



## **AFERP – rencontres virtuelles 12 et 13 juillet 2022**

### **Livre des résumés**

#### **Accès : réunions Zoom**

##### **Mardi 12 juillet : 9 h – 12 h 45**

Heure : 12 juil. 2022 08:45 AM Paris

<https://univ-nantes-fr.zoom.us/j/82850447268?pwd=L3d2OTc2eDV2QVMzK3J1SIV3NGRSUT09>

ID de réunion : 828 5044 7268

Code secret : 968185

##### **Mercredi 13 juillet : 9 h – 12 h 45**

Heure : 13 juil. 2022 08:45 AM Paris

<https://univ-nantes-fr.zoom.us/j/85331976849?pwd=RVhQamNXWTljSWRwd1N1di8yeTFmQT09>

ID de réunion : 853 3197 6849

Code secret : 875008

### **Sommaire**

<b>Programme des conférences et communications</b>	<i>p 2</i>
<b>Conférences plénières : conférenciers invités et résumés</b>	<i>p 6</i>
<b>Communications courtes : résumés</b>	<i>p 14</i>
<b>Communications flash-posters : résumés</b>	<i>p 24</i>
<b>Liste des participants</b>	<i>p 42</i>
<b>Comité scientifique</b>	<i>p 44</i>

<https://aferp.fr/>

## Programme

mardi 12 juillet 2021

<b>Session 1 – Conférences plénières</b>		
<i>modération : Dr. Céline RIVIERE (Université de Lille)</i>		
9h-9h45	<b>Conférence plénière 1 :</b> <b>Pr Franz BUCAR</b> (University of Graz, Autriche) Antimicrobial action of aromatic plants - more than growth inhibition	
9h45-10h30	<b>Conférence plénière 2 :</b> <b>Pr David RONDEAU</b> (Université de Rennes) Nouvelles sources d'ionisation et spectrométrie de masse fondamentale dans le contexte de l'analyse des substances naturelles	
<i>10h30-10h45 : pause</i>		
<b>Session 2 – Phytochimie et savoirs traditionnels</b>		
<i>modération : Pr. Olivier GROVEL (Nantes)</i>		
<b>Communications courtes 1 à 5 :</b>		
10h45-12h00	C1	<b>Dr. BORDAGE Simon</b> (Lille) West African medicinal plants with activities against SARS-COV-2 and other viruses
	C2	<b>AMOUSSA Abdou Madjid</b> (Toulouse / Cotonou) Knowledge of herbal remedies for the treatment of salmonellosis in Plateau of Benin: Pharmacological evidence
	C3	<b>HAMION Guillaume</b> (Poitiers) Les plantes invasives aquatiques : nouvelle source de composés actifs contre les biofilms de <i>Candida albicans</i> - <i>Staphylococcus aureus</i>
	C4	<b>JGERENAI A Giorgi</b> (Liège) Phytochemical study of secondary metabolites of plants genus <i>Allium</i> , growing in Georgia and determination of their biological activity
	C5	<b>SAHLI Ramla</b> (Besançon) Arginase inhibitory activity of extracts from <i>Ximenia americana</i> L.
<b>Communications flash 1 à 9 :</b>		
12h00-12h45	F1	<b>BA Abda</b> (Lille / Dakar) Evaluation of the antimicrobial and antiparasitic activity of plants used in traditional medicine in Senegal
	F2	<b>DIASSY Henry</b> (Ziguinchor, Sénégal / Nancy) Etude phytochimique d'extraits de feuilles de <i>Dialium guineense</i> Willd. ( <i>Caesalpinioideae</i> ) en phase gazeuse couplée à la spectrométrie de masse, évaluation de l'activité antioxydante
	F3	<b>HOBLOSS Samir</b> Oleanane-type glycosides from two cultivars of <i>Weigela</i>

