

Métabolomique et FTMS

Emilien Jamin

emilien.jamin@inrae.fr

La métabolomique s'intéresse à l'analyse quantitative des métabolites d'un système vivant, c'est-à-dire à la détection des molécules organiques issues de biotransformation et d'un poids inférieur à 1000 Da. La multitude des familles chimiques que l'on retrouve parmi ces substances et leur grande gamme dynamique de concentrations rendent complexe leur analyse de manière exhaustive.

Ce cours présentera donc l'approche de métabolomique par couplage LC-HRMS dite « globale » ou « sans a priori » qui se veut être la plus exhaustive possible. La quantité de données générées requiert un traitement particulier de ces données qui sera présenté, et illustré au cours du TP qui suivra sur l'utilisation du logiciel XCMS sous un environnement Galaxy (workflow4metabolomics). Enfin, l'identification structurale des métabolites reste un enjeu en raison de la présence d'isomères, de composés inconnus, et de leur relativement faible fragmentation en phase gazeuse. C'est pourquoi le cours se terminera par la présentation des enjeux et stratégies d'annotation des variables de métabolomique et l'identification des métabolites correspondants.