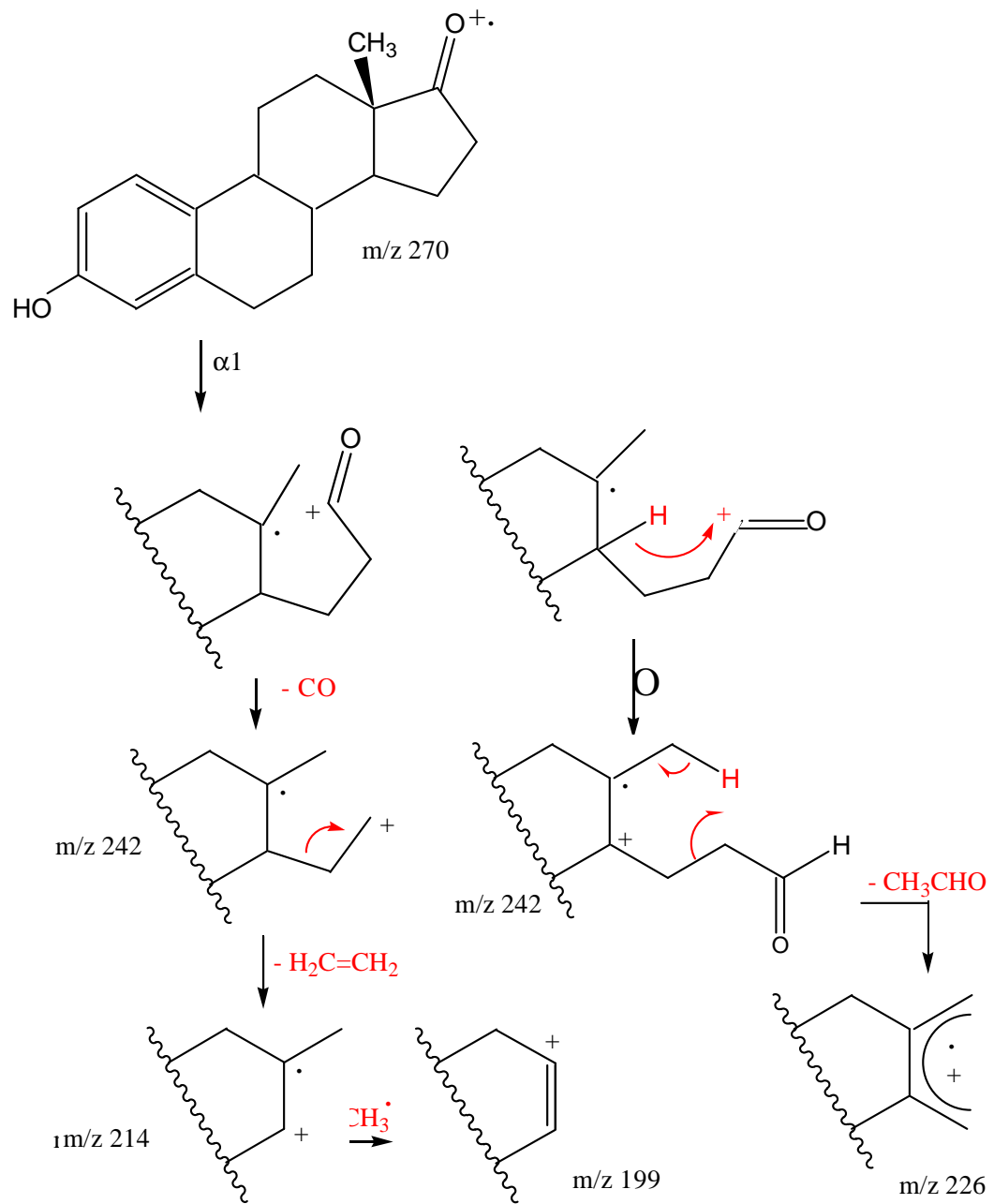
Produits « marqués »

Parent ion (m/z)	Activation energy (V)	Main daughter ion(s) (m/z)
270	0.8	242, 226, 213, 199, 185, 172, 157, 146, 133, 131
242	0.8	213, 199, 185, 159, 157
214	0.4	213, 199, 185, 157
213	0.6	211, 197, 185, 157
185	0.4	170, 159, 157
172	0.8	170, 169, 144