	(Dijon)	<i>florida</i> : “Minor black” and “Brigela”
F4	<b>LAHNGONG Methodius Shinyuy</b> (Liège / Douala)	Comparison of metabolic contents and pharmacological profiling of <i>Artemisia afra</i> and <i>Artemisia annua</i> from different geographical regions in Cameroon by TLC, HPLC-DAD and antiplasmodial properties
F5	<b>LE CABEC Audrey</b> (Dijon)	Identification et caractérisation de composés anti-collagénase et anti-cyclooxygénase à partir d' <i>Eclipta alba</i>
F6	<b>MARZOUG Rania</b> (Rennes)	<i>Lecanora alboflavida</i> (Lecanoraceae) as a source of chlorinated xanthenes
F7	<b>MBOMBO MUNGITSHI Patricia</b> (Liège / Kinshasa)	Etude phytochimique et évaluation de l'activité antiplasmodiale de <i>Pseudolachnostylis maprouneifolia</i> (Euphorbiaceae)
F8	<b>NAZARYAN Samvel</b> (Dijon)	The phytochemical characterization of medicinal plants used in ethnomedicine of Armenia
F9 *	<b>PACHECO Romina</b> (Toulouse)	Cultivable filamentous endophytic fungi isolated from <i>Isatis tinctoria</i> L. and their potential participation in indigo production*

\* Thématique session 4

## Mercredi 13 juillet 2021

<b>Session 3 – Conférences plénières</b>		
<i>modération : Dr. Fanny ROUSSI (ICSN)</i>		
9h- 9h45	<b>Conférence plénière 3 :</b>  <b>Dr. François-Didier BOYER (ICSN)</b>  Les strigolactones : hormones végétales et signaux allélopathiques, une opportunité pour la croissance des plantes	
9h45- 10h30	<b>Conférence plénière 4 :</b>  <b>Pr Catherine VONTHRON (Université de Strasbourg)</b>  A novel phylogenetic-based approach for new antiplasmodial leads of algal origin using Plasmodium, an automatised pharmacophoric deconvolution program	
<i>10h30-10h45 : pause</i>		
<b>Session 4 – Méthodologie, dérégulation, microorganismes</b>		
<i>modération : Pr Pascal RICHOMME (Université d'Angers)</i>		
<b>Communications courtes 6 à 10 :</b>		
10h45- 12h00	C6	<b>AKISSI Evariste</b> (Reims)  Développement de méthodes de criblage pour la dérégulation rapide du contenu en stilbènes majoritaires et la purification et caractérisation chimique des stilbènes
	C7	<b>BONNET Olivier</b> (Liège)  Identification de nouveaux alcaloïdes actifs contre la malaria par réseautage moléculaire sur la base des activités antipaludiques <i>in vitro</i> de 28 espèces de <i>Strychnos</i>
	C8	<b>COCHEREAU Bastien</b> (Nantes)  A novel vanadium haloperoxidase from a marine derived fungus strain to increase chemodiversity within complex fungal extract
	C9	<b>CROSSAY Elise</b> (Toulouse)  Isolation of daphnane-type diterpenes from the latex of <i>Hura crepitans</i> L. and activity against human colorectal cancer cells Caco-2
	C10	<b>PAGUET Anne-Sophie</b> (Lille)  Multivariate investigation of the diversity of wild hop ( <i>Humulus lupulus</i> ) collected in Northern France (région Hauts de France)
<b>Communications flash 10 à 18 :</b>		
12h00- 12h45	F10	<b>LEBLOND Axel</b> (Paris-Saclay)  Cheminformatic exploration of "Bioinspired Metabolomes" illuminates diacetyl assembly pathways toward Nesteretal A-like cage molecules
	F11	<b>BUSONT Océane</b> (Orléans)  Comparaison de méthodes pour l'obtention d'huile essentielle sur <i>Artemisia annua</i>
	F12	<b>CHAMBAUD Marine</b> (Orléans)  Optimisation par plan d'expérience avec méthodologie de surface de réponse de l'extraction verte des pigments de <i>Rubia tinctorum</i> par micro-ondes

F13	<b>MOCQUARD Julia</b> (Toulouse)	Optimization of extraction conditions and production of indigo dye from <i>Isatis tinctoria</i>
F14	<b>FLIELLER Gwenaelle</b> (Strasbourg)	Développement d'un couplage innovant pour la découverte de molécules à potentiel allélopathique
F15	<b>GROPPI Emie</b> (Toulouse)	Modulation de la production de mycotoxines et autres métabolites spécialisés de <i>Fusarium verticilli</i>
F16	<b>BERRY Olivier</b> (Nantes)	Microalgal toxin mitigation by co-isolated fungus compounds
F17 *	<b>OUATTARA Nangouban</b> (Reims / Abidjan)	Etude phytochimique et biologique des plantes médicinales antimicrobiennes de Côte d'Ivoire pour une valorisation comme antiparasitaire contre la toxoplasmose et comme antifongique contre <i>Candida auris</i> *
F18	<b>MICHAUD Aurore</b> (Nantes)	La RMN multidimensionnelle : l'outil d'exploration métabolomique de demain ?

