



HAL
open science

Analyse prédictive de structures potentielles des dextrines MOS et MIMOS

C. Bliard, Agathe Martinez

► **To cite this version:**

C. Bliard, Agathe Martinez. Analyse prédictive de structures potentielles des dextrines MOS et MIMOS. SCF Grand Est 5, May 2008, Nancy, France. , 2008. hal-02296877

HAL Id: hal-02296877

<https://hal.science/hal-02296877>

Submitted on 25 Sep 2019

HAL is a multi-disciplinary open access archive for the deposit and dissemination of scientific research documents, whether they are published or not. The documents may come from teaching and research institutions in France or abroad, or from public or private research centers.

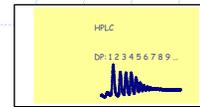
L'archive ouverte pluridisciplinaire **HAL**, est destinée au dépôt et à la diffusion de documents scientifiques de niveau recherche, publiés ou non, émanant des établissements d'enseignement et de recherche français ou étrangers, des laboratoires publics ou privés.



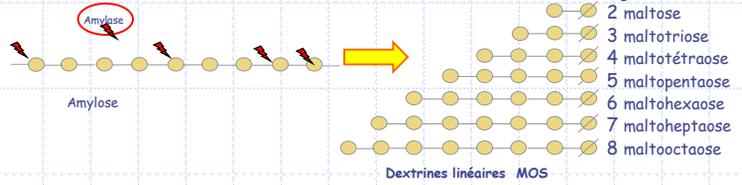
Distributed under a Creative Commons Attribution 4.0 International License

Analyse prédictive de structures potentielles des dextrines MOS et MIMOS

A. Martinez & C. Bliard*
agathe.martinez@univ-reims.fr - christophe.bliard@univ-reims.fr
CNRS UMR 6229 ICMR
Université de Reims Champagne Ardenne
Bât 18 UFR Sciences Moulin de la Housse



L'Analyse Prédictive de Structures Potentielles (APSP) permet de calculer et de décrire un nombre fini de structures isomères discrètes pour chaque DP: $N=f(DP)$ pour des oligomères ramifiés avec des caractéristiques structurales données. L'application à des fractions de DP croissants, isolées à partir de sirops de dextrines issus de la dégradation enzymatique d'amylpectines est présentée ici.



Introduction

Préambule :

Les polymères linéaires sont facilement décrits par leur Degré de Polymérisation (DP) et indice de polydispersité. Mais avec les polymères branchés, on atteint très rapidement, dès des DP très petits, un niveau de variabilité structurale phénoménal. L'Analyse Prédictive des Structures Potentielles permet de calculer un nombre fini de structures isomères (N) en fonction du Degré de Polymérisation (DP) : $N = f(DP)$. Ce calcul est effectué en se basant sur un postulat simple des sous-structures connues des enchaînements oligosaccharidiques du matériau de base (ici les amyloses pour les MOS et amylopectines pour les MOS et MIMOS).

Résultats et discussion

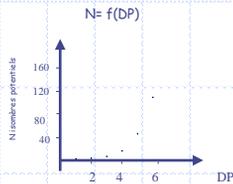
Calcul du nombre d'isomères MIMOS potentiels en fonction du DP

La formule générale de calcul du nombre d'isomères potentiels en fonction du DP peut être décrite de la façon suivante ; chaque incrémentation augmentant le nombre de possibilités de ramifications nouvelles :

Pour $N = N_b$ d'isomères et $DP = n$

$$2^{n-1} + [(n-2) + 2^{n-3} \times (n-3)] + [(n-3) + 2^{n-2} \times (n-3)] + [(n-4) + 2^{n-4} \times (n-3)] -$$

(linéaire) (1 ramification) (2 ramifications) (3 ramifications)

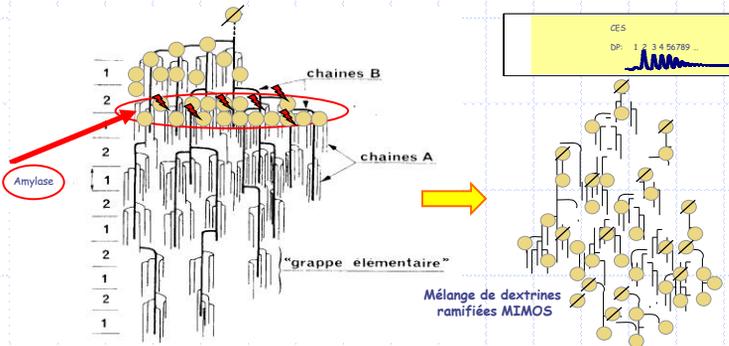


Structures isomères potentielles MIMOS pour des degrés de polymérisation allant de DP 2 à DP5.