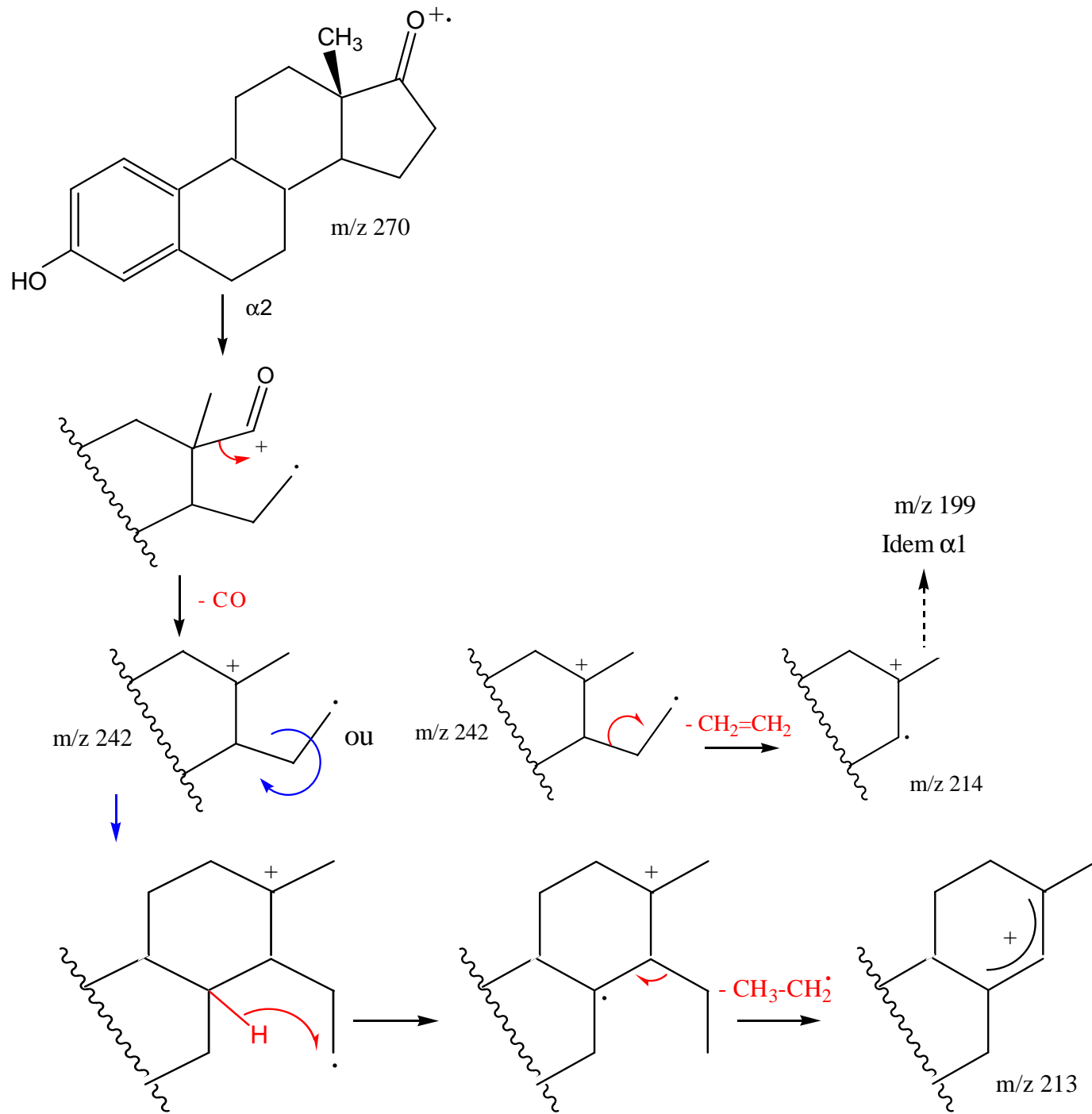


Compilation des résultats

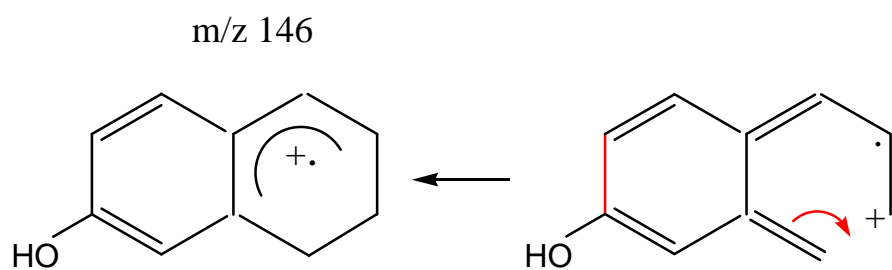
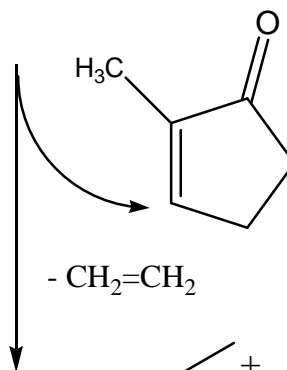
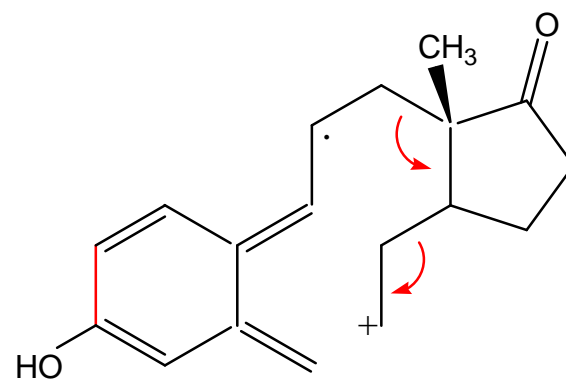
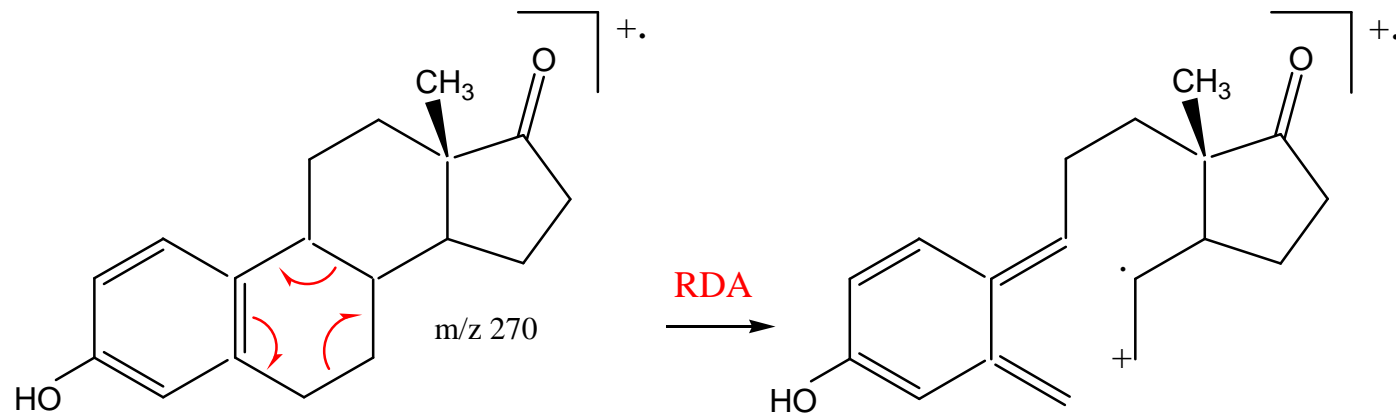
E1	E1 HR	Formule	E1-D ₄	EME
270 (100)	270.1615	$C_{18}H_{22}O_2$	274	284
242 (7)	242.1680	$C_{17}H_{22}O$	246	256
226 (6)	226.1356	$C_{16}H_{18}O$	228	240
214 (9)	214.1359	$C_{15}H_{18}O$	216	228
213 (20)	213.1279	$C_{15}H_{17}O$	215	227
199 (8)	199.1123	$C_{14}H_{15}O$	201	213
185 (49)	185.0964	$C_{13}H_{13}O$	187	199
			189	
172 (30)	172.0887	$C_{12}H_{12}O$	174	186
159 (14)	159.0812	$C_{11}H_{11}O$	162	173
157 (16)	157.0653	$C_{11}H_9O$	160	171
			159	
146 (26)	146.0732	$C_{10}H_{10}O$	148	160
133 (9)	133.0653	C_9H_9O	135	147
131 (11)	131.0497	C_9H_7O	133	145