\* Thématique session 3

## CONFÉRENCES PLENIERES : mardi 12 juillet 2022

modération : Dr. Céline RIVIERE (Université de Lille)

### Conférence 1

#### Pr Franz BUCAR

##### *Antimicrobial action of aromatic plants - more than growth inhibition*

**University of Graz, Institute of Pharmaceutical Sciences,  
Department of Pharmaceutical Chemistry, Graz, Austria.**



Study of Pharmacy and PhD study at the University of Graz, Austria.

Post-doctoral studies at The School of Pharmacy, University of London, U.K. and the Department of Pharmacognosy, Biomedical Centre, Uppsala University, Sweden.

Habilitation for Pharmacognosy at the Faculty of Natural Sciences, University of Graz; Associate Professor in Pharmacognosy; Deputy Head of the Department of Pharmacognosy; Academic advisor of international students of pharmacy at the University of Graz.

Regional representative for Middle Europe of the Phytochemical Society of Europe, PSE (2006 – 2010); General Secretary of the Phytochemical Society of Europe since 2012; Member of the Executive Board of the Austrian Pharmaceutical Society; Overseas Fellow of the Royal Society of Medicine (UK).

Member of the organizing committees of several international congresses. Member of the Management Committee, COST Action BM0701 “Antibiotic Transport and Efflux – new strategies to combat bacterial resistance (ATENS)”. Subject editor of Phytochemistry Letters; member of the scientific advisory boards and the review boards of several scientific journals.

Major research activities focus on drug discovery from traditional medicinal plants using bioassay-guided research strategies. Current topics of investigations include isolation, structure elucidation and analysis of plant constituents from traditional medicinal plants with antibacterial activity as well as plant natural products as modulators of bacterial resistance. Related to that, the interplay between plant compounds and the intestinal microbiota is subject of our research.

<https://www.researchgate.net/profile/Franz-Bucar>

## ANTIMICROBIAL ACTION OF AROMATIC PLANTS - MORE THAN GROWTH INHIBITION

RAMIĆ Dina<sup>1</sup>, ŠIMUNOVIĆ Katarina<sup>1</sup>, KLANČNIK Anja<sup>1</sup>, ALPERTH Fabian<sup>2</sup>, KUNERT Olaf<sup>3</sup>, OCHENSBERGER Sandra<sup>2</sup>, WADITZER Martin<sup>2</sup>, SMOLE MOŽINA Sonja<sup>1</sup>, BUCAR Franz<sup>2,\*</sup>

<sup>1</sup> University of Ljubljana, Biotechnical Faculty, Department of Food Science and Technology; Chair of Biotechnology, Microbiology and Food Safety, Ljubljana, Slovenia; <sup>2</sup> University of Graz, Institute of Pharmaceutical Sciences, Department of Pharmacognosy, Graz, Austria; <sup>3</sup> University of Graz, Institute of Pharmaceutical Sciences, Department of Pharmaceutical Chemistry, Graz, Austria

Antimicrobial resistance has become a major cause of concern for public health, thus new and effective control strategies are needed. In several collaborative projects, preparations of aromatic plants were characterized phytochemically and evaluated for antibacterial activity. Aside from studying direct antimicrobial effects including search for synergism, also inhibition of bacterial cell adhesion or resistance modulatory activity have been evaluated. In a recent study, essential oil as well as waste material from the hydro-distillation of lavender had particular anti-biofilm effects. RNAseq data provided new insights into the influence of the essential oil on gene expression in *Campylobacter jejuni* [1]. Similar results concerning inhibition of intercellular signalling, adhesion and biofilm formation were received for lavandin essential oil, as well as extracts from lavandin flowers prior and after hydro-distillation [2]. *Satureja montana* extracts revealed antimicrobial activity by influencing bacterial efflux pumps, similar effects were discovered for *Curcuma zanthorriza*, Figure 1 [3-5]. Extracts and essential oil of the roots of *Peucedanum ostruthium* disturbed *Campylobacter jejuni* membrane integrity at concentrations far below their respective minimum inhibitory concentrations. Furthermore, anti-adhesion activity and inhibition of intercellular signalling could be confirmed for *Juniperus communis* fruit extracts and essential oil [6,7].

