



HAL
open science

Métabolomique multiplateforme (MS, RMN) : étude de l'impact de l'ajout de TSP sur les données MS

benedict Yanibada, Cécile Canlet, Carla Orlandi, Roselyne Gautier, Fabien Jourdan, Emilien Jamin, Nathalie Poupin

► To cite this version:

benedict Yanibada, Cécile Canlet, Carla Orlandi, Roselyne Gautier, Fabien Jourdan, et al.. Métabolomique multiplateforme (MS, RMN) : étude de l'impact de l'ajout de TSP sur les données MS. Congrès Analytics 2022, Sep 2022, Nantes, France. hal-04357965

HAL Id: hal-04357965

<https://hal.science/hal-04357965>

Submitted on 21 Dec 2023

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.

Métabolomique multiplateforme (MS, RMN) : étude de l'impact de l'ajout de TSP sur les données MS

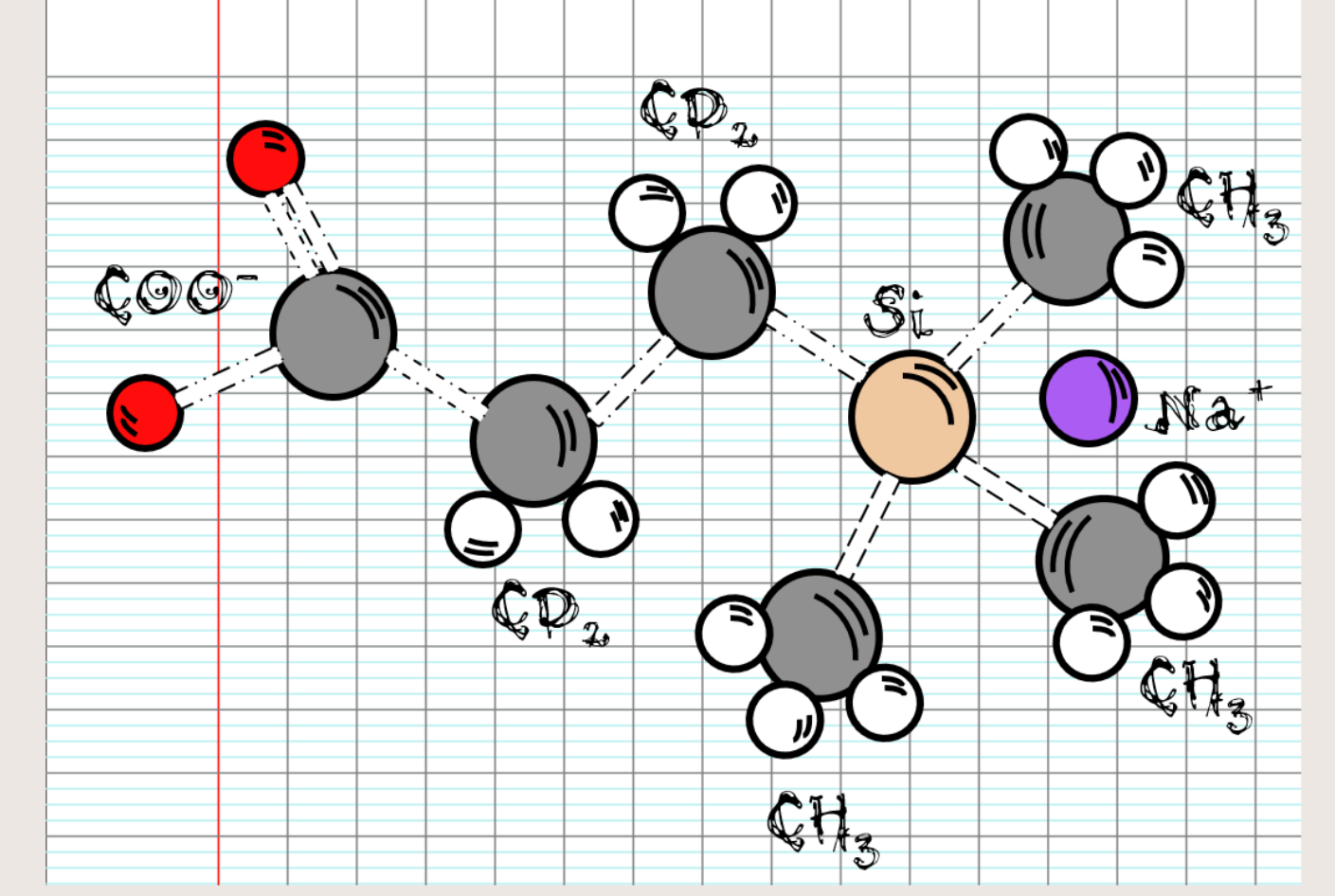
Bénédict Yanibada¹, Cécile Canlet^{1,2}, Carla Orlandi^{1,2}, Roselyne Gautier^{1,2}, Fabien Jourdan¹, Nathalie Poupin¹, Emilien Jamin^{1,2}

