



©Plate-forme BIBS<sup>1</sup> - Le spectromètre SELECT SERIES Cyclic IMS

## Classification d'oligosaccharides au moyen de réseaux moléculaires basés sur la mobilité ionique



### En savoir plus

Ollivier S. et al.

Molecular networking of high-resolution tandem ion mobility spectra: A structurally relevant way of organizing data in glycomics?

Analytical Chemistry . 2021

<https://doi.org/10.1021/acs.analchem.1c01244>

### Contacts

David Ropartz, Simon Ollivier, Hélène Rogniaux

UR BIA

[david.ropartz@inrae.fr](mailto:david.ropartz@inrae.fr)

[simon.ollivier@inrae.fr](mailto:simon.ollivier@inrae.fr)

[helene.rogniaux@inrae.fr](mailto:helene.rogniaux@inrae.fr)



### Contexte

Les glucides sont l'une des classes chimiques les plus importantes du Vivant. Ils trouvent également des applications dans des domaines variés, comme les bioénergies ou les industries alimentaire, pharmaceutique ou cosmétique. Des variations chimiques mineures peuvent cependant avoir un impact majeur sur leurs propriétés. Or il n'existe actuellement pas d'approche satisfaisante pour caractériser finement les polysaccharides, particulièrement dans des extraits complexes.

*A contrario*, la spectrométrie de masse (MS) s'est imposée comme un outil puissant pour l'analyse structurale d'autres types de biopolymères, notamment les protéines. Les méthodes ne sont cependant pas directement transposables aux glucides : ceux-ci comprennent en effet de nombreux éléments structuraux n'impactant pas leur masse (isoméries). La MS – détectant uniquement la masse – est donc par nature aveugle à ces isoméries. Aujourd'hui, des avancées technologiques permettent d'envisager la levée de ce verrou analytique. En particulier, le couplage de la mobilité ionique avec la MS (IM-MS), sépare les molécules selon leurs conformations 3D.

### Résultats

Nous avons développé une méthode exploitant les dernières avancées en IM-MS pour identifier des groupes structuraux d'oligosaccharides. Cette méthode s'inspire d'une stratégie

utilisée en métabolomique, appelée *réseau moléculaire*. Classiquement, la stratégie utilise des spectres MS/MS : la molécule d'intérêt est isolée selon sa masse, puis cassée pour générer un spectre de masse de fragments – assimilable à une signature structurale de la molécule. Une comparaison bioinformatique permet de relier les spectres similaires (et donc, les structures apparentées) dans le réseau. Malheureusement, cette approche est peu informative pour les oligosaccharides à cause des situations d'isomérie susmentionnées.

Notre démarche permet de construire des réseaux moléculaires au sein desquels la masse des fragments est remplacée par leur mobilité ionique. Nous avons éprouvé cette approche sur plusieurs dizaines d'oligosaccharides, représentatifs des glucides retrouvés chez les plantes. Le réseau construit s'est avéré supérieur pour regrouper les oligosaccharides selon des caractéristiques structurales informatives, principalement liées à leur chaîne principale.

### Perspectives

Cette nouvelle méthode devrait simplifier l'analyse des glucides en milieu biologique, en groupant les espèces similaires et en décomplexifiant les données. De futurs travaux consisteront à améliorer l'approche en tirant parti au maximum des deux dimensions disponibles dans les données, à savoir la masse et la mobilité des fragments.