
RMN à l'État Solide de Biomatériaux : Applications en Abondance Naturelle du Carbone-13

Fabien Deligey^{*1}, Wancheng Zhao¹, Alex Kirui¹, and Tuo Wang¹

¹Louisiana State University (LSU) – Department of Chemistry, Louisiana State University, 133 Choppin Hall, Baton Rouge, LA 70803, USA, États-Unis

Résumé

L'intérêt porté à la biomasse végétale est considérable, notamment car elle constitue un réservoir prometteur d'énergie verte. Pour comprendre son architecture, souvent hétérogène, à base d'hydrates de carbones, et réaliser des études *in-situ* de cellules par RMN de l'état solide, la détection ¹³C est indispensable. Cependant, le marquage isotopique de ces biomatériaux est onéreux et complexe. Nous présentons ici plusieurs études de pointe en abondance naturelle du carbone-13, où des solutions expérimentales communément accessibles en laboratoire sont déployées, pour fournir des informations structurales, dynamiques, ainsi que des analyses de quantification.

Par exemple, nous démontrons la capacité de la déconvolution spectrale à livrer une composition complète et fiable de la paroi cellulaire de l'oignon [1]. Grâce à un protocole rigoureux, un jeu de données quantitatives de type Multi-CP ¹³C, obtenu sur un spectromètre 400 MHz, est méthodiquement déconvolué, permettant d'obtenir 59 raies individuelles. Leur intégration donne des résultats concordants à ceux issus de la chimie traditionnelle.

Nous mettons également en avant les opportunités offertes par l'amplification du signal par rotation à l'angle magique associée à la polarisation dynamique nucléaire (MAS-DNP), avec l'étude d'une cellulose novatrice synthétisée *in-vitro* [2]. En effet, même sans marquage isotopique, grâce à la DNP, les outils 2D de spectroscopie de corrélation ¹³C-¹³C sont disponibles. Ainsi, la comparaison du degré de cristallinité de cette cellulose (obtenu par deux méthodes RMN indépendantes) et de ses différents conformères, avec ceux de la plante modèle *A. thaliana*, nous a permis de modéliser la structure des fibrilles élémentaires, mais aussi de discuter leurs agencements respectifs et d'apporter un éclairage supplémentaire sur la protéine synthétisant la cellulose chez la plante.

Finalement, nous combinons l'ensemble de ces techniques pour proposer à tout chercheur un chemin méthodologique prêt à l'emploi et applicable à toute étude de matériaux à base de polymères naturels. Nous démontrons son efficacité en caractérisant différentes souches de riz, associant des données structurales obtenues aux températures cryogéniques de la DNP, à des données de dynamique moléculaire obtenues en RMN conventionnelle à température ambiante [3].

Wilson, Deligey, et al. *bioRxiv* (2021)

Deligey, Cho, et al. *in preparation*

Zhao, Deligey, et al. *Biotechnology for biofuels* (2021).

*Intervenant