¹Toxalim (Research Centre in Food Toxicology), Toulouse University, INRAE UMR 1331, ENVT, INP-Purpan, UPS, Toulouse, France
²Metatoul-AXIOM Platform, National Infrastructure for Metabolomics and Fluxomics: MetaboHUB, Toxalim, INRAE, F-31027, Toulouse, France

CONTEXTE

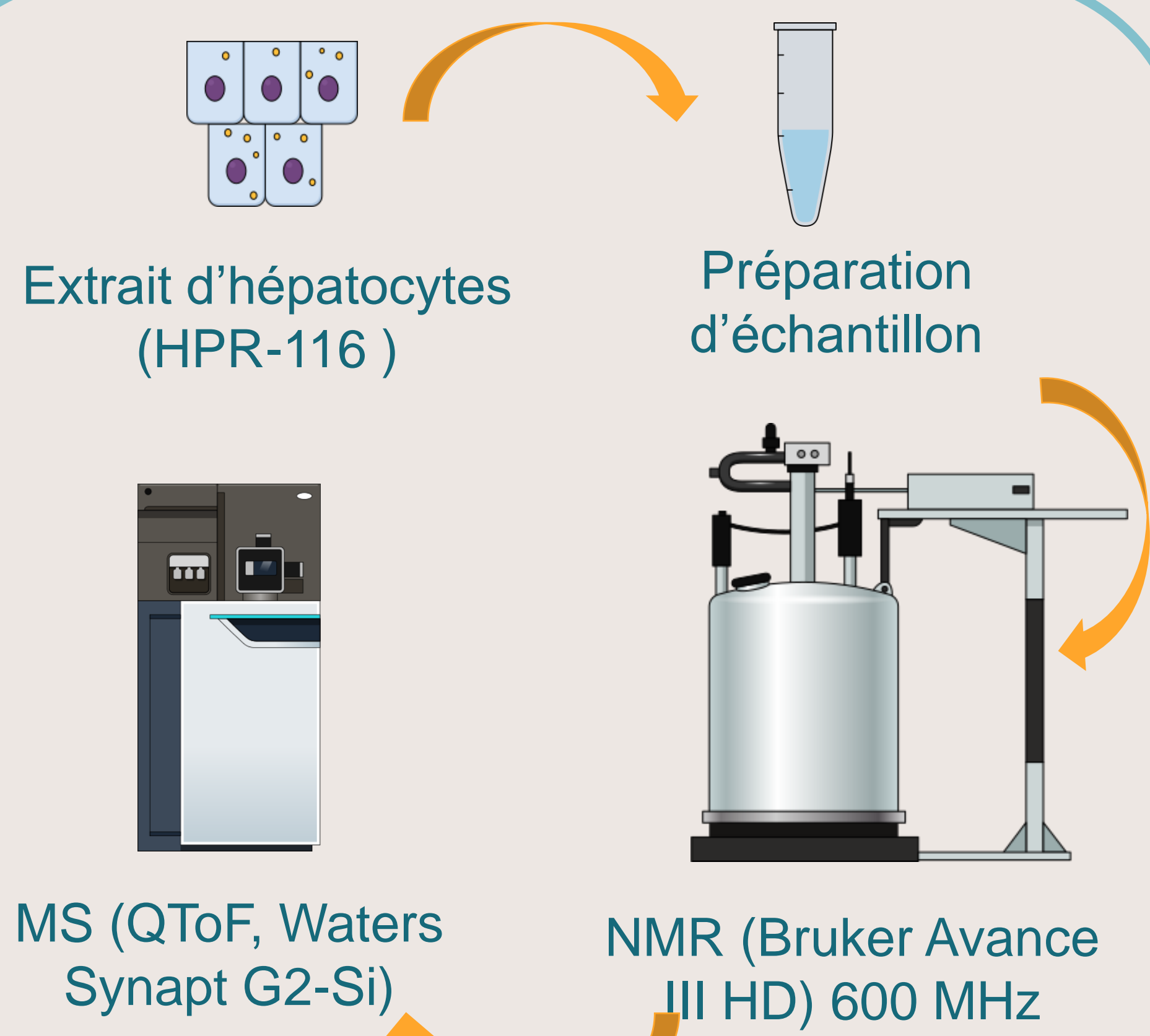
- L'utilisation du même échantillon dans une analyse métabolomique multiplateforme permet de réduire la quantité de matériel biologique et les erreurs de manipulation.
- L'analyse en RMN n'étant pas destructive, elle peut être suivie par une analyse en spectrométrie de masse (LC-MS).
- Le TSP est un sel utilisé pour calibrer les spectres RMN (δ 0.0 ppm).