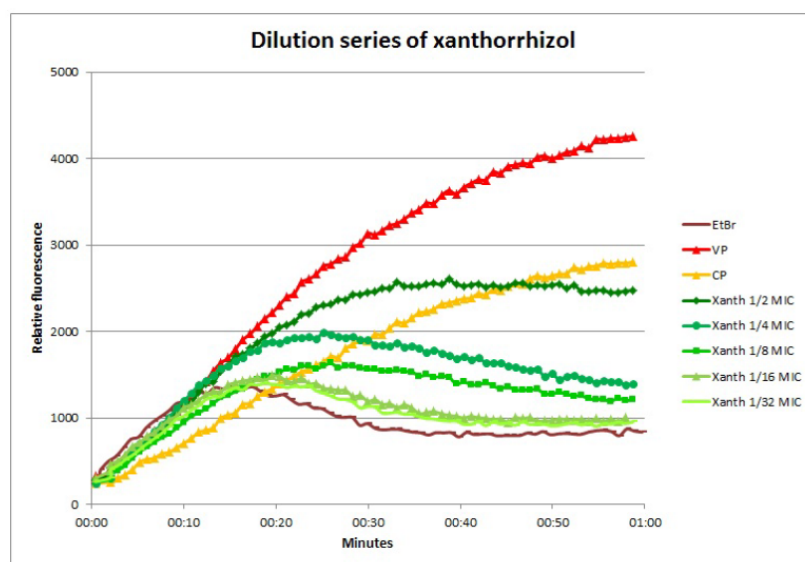


Figure 1: EtBr accumulation in *Mycobacterium smegmatis* mc<sup>2</sup> 155 with and without known efflux pump inhibitors (VP verapamil; CP chlorpromazine) or xanthorrhizol [4]

**References:** [1] Ramić, et al., *Appl. Environm. Microbiol.*, **2021**, 87:e01099-21. [2] Ramić, et al., *Antibiotics.*, **2022**, 11, 854. [3] Šimunovic, et al., *Foods* **2020**, 9, 537. [4] Prasch, *PhD Thesis*, University of Graz, **2016**. [5] Waditzer, *PhD Thesis*, University of Graz, **2020**. [6] Klančnik, et al., *Phytother. Res.*, **2018**, 32, 542-550. [7] Šimunović, et al., *Microorganisms*, **2020**, 8, 104.

## Conférence 2

### Pr David RONDEAU

#### *Nouvelles sources d'ionisation et spectrométrie de masse fondamentale dans le contexte de l'analyse des substances naturelles*

**Institut d'Electronique et des Technologies du numéRique (IETR, UMR CNRS 6164)**

**Université de Rennes 1 - Campus Beaulieu**

263 avenue du Général Leclerc – bât. 11D C.S. 74205 bio

**David RONDEAU** est Professeur des Universités (Université Bretagne Occidentale puis Université de Rennes 1) depuis 2009.

Il a obtenu son doctorat à l'Université de Rennes 1 en 1997 sous la direction du Pr. André Tallec, tout en travaillant en tant qu'ingénieur en spectrométrie de masse au Centre Régional de Mesures Physiques de l'Ouest (CRMPO).

Après un poste dans l'industrie chimique en tant que responsable des Laboratoires de Spectrométrie de Masse et de Chromatographie en Phase Liquide au sein de la société ARKEMA, il a intégré l'Université d'Angers en tant qu'ingénieur de recherche et responsable du Laboratoire de Spectrométrie de Masse du Service Commun d'Analyses Spectroscopique de l'Université d'Angers. En 1996, il a rejoint le Laboratoire CIMA, UMR CNRS 6200, (Chimie, Ingénierie Moléculaire d'Angers, actuellement MOLTECH Angers) en tant que Maîtres de conférences.

