
Mesurer l'(a)symétrie moléculaire : un défi scientifique et un enjeu de société

Isabelle Compagnon*¹

¹Institut Lumière Matière (ILM) – CNRS, université de L – Université de Lyon 1, France

Résumé

Résumé :

Epimérie, diastéréoisomérisation, chiralité, anomérie, sont autant de subtiles variations de symétrie qui définissent la structure et la fonction biologique d'une famille majeure de biopolymères : les carbohydrates. Ces molécules omniprésentes dans la nature constituent 75% de la biomasse renouvelable (cellulose et chitine) ; la plus importante source de nourriture (sucres lents, sucres rapides et fibres solubles) ; et tapissent la surface des cellules – régissant ses interactions avec son environnement. A ce titre, l'exploitation de ces molécules représente un enjeu stratégique dans les domaines de la santé, la nutrition, les matériaux et les énergies renouvelables.

Cependant, la fascinante richesse structurelle de cette famille de molécules est aussi un verrou majeur. En effet, alors que des technologies de séquençage permettent de déchiffrer la structure des autres familles de biopolymères - l'ADN et les protéines - depuis des décennies, il n'existe aucun équivalent pour l'analyse des carbohydrates.

A l'Institut Lumière Matière et avec le soutien de l'Institut Universitaire de France, nous développons depuis 2012 une approche pluridisciplinaire basée sur des concepts fondamentaux de physique moléculaire pour lever ce verrou scientifique et technique. Les résultats obtenus ont conduit à une percée majeure : la première méthode générique de séquençage des carbohydrates.

Références :

Schindler et al. *Distinguishing isobaric phosphated and sulfated carbohydrates by coupling of mass spectrometry with gas phase vibrational spectroscopy* Phys. Chem. Chem. Phys. 2014

Barnes et al. *Anharmonic simulations of the vibrational spectrum of sulfated compounds: application to the glycosaminoglycan fragment glucosamine 6-sulfate* Phys. Chem. Chem. Phys. 2015

Schindler et al. *MS/IR, a new MS-based hyphenated method for analysis of hexuronic acid epimers in glycosaminoglycans* Glycoconjugate Journal 2016

Barnes et al. *Fast and accurate hybrid QM//MM approach for computing anharmonic corrections to vibrational frequencies* J. Mol. Model. 2016

*Intervenant

Gray et al. *Bottom-up elucidation of glycosidic bond stereochemistry* Anal. Chem. 2017 (en révision)

Schindler et al. *IRMPD Spectroscopy Sheds New (InfraRed) Light on the Sulfate Pattern of Carbohydrates* J. Phys. Chem. A 2017 (en révision)

Schindler et al. *First principles of a generic oligosaccharide sequencing method based on IR spectroscopy integrated to mass spectrometry* Nature Methods 2017 (en révision)