Objectif: Evaluer l'impact de l'ajout de TSP dans des extraits de la lignée cellulaires hépatiques HPR-116 sur les données métabolomiques d'une analyse LC-MS.

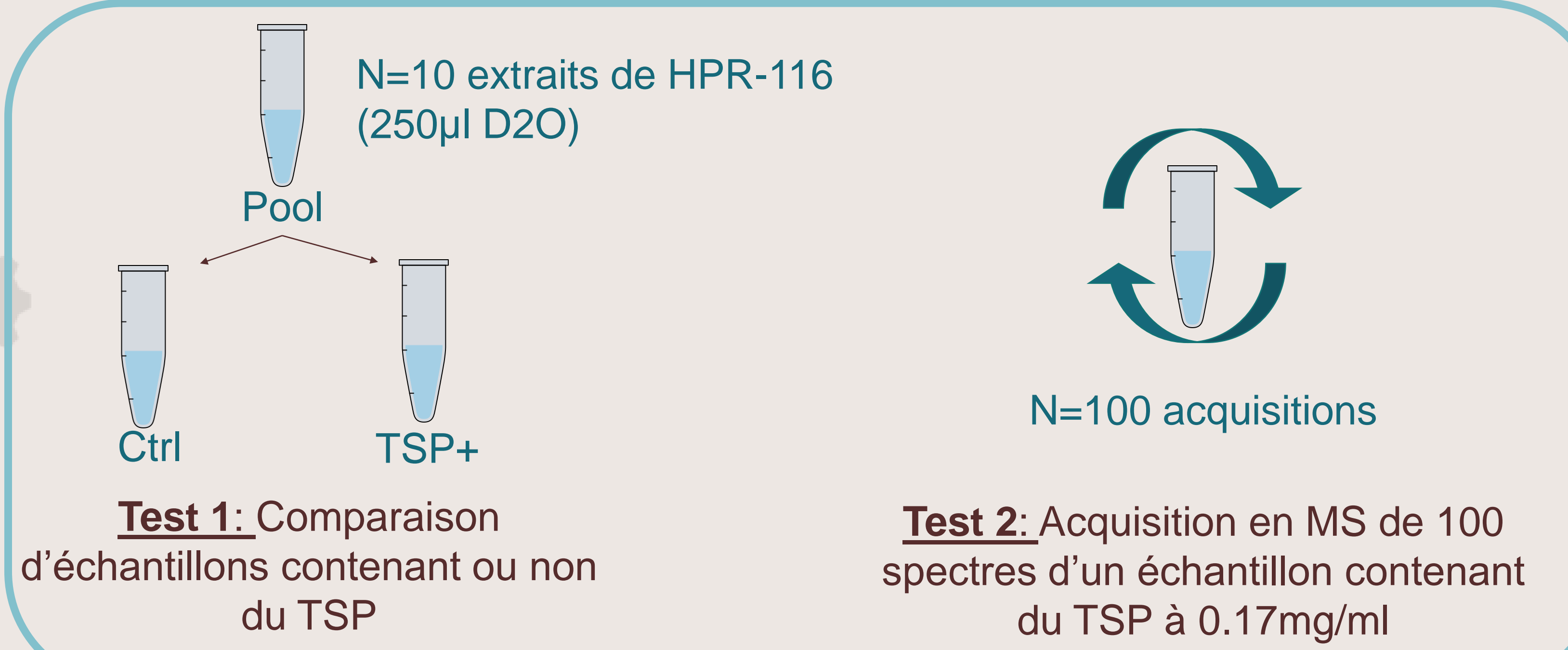


Triméthylsilylpropanoate de sodium (TSP)