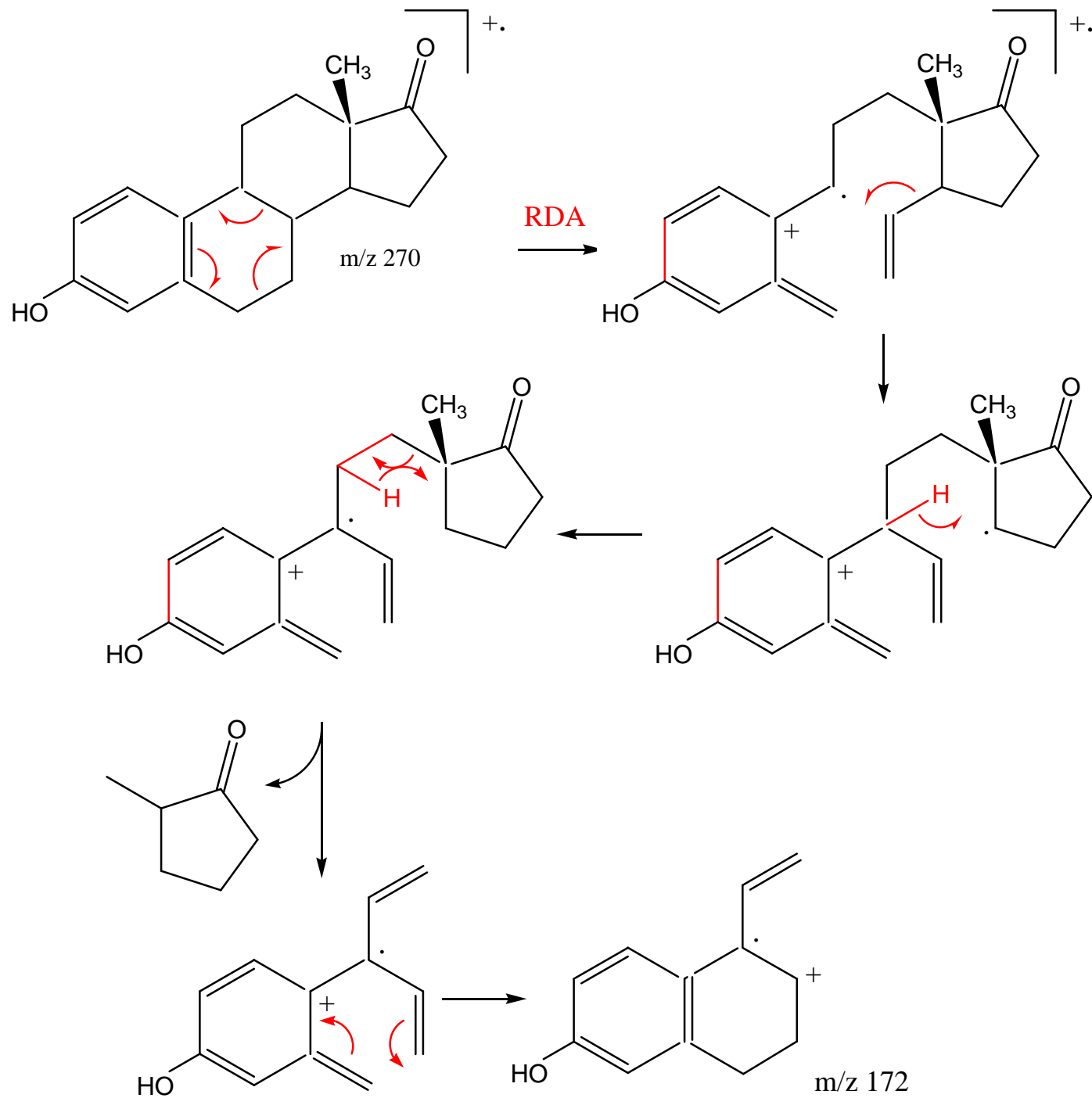
E1	E1-D ₄	EME
270 (100)	274	284
242 (7)	246	256
226 (6)	228	240
214 (9)	216	228
213 (20)	215	227
199 (8)	201	213
185 (49)	187	199
	189	
172 (30)	174	186
159 (14)	162	173
157 (16)	160	171
	159	
146 (26)	148	160
133 (9)	135	147
131 (11)	133	145



