



©Adobestock

Vers une automatisation de l'interprétation des spectres de masse des oligosaccharides de plantes



En savoir plus

Lollier V et al.

Oligator: a flexible interface to draw oligosaccharide structures and generate their theoretical tandem mass spectra.

Bioinformatics . 2021 - [10.1093/bioinformatics/btab412](https://doi.org/10.1093/bioinformatics/btab412)

Valorisation

Ces outils sont mis à disposition du public dans l'entrepôt de code source GitHub.

Leur valorisation sous forme d'une note d'application est en cours.

Contact

Virginie Lollier

UR BIA

virginie.lollier@inrae.fr



Contexte

Les glycanes sont les principaux constituants de la paroi des cellules végétales. Bien qu'ils soient reconnus pour leurs effets nutritionnels ou leur fort potentiel en chimie verte, la résolution de leur structure précise reste un verrou pour le développement de leurs applications. La spectrométrie de masse en tandem (MS/MS) est une technique analytique majeure pour résoudre la structure des bio-polymères. Cette technologie haut-débit dispose de peu d'outils permettant l'interprétation automatique des spectres pour les glycanes, en particulier végétaux, faute de données de référence. L'analyse structurale de ces molécules complexes implique des développements méthodologiques spécifiques où l'interprétation des spectres se fait manuellement. Ce travail fastidieux ne permet pas de capitaliser sur les analyses réalisées.

Résultats

La Plateforme BIBS a développé deux logiciels, Oligator et mzLabelEditor, pour faciliter l'interprétation des spectres de masse et la collecte de données de référence. Ils standardisent le processus de description structurale et d'annotation des spectres MS/MS tout en préservant la flexibilité nécessaire à l'exploration de nouvelles formes chimiques d'oligosaccharides. Oligator fournit une interface graphique pour dessiner une structure d'oligosaccharide puis produire son spectre MS/MS théorique en

s'appuyant sur la nomenclature d'usage. Pour conserver la structure décrite et explorer des substitutions chimiques indépendamment de tout référentiel, Oligator s'appuie sur le système de notation SMILES (Simplified Molecular Input Line Entry System) dont l'usage est courant en chimio-informatique. MzLabelEditor a été conçu pour construire une librairie de spectres de référence. Son interface permet de conserver l'information instrumentale (fabriquant, mode d'ionisation, de fragmentation, etc...) associée à un spectre annoté. L'annotation d'un spectre s'effectue en plaçant des étiquettes aux pics d'intérêt. MzLabelEditor est le seul outil dédié à la spectrométrie de masse qui permette la saisie libre de ces annotations. Pour faciliter l'interprétation puis l'annotation d'un spectre, mzLabelEditor propose de le comparer à un « modèle », idéalement un spectre théorique généré avec l'outil Oligator.

Perspectives

L'utilisation conjointe des deux applications favorise la collecte de données de référence dans une librairie spectrale et ouvre la voie à l'automatisation de l'interprétation des spectres MS/MS des glycanes végétaux. Enfin, mzLabelEditor est générique dans la plupart de ses fonctionnalités. D'autres nomenclatures de fragments MS/MS pourraient être prises en charge dans le module de comparaison pour étendre l'outil à d'autres types de molécules.