METHODES

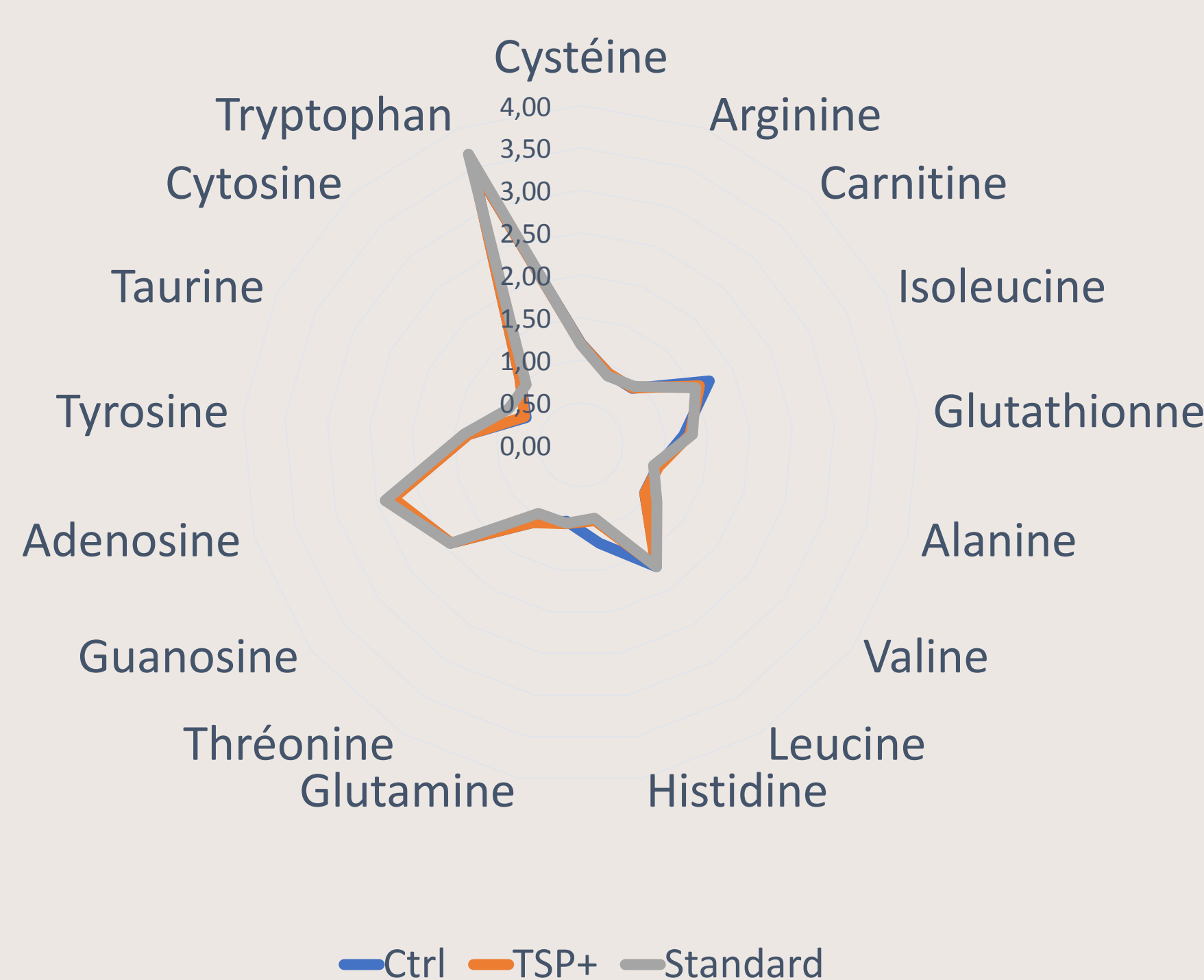


Workflow de l'analyse multiplateforme



- Extraction des données avec MassLynx 4.2.
- Comparaison des temps de rétention et des intensités de métabolites endogènes communs et co-élués avec les signaux du TSP.
- Evaluation de la pression de la colonne (Hypersil Gold C18 UHPLC), du temps de rétention du TSP.