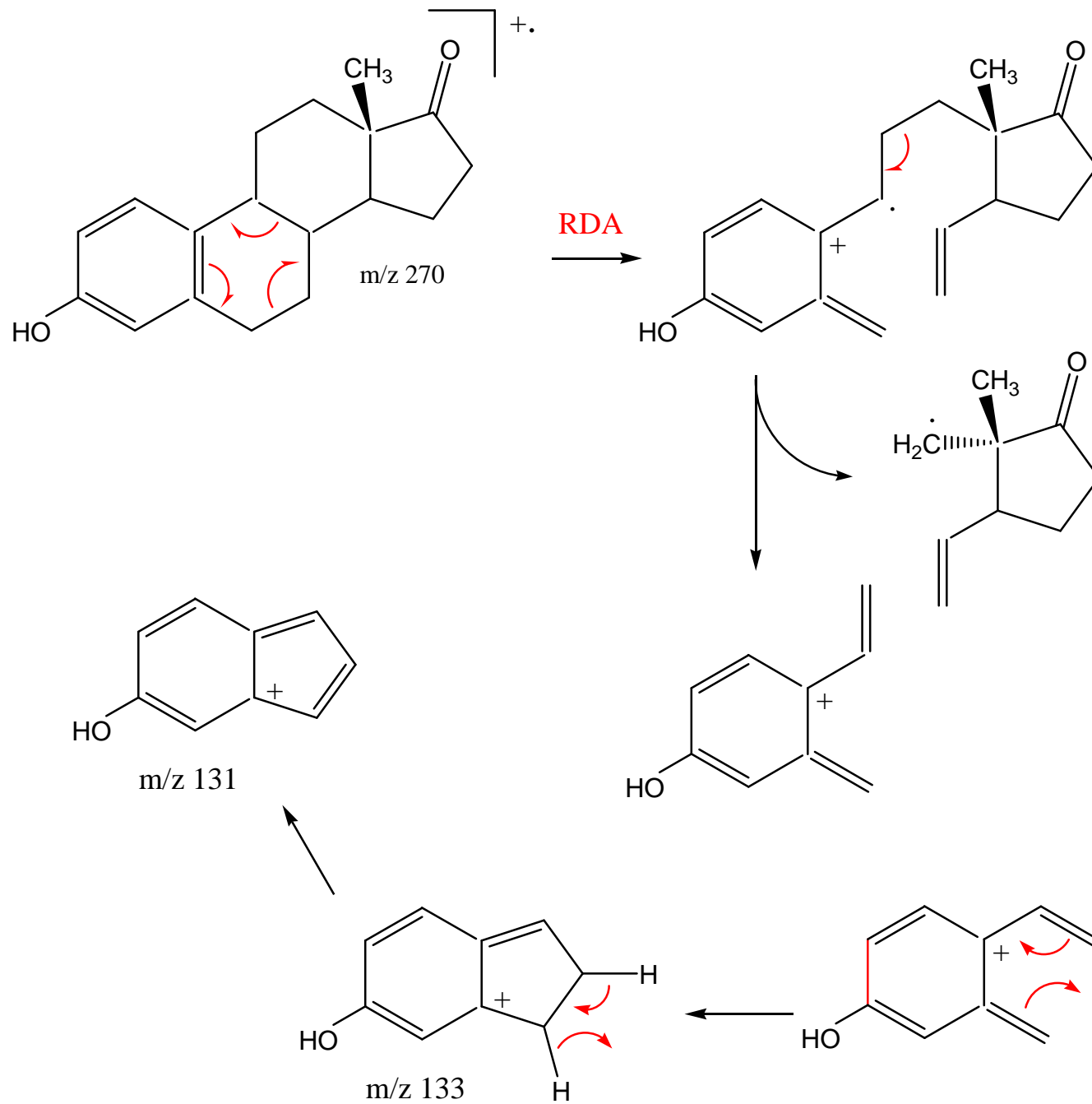
E1	E1-D ₄	EME
270 (100)	274	284
242 (7)	246	256
226 (6)	228	240
214 (9)	216	228
213 (20)	215	227
199 (8)	201	213
185 (49)	187	199
	189	
172 (30)	174	186
159 (14)	162	173
157 (16)	160	171
	159	
146 (26)	148	160
133 (9)	135	147
131 (11)	133	145