Depuis 2009, il a rejoint l'Institut d'Electronique et des Technologies du numéRique (IETR, UMR CNRS 6164) – Equipe Matériaux Fonctionnels – de l'Université de Rennes 1 en tant que Professeur des Universités, au sein duquel il continue de développer ses activités de recherche en spectrométrie de masse, aussi bien sous des aspects fondamentaux qu'appliqués. Ses thématiques de recherche concernent ainsi les méthodes d'ionisation et la spectrométrie de masse fondamentale, la réactivité des matériaux fonctionnels pour la miniaturisation, les propriétés de précurseurs de systèmes conjugués, et plus récemment l'identification structurale et l'analyse de mélanges complexes par des méthodologies de type omique, notamment dans le domaine de la lichénologie.

Il est l'auteur de 42 articles, d'un chapitre de livre et d'un brevet.

<https://www.researchgate.net/profile/David-Rondeau>



## NOUVELLES SOURCES D'IONISATION ET SPECTROMÉTRIE DE MASSE FONDAMENTALE DANS LE CONTEXTE DE L'ANALYSE DES SUBSTANCES NATURELLES

RONDEAU David

*Institut d'Electronique et des Technologies du numéRique (IETR, UMR CNRS 6164), Université de Rennes 1.*

La Spectrométrie de Masse fait partie des méthodes physico-chimiques les plus adaptées à la détermination de structures de substances d'origine naturelle. Des récents développements ont permis de conduire d'une part, à l'émergence de nouvelles méthodes de production d'ions pour améliorer l'identification rapide de composés organiques présents dans des mélanges complexes, et d'autre part, à l'amélioration de la facilité d'obtention de spectres d'ions fragments en spectrométrie de masse haute résolution.

Les sources d'ionisation qui seront évoquées ici, sont les méthodes DART (Direct Analysis in Real Time) [1-3], DESI (Desorption ElectroSpray Ionization) [4-5] et CSI (Cold-Spray Ionization) [6-7] que ce soit dans le contexte de leur utilisation en dérégulation de lichens, ou dans le cadre de la mise en évidence de la réactivité de métabolites et de leurs interactions non covalentes ; celles-ci étant souvent comparables à l'organisation de composés formant les solvants eutectiques profonds naturels. De telles associations sont souvent mises en évidence par ionisation Cold-Spray. C'est une méthode de formation d'ions gazeux décrite comme plus froide que la source ESI. Nous proposerons ici des évaluations comparatives de températures d'ions émergeant des dernières gouttes impliquées dans les processus d'ionisations ESI et CSI. Ces aspects fondamentaux de la spectrométrie de masse trouveront une application dans la mesure de stabilité d'associations entre métabolites lichéniques.

L'accumulation de spectres d'ions fragments a permis d'alimenter un certain nombre de banques de données de spectres MS-MS dans le contexte de la création de réseaux moléculaires. L'allure de ces spectres étant dépendante de l'énergie interne accumulée dans l'ion précurseur avant sa dissociation, il devient important de pouvoir proposer une méthode de calibration en énergie des spectres de masse MS-MS obtenus à partir de dispositifs aussi différents que des spectromètres de masse à temps de vol ou à analyseur de type Orbitrap. Cette tentative qui utilise le corpus théorique de la chimie-physique, sera décrite dans cette présentation.

**References :** [1] Cody et al. Anal. Chem., 2005, 77, 2297-2302. [2] Gross Anal. Bional. Chem., 2014, 406, 63-80. [3] Rondeau. Dong (Ed.).Wiley-VCH Verlag GmbH – 2018, 43-80. [4] Takats et al. Science. 2004, 306, 471-473. [5] Takats et al. J. Mass Spectrom. 2005, 40, 1261-1275. [6] Yamaguchi. J. Mass Spectrom.2003, 38, 473 – 490. [7] Percevault et al. J. Mass Spectrom. 2021, 56, e4725.

