Détection de neurotransmetteurs par capsules fluorescentes

Rémi Pétuya*[1], Nicolas Fantozzi[2], Sandra Pinet[2], Emilie Guenin[2], Patrice Bordat[1], Alexandre Martinez[3], Isabelle Gosse[2], Didier Bégué[1], and Isabelle Baraille[1]

[1]Institut des sciences analytiques et de physico-chimie pour lénvironnement et les materiaux (IPREM) – Université de Pau et des Pays de l'Adour, Centre National de la Recherche Scientifique : UMR5254 – Université de Pau et des Pays de L'adour, Hélioparc Pau Pyrénées, 2 avenue du Président Angot, 64053 PAU CEDEX 9, France

[2]Institut des Sciences Moléculaires (ISM) – Université Sciences et Technologies - Bordeaux 1, École Nationale Supérieure de Chimie et de Physique de Bordeaux (ENSCPB), Centre National de la Recherche Scientifique : UMR5255 – Bâtiment A 12 351 cours de la Libération 33405 TALENCE CEDEX, France

[3]Institut des Sciences Moléculaires de Marseille (ISM2) – Aix Marseille Université : UMR7313, Ecole Centrale de Marseille : UMR7313, Centre National de la Recherche Scientifique : UMR7313 – Campus Saint Jérôme Av. escadrille Normandie Niemen BP 531 13397 MARSEILLE CEDEX 20, France

Résumé

Une déficience ou un déséquilibre des neurotransmetteurs dans le système nerveux central est avancée comme hypothèse dans le développement des maladies neurodégénératives.[1] Par exemple, l'altération des transmissions cholinergiques serait responsable de certains symptômes de la maladie d'Alzheimer. Cependant, en raison d'un manque d'outils de suivi temps-réel et espace-réel des neurotransmetteurs dans les systèmes biologiques, les mécanismes sous-jacents à ces disfonctionnements sont à ce jour encore méconnus. Le projet[2] auquel nous contribuons en collaboration avec des chimistes organiciens et des biologistes a pour objectif de fournir et caractériser des capsules fluorescentes, structure d'hemicryptophane, capables de capturer ces neurotransmetteurs, intrinsèquement non-fluorescents, afin de permettre leur détection et suivi par imagerie fonctionnelle. Dans un premier temps notre rôle dans ce projet consiste à étudier et caractériser les interactions de type hôte/invité entre les capsules et les neurotransmetteurs afin d'obtenir une ou plusieurs structures d'équilibres.[3] Considérant la taille des systèmes d'étude, environ 190 atomes pour le complexe hemicryptophane/neurotransmetteur, nous avons fait le choix d'utiliser la dynamique moléculaire avec champ de force réactif (reaxFF)[4,5] afin de caractériser notre système. La seconde partie du travail consistera à calculer les propriétés photo-physiques du complexe.

1- Coyle, J. T., Price, D. L., & DeLong, M. R. (1983). Alzheimer's disease: a disorder of cortical cholinergic innervation. *Science (New York, N.Y.)*, *219*(4589), 1184–90.

2- Projet ANR-15-CE18-0018 EVIDENCE/Programme AAP Innovation Biomédicale 2015.

2- Erieau-Peyrard, L., Coiffier, C., Bordat, P., Bégué, D., Chierici, S., Pinet, S., ... Brown,

*Intervenant

R. (2015). Selective, direct detection of acetylcholine in PBS solution, with self-assembled fluorescent nano-particles: experiment and modelling. *Phys. Chem. Chem. Phys.*, *17*(6), 4168–4174.

3- Van Duin, A. C. T., Dasgupta, S., Lorant, F., & A., G. W. (2001). ReaxFF: A Reactive Force Field for Hydrocarbonds. *Journal of Physical Chemistry A*, *105*(41), 9396–9409.
4- Chenoweth, K., van Duin, A. C. T., & Goddard, W. A. (2008). ReaxFF Reactive Force Field for Molecular Dynamics Simulations of Hydrocarbon Oxidation. *The Journal of Physical Chemistry A*, *112*(5), 1040–1053.