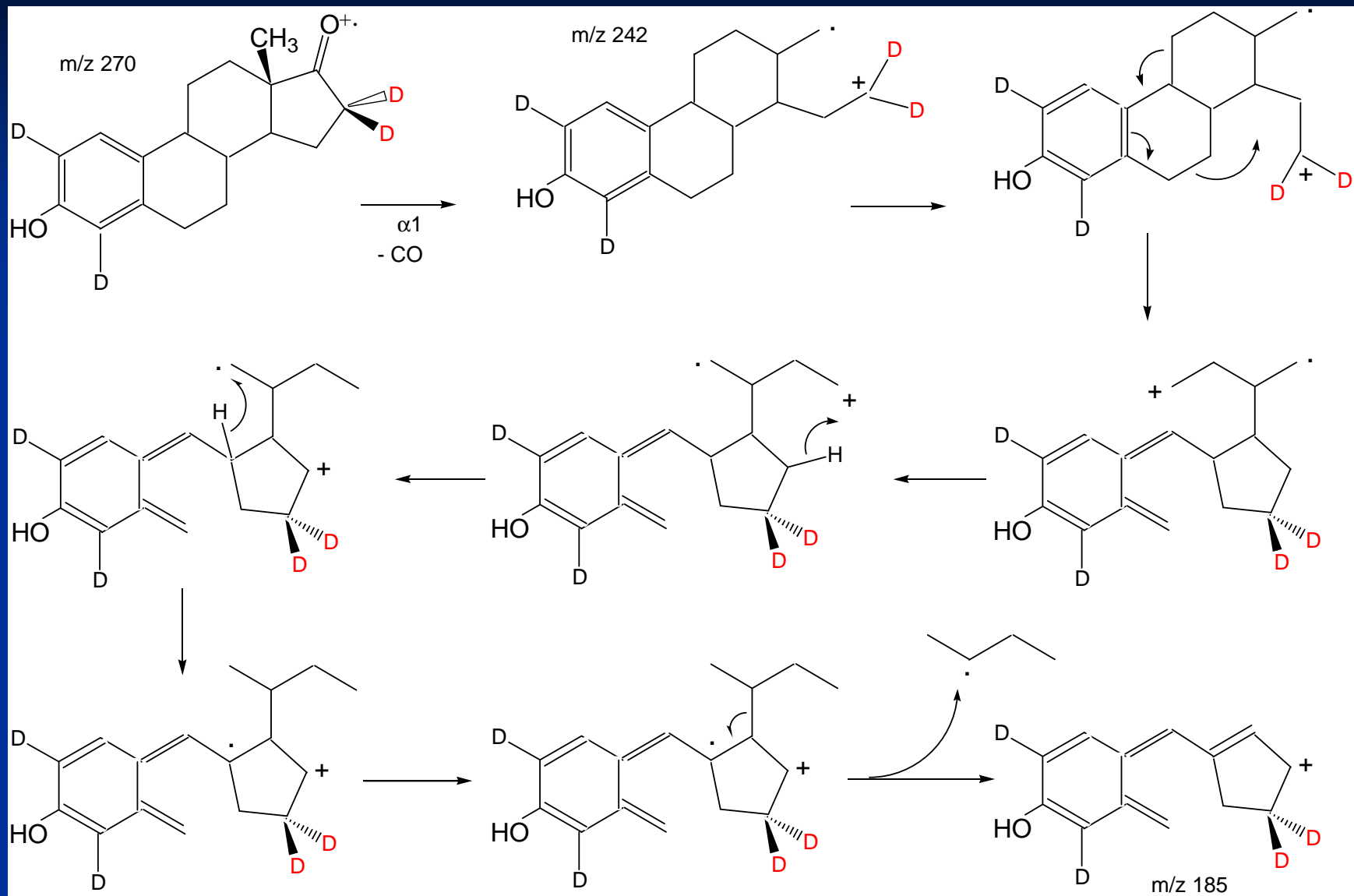
E1	E1-D ₄	EME
270 (100)	274	284
242 (7)	246	256
226 (6)	228	240
214 (9)	216	228
213 (20)	215	227
199 (8)	201	213
185 (49)	187	199
	189	
172 (30)	174	186
159 (14)	162	173
157 (16)	160	171
	159	
146 (26)	148	160
133 (9)	135	147
131 (11)	133	145