## CONFÉRENCES PLENIÈRES : mardi 13 juillet 2022

modération : Dr. Fanny ROUSSI (CNRS-ICSN)

### Conférence 3

#### Dr. François-Didier BOYER

***Les Strigolactones : hormones végétales et signaux allélopathiques, une opportunité pour la croissance des plantes***

#### Institut de Chimie des Substances Naturelles (ICSN)-CNRS

ICSN Bâtiment 27, 1 avenue de la Terrasse, 91190 Gif sur Yvette

[francois-didier.boyer@cnrs.fr](mailto:francois-didier.boyer@cnrs.fr)



**Dr. François-Didier BOYER** est Chargé de Recherche au CNRS. Il est ingénieur de l'ESPCI Paris et a obtenu son doctorat en 1994 sous la direction du Pr. Jean-Yves Lallemand à l'École Polytechnique de Palaiseau. Après un stage post-doctoral chez le Pr. Stephen Hanessian à l'université de Montréal, il a intégré l'INRA en 1995 dans l'unité de Phytopharmacie et médiateurs chimiques de Versailles pour travailler comme chimiste organicien sur différents composés intervenant dans les relations insecte-insecte et plante-insecte. Il a rejoint en juin 2008, l'équipe du Pr. Jean-Marie Beau à l'ICSN dans le cadre d'une mise à disposition de l'INRA au CNRS pour travailler sur des signaux chimiques impliqués dans la croissance végétale, les strigolactones et les lipochitooligosaccharides. Depuis janvier 2015 il appartient au groupe thématique Sondes et Modulateurs pour Cibles biologiques du département de Chémobiologie de l'ICSN et a intégré le CNRS en janvier 2020. Il a été coordonnateur-adjoint de ce département de janvier 2020 à avril 2022. Depuis avril 2022, il est coordonnateur adjoint du département Services et Plateformes scientifiques de l'ICSN. François-Didier Boyer a publié 79 articles dans des journaux à comité de lecture, 3 chapitres de livre et est l'auteur de 3 brevets.

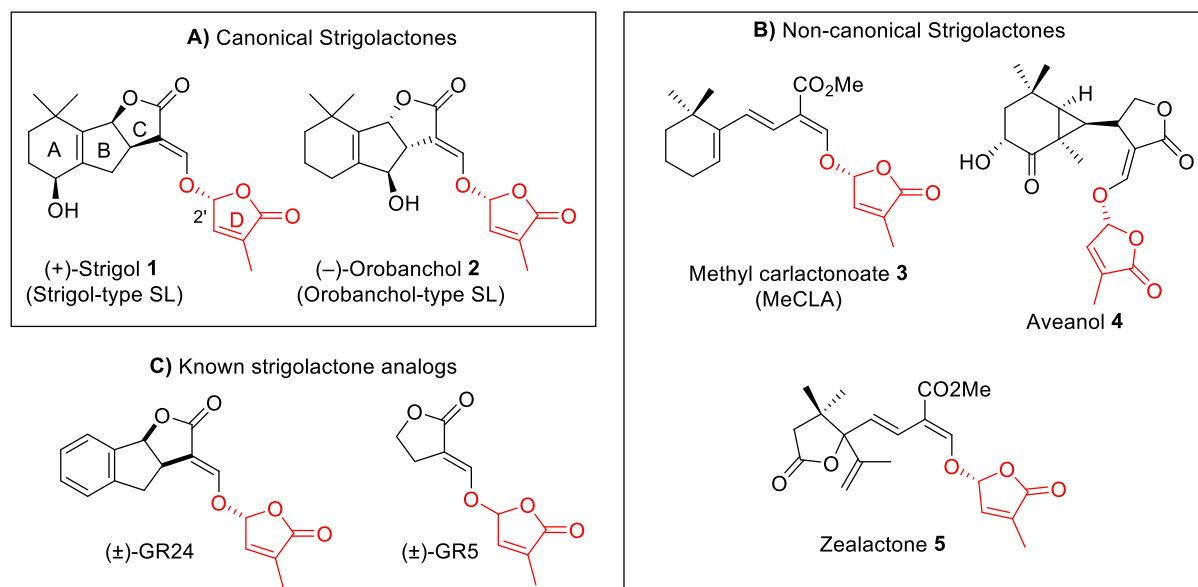
<https://www.researchgate.net/profile/Francois-Didier-Boyer>

## LES STRIGOLACTONES : HORMONES VEGETALES ET SIGNAUX ALLELOPATHIQUES, UNE OPPORTUNITE POUR LA CROISSANCE DES PLANTES

**BOYER François-Didier**

*Institut de Chimie des Substances Naturelles (ICSN-CNRS), Université Paris-Saclay, France*