1- Cas des Malto-Oligosaccharides « MOS »

Le cas des MOS comme ceux issus de l'hydrolyse d'amyloses purs, exclusivement constitués d'enchaînements linéaires de glucopyranoses $\alpha(1-4)$, est excessivement simple. En effet la seule contrainte structurale est le DP. Il n'existera donc qu'une seule structure potentielle par DP donné. $N_{(DP)} = 1$

(Seront ici désignés comme « isomères » seuls les homologues topoisomères des résidus glycosyles branchés au travers de fonctions acétaliques (en position 4 ou/et en position 6)



2- Cas des MIMOS

Malto-Iso-Malto-Oligosaccharides

Les fractions issues de la dégradation enzymatique d'amidon, constitué pour 75 % d'amylopectine contiennent par nature une proportion notable de liaisons $\alpha(1-6)$ entre les unités gluco- pyranosidiques. S'il est bien connu que la structure ramifiée de l'amylopectine est constituée d'un éventail d'enchaînements linéaires de glucopyranoses $\alpha(1-4)$ comme dans l'amylose, mais branchés entre eux par des liaisons $\alpha(1-6)$ en revanche l'organisation de ces ramifications de chaînes entre elles n'est pas connue. Les sous-structures de branchement correspondant à des enchaînements de iso-malto- di ou oligosaccharides (IMOS) sur des structures MOS.

Le mélange formé par dégradations enzymatiques partielles au sein de chaque fraction à DP donné, doit être plus justement référencé comme : Malto-Iso-malto-Oligosaccharide ou « MIMOS ». Le cas des MIMOS comme obtenus par dégradation enzymatique des amylopectines est bien plus complexe que celui des MOS (ou des IMOS). Une dégradation non spécifique engendre un nombre considérable de structures potentielles discrètes pour des DP croissants. En effet chaque incrémentation de DP conduit à une multiplication correspondante du niveau de complexité des possibilités d'isomérisation de branchement. Le calcul du nombre d'isomères potentiels en fonction du DP ainsi que les structures correspondantes sont donnés ici pour des DP de 1 à 5.

Architecture des isomères MIMOS de DP1 à DP5

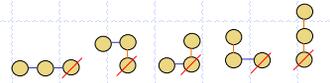
N(DP1) = 1



N(DP2) = 2

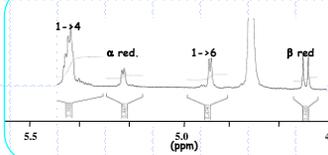


N(DP3) = 5



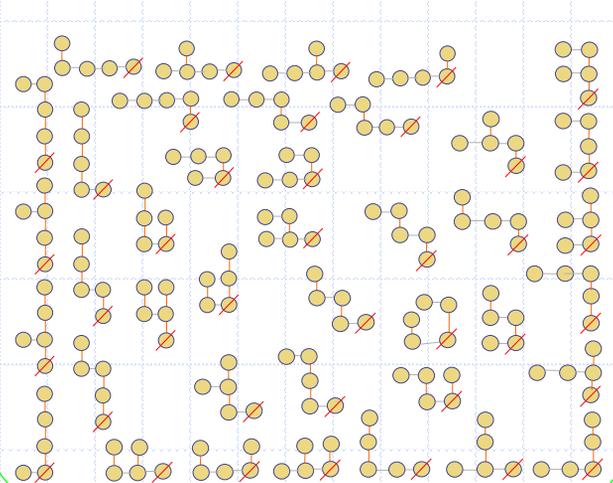
Exemple d'application à une fraction MIMOS DP4

N(DP4) = 14



Le spectre RMN 1H de la fraction MIMOS DP4 purifiée par CES sur Gél P2 montre une proportion de 30% de maltotétraose et 70 % portant une ramification. Ceci permet de réduire à deux le nombre de structures sur les 14 isomères potentiels MIMOS 4

N(DP5) = 42



Glossaire
MOS : Malto Oligosaccharides
IMOS : IsoMalto Oligosaccharides
MIMOS : Malto-IsoMalto Oligosaccharides
DP : Degré de Polymérisation
CES : Chromatographie d'Exclusion Stérique