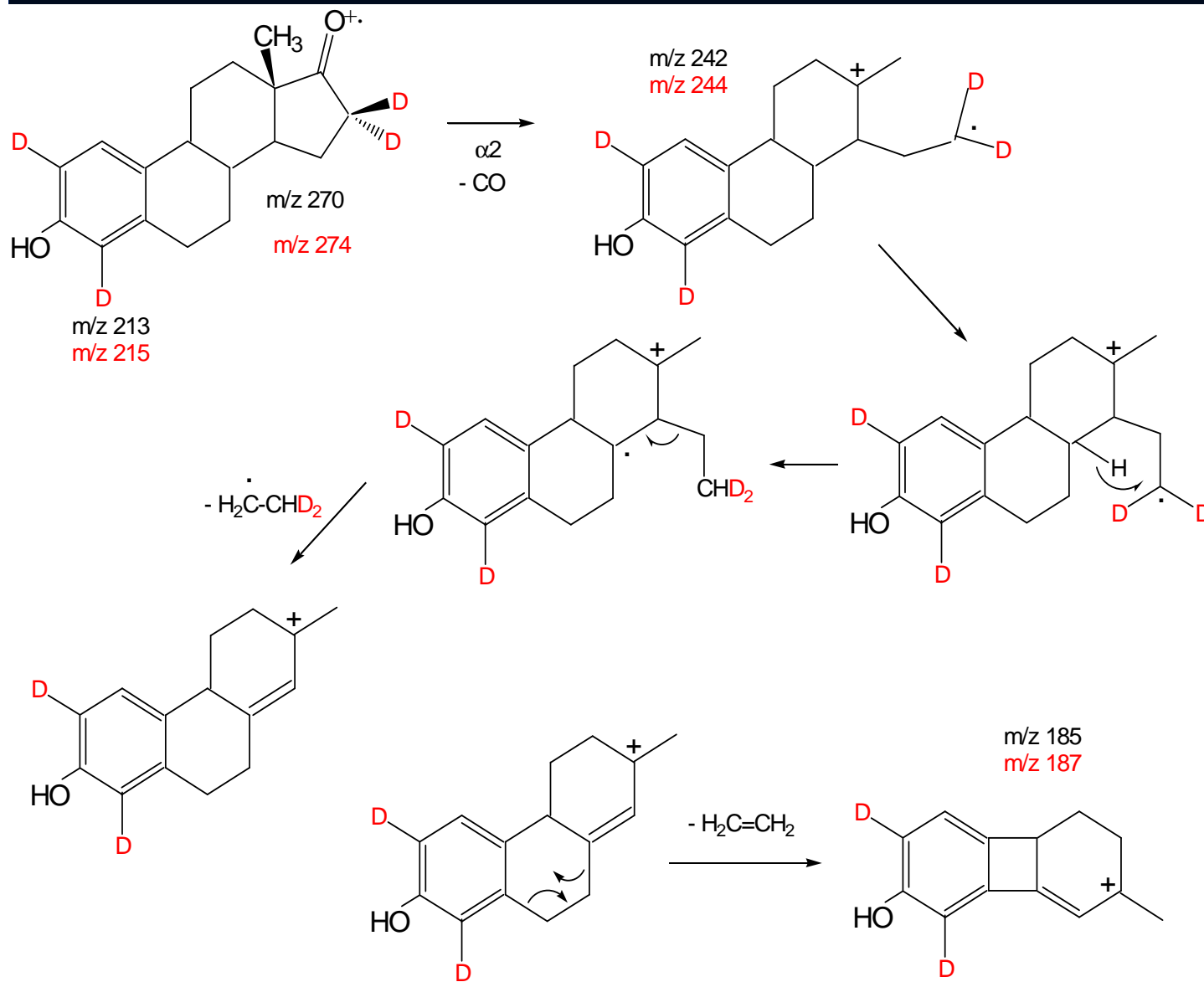


E1	E1-D ₄	EME
270 (100)	274	284
242 (7)	246	256
226 (6)	228	240
214 (9)	216	228
213 (20)	215	227
199 (8)	201	213
185 (49)	187	199
	189	
172 (30)	174	186
159 (14)	162	173
157 (16)	160	171
	159	
146 (26)	148	160
133 (9)	135	147
131 (11)	133	145