RESULTATS

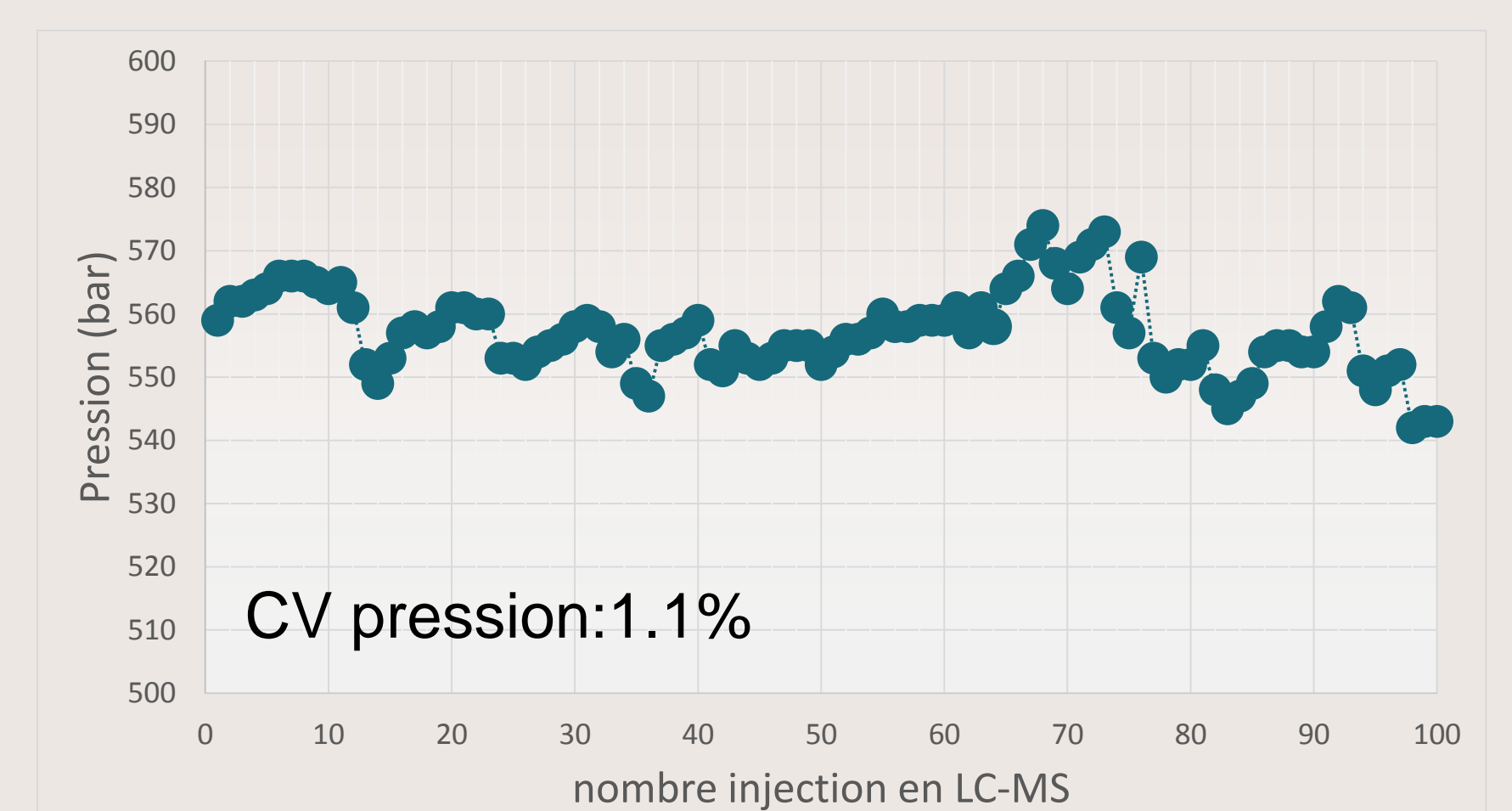


Comparaison des temps de rétention des métabolites entre les conditions contrôle, TSP+ et le standard.

Métabolite	Ctrl	TSP+	P-value*
Cystéine	4.90E+05	5.71E+05	0.45
Arginine	7.23E+05	1.06E+06	0.25
Carnitine	1.22E+07	1.37E+07	1.00
Isoleucine	1.26E+06	1.27E+07	0.25
Glutathionne	3.52E+09	1.40E+09	0.90
Alanine	1.67E+06	1.65E+06	0.90
Valine	3.97E+07	4.50E+07	0.25
Leucine	1.78E+06	3.10E+06	0.25
Histidine	1.08E+05	5.17E+05	0.25
Glutamine	6.11E+05	2.20E+06	0.25
Thréonine	7.16E+05	6.77E+05	1.00
Guanosine	2.43E+05	2.50E+05	0.90
Adénosine	1.54E+07	1.72E+07	1.00
Tyrosine	7.91E+06	8.18E+06	0.65
Taurine	1.31E+07	1.31E+07	1.00
Cytosine	1.13E+06	3.23E+08	0.65
Tryptophane	9.34E+05	2.85E+07	0.65

*Test de Wilcoxon-Mann-Whitney (correction FDR)

Comparaison des moyennes des intensités des métabolites des 2 conditions



Evolution de la pression de la colonne chromatographique sur 100 injections

Temps de rétention moyen du TSP sur 100 injections: 16,8 min (SD=0.02 ; CV= 0.12%)

Conclusion

L'ajout de TSP dans des extraits de cellules hépatiques HPR-116 n'affecte pas l'analyse LC-MS. Les temps de rétention et les intensités de métabolites ne sont pas affectés par la présence de TSP. Le système chromatographique présente des performances inaltérées. Il est ainsi possible de faire successivement une analyse RMN calibrée avec du TSP et une analyse en LC-MS sur un même échantillon sans altérer la qualité des données et sans endommager le système chromatographique.