Les plantes sont fixées au sol et doivent intégrer de multiples facteurs endogènes et environnementaux pour coordonner leur différenciation et leur développement. Cette coordination repose sur l'action de molécules qui agissent à de très faibles concentrations et qui constituent des signaux de communication entre les cellules et les organes, désignés sous le nom d'hormones végétales. Les strigolactones (SL) (Figure) représentent la 9<sup>e</sup> classe d'hormones végétales découvertes en 2008 [1] qui contrôle la ramification des plantes. Les SL sont connues depuis de nombreuses années pour être synthétisées au niveau des racines des plantes et exsudées dans la rhizosphère. Elles agissent comme stimulants de la germination des graines de plantes parasites, de type *Orobanche*, *Phelipanche* et *Striga* [2]. Plus récemment, il a été montré que ces composés ont un rôle majeur dans la mise en place, chez plus de 80 % des plantes, des symbioses endomycorhiziennes à arbuscules (Glomales) [3]. Les SL stimulent la germination des spores et la prolifération des hyphes du champignon à des doses extrêmement faibles ( $10^{-9}$  à  $10^{-12}$  M, production d'une plante de l'ordre de 15 pg/jour). Dans ces associations, le champignon contribue à l'alimentation hydrique et minérale de la plante et la plante fournit au champignon les sucres synthétisés grâce à la photosynthèse. Dans cette présentation, nous présenterons nos travaux [4] qui ont permis d'accroître la connaissance sur cette classe de molécules intrigantes et à multiples facettes : synthèse totale, développement d'analogues pour des études de structure activité, sondes moléculaires pour comprendre leur mécanisme de perception. Enfin nous présenterons différentes stratégies pour l'utilisation de ces composés dans un contexte agronomique.



**Figure :** Structures chimiques des SL : (A) strigolactones canoniques, (B) non canoniques et (C) analogues

**References :** [1] Gomez-Roldan *et al.*, *Nature* **2008**, 455, 189-194 ; Umehara *et al.*, *Nature* **2008**, 455, 195-200. [2] Cook *et al.*, *Science* **1966**, 154, 1189-1190. [3] Akiyama *et al.*, *Nature* **2005**, 435, 824-827. [4] Chen *et al.*, *Chem. Eur. J.* **2010**, 16, 13941-13945 ; Boyer *et al.*, *Plant Physiol.* **2012**, 159, 1524-1544 ; de Saint Germain *et al.*, *Nat. Chem. Biol.* **2016**, 12, 787-794 ; de Saint Germain *et al.*, *Plant Commun.* **2021**, 2, 100166 ; Daignan Fornier *et al.*, *J. Nat. Prod.* **2022**, DOI: 10.1021/acs.jnatprod.2c00282.

Conférence 4

Pr Catherine VONTHRON

*A novel phylogenetic-based approach for new antiplasmodial leads of algal origin using Plasmodium, an automatised pharmacophoric deconvolution program*

Laboratoire d'Innovation Thérapeutique UMR 7200 CNRS  
Université de Strasbourg, Institut du Médicament de Strasbourg, Faculté de  
Pharmacie,  
74 route du Rhin, 67401, Illkirch cedex, France



- Since 2019, Professor in Pharmacognosy at Strasbourg University
- Group leader of the Antiprotozoal Natural Products Group in the Laboratory of Therapeutic Innovation
- Director of the Bachelor « herbal health products »
- Nominated expert at ANSM (2010-2020) and at ANSES (2016-2019) for many years
- PI of the Medicines for Malaria Venture/Labex Medalis and the Satt-Connectus pre-maturation programs “Substituted flavones as new antimalarial agents” and scientific leader of different research programs (Scientific subvention from the International Center for Frontier Research in Chemistry, Starting Grant from the French Medical Research Foundation...)
- 2001-2005: Post-doctoral position at Pr R. Anton’s Lab, Faculty of Pharmacy, Strasbourg University
- 1999-2005: Assistant Professor in Pharmacology, University of Abobo-Adjamé, Ivory Coast
- 1998 PhD thesis in Molecular Pharmacology, in Pr P. Bousquet Lab, Strasbourg University

Her research focuses on untangling traditional remedies in modulating antiprotozoal activity, with an emphasis on resistant malaria, to understand the parasite biology

Mainly contributed to the discovery of substituted flavones as a new class of antimalarial agents through an ethnopharmacological approach and the identification of marine macrophytes as a source of antiprotozoal compounds. About 50 publications and chapters book, 1 patent

<https://www.researchgate.net/profile/Catherine-Vonthron-Senecheau>

## A NOVEL PHYLOGENETIC-BASED APPROACH FOR NEW ANTIPLASMODIAL LEADS OF ALGAL ORIGIN USING PLASMODESMA, AN AUTOMATISED PHARMACOPHORIC DECONVOLUTION PROGRAM?

