



## Analyse LC-HRMS/MS et RMN d'urines de souris marquées au C-13. Elucidation structurale de métabolites inconnus

**Spécialité** Chimie analytique

**Niveau d'étude** Bac+5

**Formation** Master 2

**Unité d'accueil** [NIMBE/LSDRM](#)

**Candidature avant le** 31/01/2021

**Durée** 6 mois

**Poursuite possible en thèse** oui

**Contact** [HUBER Gaspard](#)  
+33 1 69 08 64 82  
[gaspard.huber@cea.fr](mailto:gaspard.huber@cea.fr)

**Autre lien**  
[http://joliot.cea.fr/drf/joliot/Pages/Entites\\_de\\_recherche/medicaments\\_technologies\\_sante/SPI/LEMM.aspx](http://joliot.cea.fr/drf/joliot/Pages/Entites_de_recherche/medicaments_technologies_sante/SPI/LEMM.aspx)

### Résumé

La spectrométrie de masse à haute résolution (HRMS) et la résonance magnétique nucléaire (RMN) sont deux techniques complémentaires pour l'analyse de mélanges complexes en solution comme le métabolome. L'opportunité d'analyser, par ces deux techniques, des échantillons d'urine marquée au C-13, en complément d'autres échantillons non marqués obtenus dans des conditions similaires, doit permettre au cours de ce stage de gros progrès dans l'élucidation structurale de composés inconnus.

### Sujet détaillé

Contexte et projet de recherche du M2

La métabolomique vise à caractériser l'ensemble des "petites molécules" (Le projet de recherche de M2 vise à analyser, par spectrométrie de masse à très haute résolution (Orbitrap Fusion, Thermo) couplée à la chromatographie liquide et par RMN 2D hétéronucléaire, les urines de souris marquées au carbone-13 et de les comparer aux urines non marquées. Cette étude visera à exploiter de façon synergique les données obtenues via les deux techniques analytiques pour identifier les métabolites inconnus détectés dans les échantillons. L'élucidation structurale des composés sera également appuyée par des acquisitions LC-HRMS/MS.

Environnement de travail

Le stage M2 se déroulera au sein de deux laboratoires du CEA de Saclay : (1) le laboratoire d'étude du métabolisme des médicaments (LEMM), institut Joliot ; et (2) le laboratoire Structure et Dynamique par résonance magnétique (LSDRM), IRAMIS.

---

Le LEMM s'est spécialisé dans l'analyse métabolomique depuis 2002, accumulant ainsi une expertise en terme de développement et de validation de méthodes LC-MS pour le profilage de biofluides et extraits tissulaires et cellulaires. Il est équipé d'une plateforme analytique constituée de 6 instruments à basse résolution (QqQ) et 7 instruments à haute et très haute résolution (Orbitrap et Q-TOF).

Le LSDRM est expert en développement d'approches originales pour la spectroscopie de résonance magnétique. Il est équipé de 6 spectromètres RMN de 1.0 à 11.7 T.

#### Profil du candidat et candidature

Etudiant ingénieur et/ou M2 en chimie. Spécialité chimie analytique ou chimie organique avec un intérêt pour la chimie analytique et plus particulièrement la spectrométrie de masse et la RMN. Date de début souhaitée: février 2021.

Les candidatures (CV et lettre de motivation) sont à envoyer à [annelaure.damont@cea.fr](mailto:annelaure.damont@cea.fr) et [gaspard.huber@cea.fr](mailto:gaspard.huber@cea.fr)

[1] Theodoridis G A et al. Liquid chromatography–mass spectrometry based global metabolite profiling: A review. *Analytica Chimica Acta* 2012, 711, 7-16.

[2] Nagana Gowda G A et al. Recent Advances in NMR-Based Metabolomics. *Anal. Chem.*, 2017, 89 (1), 490-510.

#### Mots clés

metabolomique

#### Compétences

spectrométrie de masse, résonance magnétique nucléaire

#### Logiciels

XCalibur Topspin

---

## **LC-HRMS/MS and NMR analysis of C-13 labeled mouse urine. Structural elucidation of unknown metabolites**

### **Summary**

High resolution mass spectrometry (HRMS) and nuclear magnetic resonance (NMR) are two complementary techniques for the analysis of complex mixtures in solution such as the metabolome. During this trainee-ship, the opportunity to analyze, by these two techniques, urine samples labeled with C-13, in addition to other unlabeled samples obtained under similar conditions, should allow great progress in the structural elucidation of unknown compounds.

### **Full description**

Context and M2 research project

Metabolomics aims to characterize all the "small molecules" (

### **Keywords**

metabolomics

### **Skills**

mass spectrometry, nuclear magnetic resonance

### **Softwares**

XCalibur Topspin