

G.A.M.S.

## Commission de spectrométrie de masse

### Physicochimie des ions organiques en phase gazeuse

Au cours de l'année universitaire 1981-1982 sont prévues 4 Journées intitulées « Physicochimie des ions organiques en phase gazeuse ». Il s'agira de mises au point sur deux aspects théorique et technologique de ce thème général.

Les 2 premières journées seront destinées à familiariser le chimiste et le biochimiste avec les notions d'orbitales moléculaires et de cinétique des réactions unimoléculaires.

Deux autres journées seront consacrées aux apports technologiques dans le domaine de l'ionisation et dans celui de l'analyse.

● 1<sup>re</sup> Journée, 7 décembre 1981 :

*Utilisation des orbitales moléculaires à la détermination de la structure et de la réactivité des ions organiques.*

● 2<sup>e</sup> Journée, prévue en mars 1982 :

*Énergie interne des ions organiques : isomérisation, théorie statistique des fragmentations, énergie de séparation des fragments.*

● 3<sup>e</sup> Journée, prévue en juin 1982 :

*Les différentes méthodes d'ionisation.*

● 4<sup>e</sup> Journée, prévue en octobre 1982 :

*Application des techniques nouvelles de la spectrométrie de masse à l'analyse.*

### Première Journée : Lundi 7 décembre 1981

Elle aura lieu à l'École Polytechnique (Amphithéâtre Carnot), à Palaiseau, sur le thème :

*Utilisation des orbitales moléculaires (O.M.) à la détermination de la structure et de la réactivité des ions organiques.*

#### Programme

9 h, Accueil des participants.

9 h 10, J. P. Malrieu (Lab. de physique quantique, Univ. Paul Sabatier, Toulouse) :

*Les diverses méthodes de calcul d'orbitales moléculaires empirique, semi-empirique, et « ab initio » ; leurs avantages et leurs limites.*

9 h 55, Discussion.

10 h 15, G. Pfister-Guillouzo (Lab. de chimie organique physique, Univ. de Pau) :

*Utilisation des méthodes de calcul d'O.M. dans l'interprétation des spectres de photoélectrons ; déduction de structures.*

11 h, Discussion et pause.

11 h 20, Nguyen Trong Anh (Lab. de chimie théorique, Univ. des Sciences d'Orsay) :

*Applications des diagrammes de corrélation de type Woodward-Hoffman à l'interprétation des fragmentations en spectrométrie de masse.*

12 h 15, Discussion.

12 h 30, Déjeuner au self-service de l'École Polytechnique.  
14 h, G. Bouchoux (Lab. de synthèse organique, École Polytechnique, Palaiseau) :  
*Interprétation de mécanismes de fragmentation à l'aide de calculs S.C.F. (champ autocohérent).*

14 h 15, Discussion.  
15 h 05, Exposition de communications par affiches.

Pour les inscriptions à cette Journée, s'adresser au G.A.M.S., 88, bd Malesherbes, 75108, Paris. Tél. : 563-93-04.

## L'automatisation de l'analyse en process

Le G.A.M.S. Sud-Est organise, sur ce thème, avec la participation de la Société de Chimie Industrielle (Groupe d'ingénierie), une réunion qui se tiendra, le 12 novembre 1981, au Centre de Recherches ELF/Aquitaine de Solaize.

Le programme provisoire de cette Journée est le suivant :  
9 heures, Accueil des participants par la Direction du Centre d'ELF-Solaize.

- *L'ingénierie analytique industrielle*, par M. Coutagne (Rhône-Poulenc Industrie, Centre de recherches de Décines).
- *Application de la spectrométrie de masse à des dosages en ligne d'effluents de vapocraqueurs. Échantillonnage d'un mélange triphasique*, par M. Amblard (Laboratoire de recherches ELF-Solaize).
- *Application d'un analyseur à détection électrochimique par pile de concentration au contrôle en ligne de mélanges gazeux*, par M. O. Rochefort (PCUK, Centre de Recherches de Lyon-Pierre Bénite).
- *Amélioration des performances d'une colonne à distiller par l'utilisation d'un chromatographe en ligne*, par M. Viro, Mme Hauss et M. Dussert (PCUK Jarrie).

- *Analyse en ligne d'H<sub>2</sub>S et de mercaptans par méthode électrochimique dans les essences et kérosènes*, par M. Caujolle (Laboratoire ELF-Solaize).

Visite de Laboratoires.

13 heures, Déjeuner (participation 80 F).

Après-midi, Visite de la raffinerie de Feysin.

Toute information complémentaire concernant cette réunion pourra être obtenue auprès de MM.

- Sarteur, Centre de recherche ELF/Aquitaine, BP 22, 69360 Saint Symphorien d'Ozon. Tél. : (7) 870-81-03.
- Bourguillot, Centre d'Études Nucléaires de Grenoble, Service SEA/SEAPC, 85 X, 38041 Grenoble Cedex. Tél. : (76) 97-41-11, poste 33-32.

*Vient de paraître : un livre indispensable à tous les chimistes*



### LE COMPENDIUM DE LA NOMENCLATURE EN CHIMIE ANALYTIQUE

Trauction française du « Compendium of analytical nomenclature » (règles définitives de 1977) publié, en 1978, par la Division de chimie analytique de l'IUPAC.

1 volume de 256 pages édité par la S.C.F.

- Prix pour France, Europe, Afrique du Nord : 300 F. T.T.C.
- Pour les autres pays : 330 F.
- Pour les Membres de la S.C.F. (1 exemplaire par personne physique ou morale) : 180 F. T.T.C.

Adresser les commandes à la Société Chimique de France, 250, rue Saint-Jacques, 75005 Paris, accompagnées du règlement par chèque bancaire ou chèque postal (280-28 Paris W) à l'ordre de la Société Chimique de France. Le livre est aussi en vente au siège de la Société.