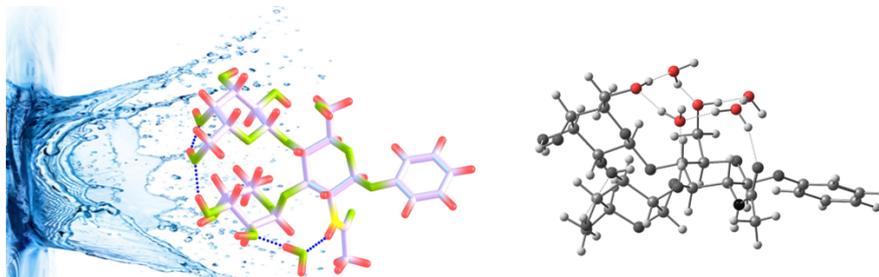


Quand les molécules solvatées structurent le solvant : interactions sucre-eau en phase gazeuse.

Pierre Carçabal

Laboratoire Collisions Agrégats Réactivité, CNRS, Université de Toulouse, Toulouse, France



La liaison hydrogène est au cœur de l'interaction entre les biomolécules et leur environnement, principalement composé d'eau et d'autres biomolécules. Les sucres forment une importante classe de biomolécules et sont acteurs d'une variété de processus biologiques, notamment de la reconnaissance moléculaire vitale *via* les interactions non-covalentes. Ces molécules particulièrement flexibles codent des informations moléculaires à travers leur composition chimique et leurs préférences conformationnelles, étroitement liées à l'environnement direct et local dans lequel elles sont intégrées.

En utilisant la spectroscopie vibrationnelle à double résonance sélective en conformations et résolue en masse et une utilisation systématique de la substitution isotopique,¹ nous pouvons interroger les choix conformationnels des sucres isolés et l'effet d'un nombre contrôlé de molécules environnantes. Jusqu'à présent, dans le cas des études d'interaction sucre-eau, nous nous sommes principalement concentrés sur l'effet de l'eau sur les conformations du sucre.²

Nous présenterons les résultats les plus récents mettant en évidence un comportement structurant et symbiotique des molécules de solvant sur les sucres, et en retour des sucres sur le solvant. Cela repose sur l'identification de clusters hydratés de structures de sucres où les OH des molécules de sucre et d'eau créent les mêmes réseaux de liaisons H que ceux qui ont été étudiés depuis longtemps pour les oligomères d'eau. Ces résultats font écho au concept selon lequel les sucres peuvent être considérés comme des « oligomères d'eau pré-organisés »³ avec la capacité de façonner et d'influencer son propre environnement. Cette propriété des sucres pourrait être une clé pour comprendre un fondement de leur rôle central dans la reconnaissance moléculaire.

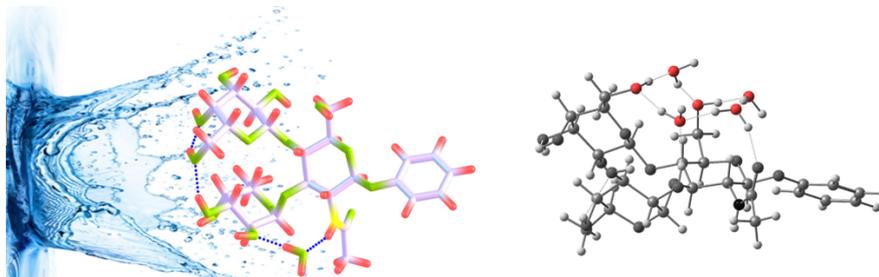
Références

- 1 A. Camiruaga, G. Goldsztejn and P. Çarçabal, *Phys. Chem. Chem. Phys.*, 2023 , DOI:10.1039/D3CP00908D.
- 2 E. J. Cocinero and P. Çarçabal, *Carbohydrates.*, *Top. Curr. Chem.*, 2015, **364**, 299–333.
- 3 F. P. C. Binder, K. Lemme, R. C. Preston and B. Ernst, *Angew. Chem. Int. Ed. Engl.*, 2012, **51**, 7327–7331.
- 4 C. Pérez, M. T. Muckle, D. P. Zaleski, N. A. Seifert, B. Temelso, G. C. Shields, Z. Kisiel and B. H. Pate, *Science*, 2012, **336**, 897–901.

When solvated molecules shape the solvent: sugar water interaction in the gas phase.

Pierre Carçabal

Laboratoire Collisions Agrégats Réactivité, CNRS, Université de Toulouse, Toulouse, France



Hydrogen bonding is at the centre of the interplay between biomolecules and their environment, mostly composed of water and other biomolecules. Sugars belong to one of the most important class of biomolecules and they are key actors of a variety of biological processes, including vital molecular recognition mediated by non-covalent interactions. These especially flexible molecules encode molecular information through their chemical composition and their conformational preferences, closely related to the direct and local environment in which they are embedded.

Using mass resolved, conformer selective double resonance vibrational spectroscopy with systematic use of isotopic substitution,¹ we can interrogate the conformational choices of isolated sugars and the effect of a controlled number of surrounding molecules. So far, in the case of sugar-water interaction studies, we have mostly focused on the effect of water on the sugar conformer.²

We will present most recent results evidencing the symbiotic structuring behaviour of solvent molecules on sugars, and in return of sugars on the solvent. This relies on the identification of hydrated clusters of sugars structures where the OHs of the sugar and water molecules create the same H bond networks than those that have been long studied for water oligomers. These findings echoes to the concept that sugars can be seen as “pre-organized water oligomers”³ with the ability of shaping and affecting its own environment. This unique property of sugars could be the fundamental key to understand the basis of their central role in molecular recognition.

References

- 1 A. Camiruaga, G. Goldsztejn and P. Çarçabal, *Phys. Chem. Chem. Phys.*, 2023 , DOI:10.1039/D3CP00908D.
- 2 E. J. Cocinero and P. Çarçabal, *Carbohydrates.*, *Top. Curr. Chem.*, 2015, **364**, 299–333.
- 3 F. P. C. Binder, K. Lemme, R. C. Preston and B. Ernst, *Angew. Chem. Int. Ed. Engl.*, 2012, **51**, 7327–7331.
- 4 C. Pérez, M. T. Muckle, D. P. Zaleski, N. A. Seifert, B. Temelso, G. C. Shields, Z. Kisiel and B. H. Pate, *Science*, 2012, **336**, 897–901.