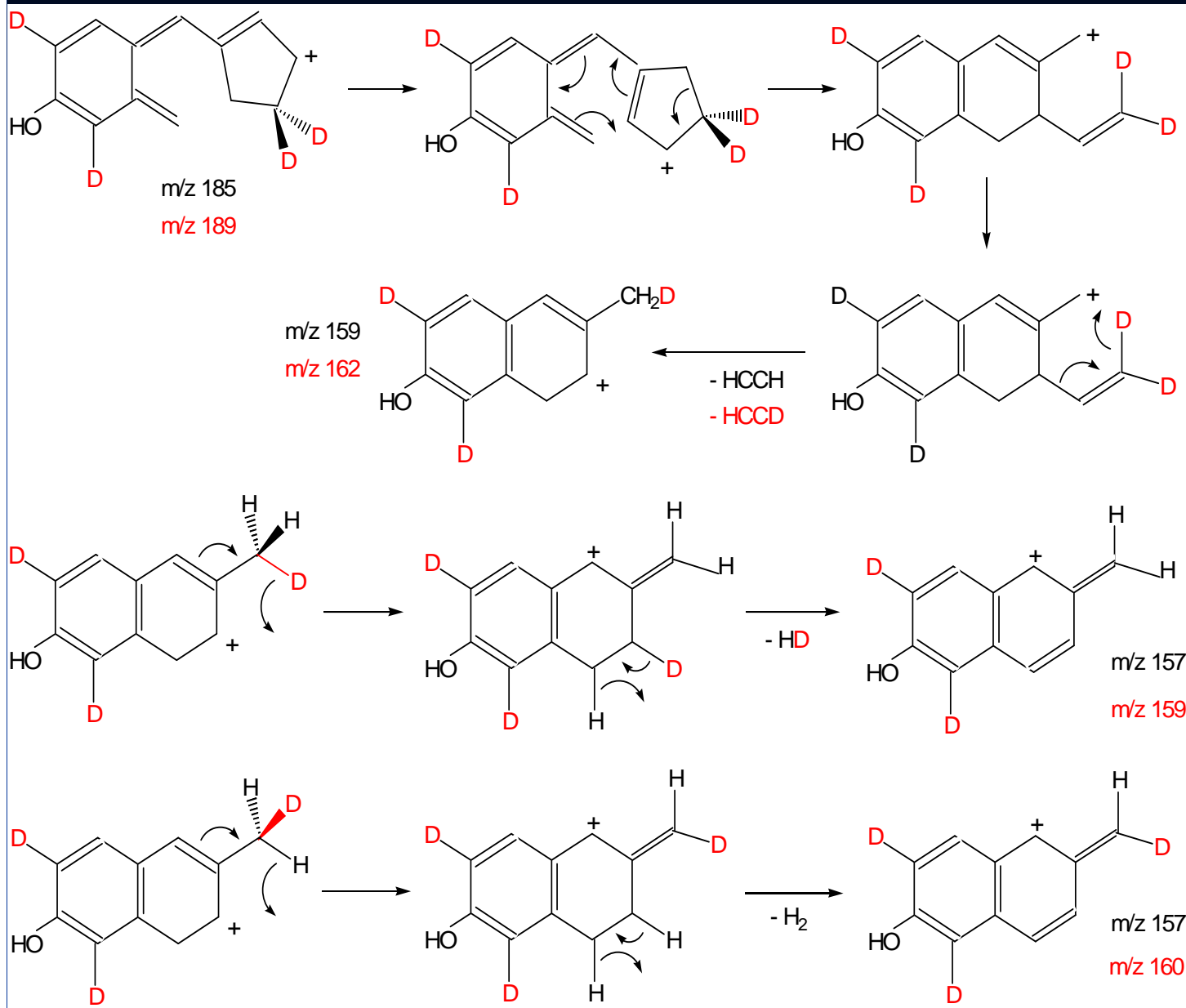


E1	E1-D ₄	EME
270 (100)	274	284
242 (7)	246	256
226 (6)	228	240
214 (9)	216	228
213 (20)	215	227
199 (8)	201	213
185 (49)	187	199
	189	
172 (30)	174	186
159 (14)	162	173
157 (16)	160	171
	159	
146 (26)	148	160
133 (9)	135	147
131 (11)	133	145



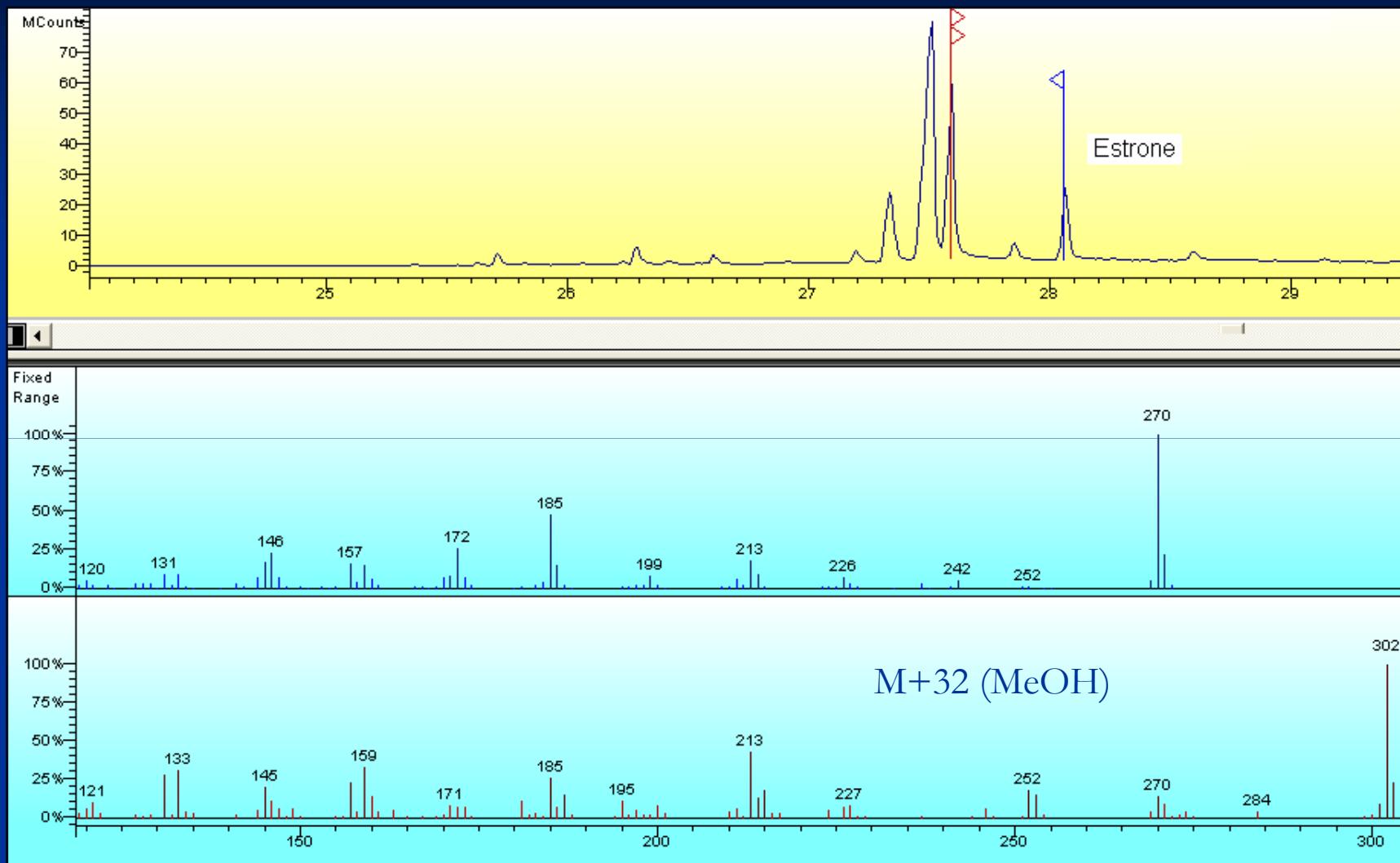


E1	E1-D ₄	EME
270 (100)	274	284
242 (7)	246	256
226 (6)	228	240
214 (9)	216	228
213 (20)	215	227
199 (8)	201	213
185 (49)	187	199
	189	
172 (30)	174	186
159 (14)	162	173
157 (16)	160	171
	159	
146 (26)	148	160
133 (9)	135	147
131 (11)	133	145

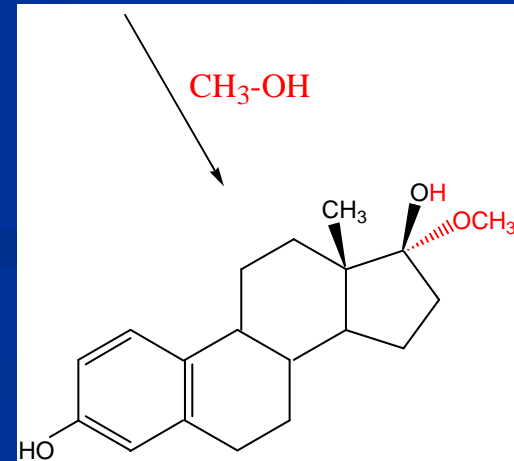
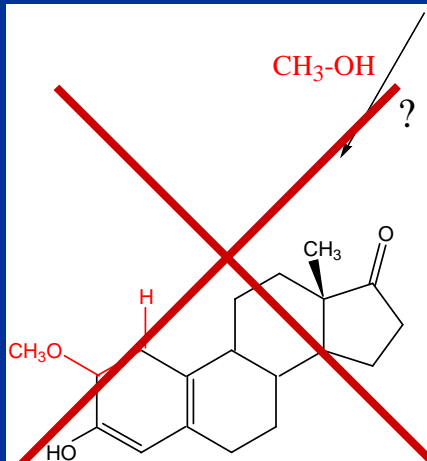
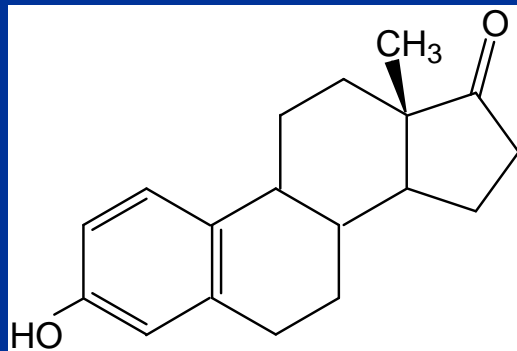
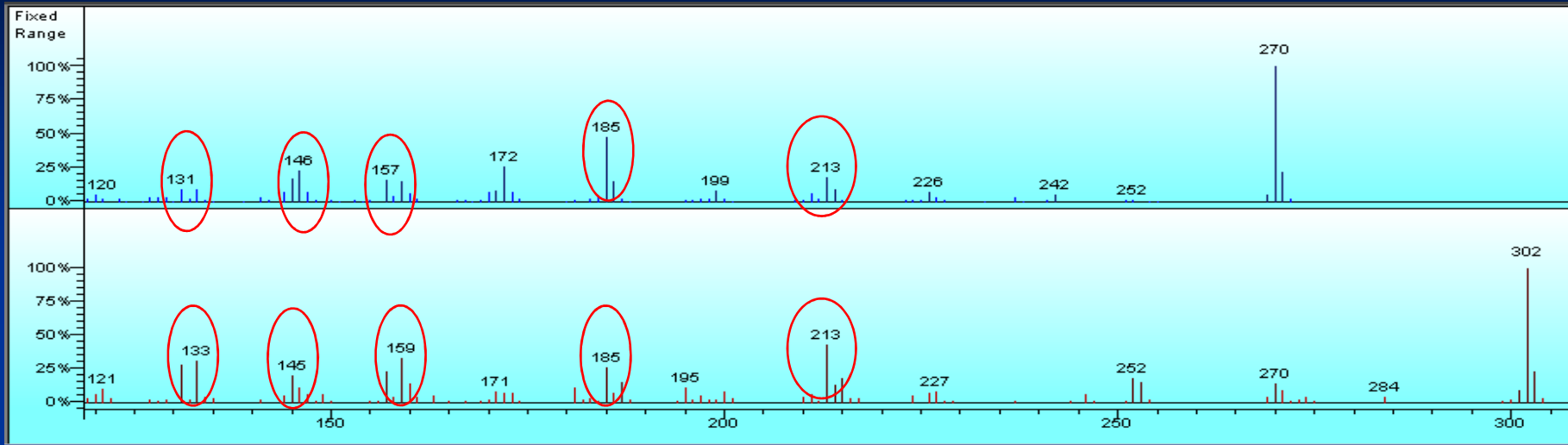


E1	E1-D ₄	EME
270 (100)	274	284
242 (7)	246	256
226 (6)	228	240
214 (9)	216	228
213 (20)	215	227
199 (8)	201	213
185 (49)	187	199
	189	
172 (30)	174	186
159 (14)	162	173
157 (16)	160	171
	159	
146 (26)	148	160
133 (9)	135	147
131 (11)	133	145

Perspectives



Perspectives



Merci à

Michel Sablier,

Sophie Bourcier,

Christophe Genty,

Equipe **Ecotoxicologie Analytique**

Laboratoire des Mécanismes Réactionnels

Ecole Polytechnique

Merci pour votre attention