Sergio ORTIZ<sup>1</sup>, Laure MARGUERITTE<sup>1</sup>, Flore NARDELLA<sup>1,2</sup>, Quentin CHEVALIER<sup>1,3</sup>, Anne-Marie RUSIG<sup>4</sup>, Andréa HEMMERLIN<sup>3</sup>, Marc-André DELSUC<sup>4</sup> and Catherine VONTHRON-SENECHEAU<sup>1,\*</sup>

<sup>1</sup> Laboratoire d'Innovation Thérapeutique (LIT), UMR CNRS 7200, IMS, Faculté de Pharmacie, Université de Strasbourg, France ; <sup>2</sup> Biology of Host-Parasite Interaction, Institut Pasteur, CNRS ERL9195, INSERM U1201, France ; <sup>3</sup> Institut de Biologie Moléculaire des Plantes (IBMP), UPR CNRS 2357, Université de Strasbourg, France ; <sup>4</sup>UMR BOREA, Université de Normandie, France ; <sup>5</sup> Institut de Génétique et de Biologie Moléculaire et Cellulaire (IGBMC), INSERM U596, CNRS UMR 7104, Université de Strasbourg, France ; \* Présentateur

In *Plasmodium*, the apicoplast involved in the biosynthesis of isoprenoids through the non-mammalian chloroplastic MEP pathway was inherited from a red alga. We hypothesized that molecules acting in red alga isoprenoids metabolism could interfere with that of *Plasmodium*, especially for protein prenylation which diverged over time. 11 organic extracts obtained from French contemporary red algae were screened against *P. falciparum* in vitro towards the isoprenoids pathway in a plant in vivo screening test-system. 10 of the 11 extracts were able to both inhibit *P. falciparum* growth in vitro ( $4\mu\text{g}/\text{mL} < \text{IC}_{50}$  values  $< 14\mu\text{g}/\text{mL}$ ) and protein prenylation (~20% inhibition) [1]. Moreover, biochemometrics based on 2D NMR profiling of the 4 most active extracts were performed using Plasmodesma, a novel automatized pharmacophoric deconvolution program which shortcuts unambiguously associating the 2DNMR fingerprint of a bioactive natural product with its biological activity [2, 3]. The 4 extracts shared the same pharmacophoric fingerprints, showing that red algae are indeed a source of antiplasmodial compounds able to target the isoprenoids pathway inherited from the vestigial red alga [4].

**References :** [1] Vonthron-Sénécheau *et al.*, *Mar. Drugs.*, 2011, 9, 922-933. [2] Margueritte *et al.*, *Faraday Disc.*, 2018, DOI: [10.1039/C8FD00242H](https://doi.org/10.1039/C8FD00242H). [3] Margueritte *et al.*, *Magn Reson Chem*, 2018, 56, 469. [4] Ortiz *et al.*, *Molecules*, 2022, *accepted*

## COMMUNICATIONS COURTES : résumés

### Session 2 – Phytochimie et savoirs traditionnels

modération : Pr Olivier GROVEL (Nantes)

#### Communication courte 1

### WEST AFRICA MEDICINAL PLANTS WITH ACTIVITIES AGAINST SARS-COV-2 AND OTHER VIRUSES

Simon BORDAGE<sup>1\*</sup>, Thomas MEUNIER<sup>2\*</sup>, Lowiese DESMARETS<sup>2\*</sup>, Moussa BAMBA<sup>1,3</sup>, Kévin HERVOUET<sup>2</sup>, Yves ROUILLÉ<sup>2</sup>, Nathan FRANÇOIS<sup>2</sup>, Marion DECOSSAS<sup>4</sup>, Fézan Honora TRA BI<sup>3</sup>, Olivier LAMBERT<sup>4</sup>, Peggy VAUCHEL<sup>1</sup>, Krazimir DIMITROV<sup>1</sup>, Jean DUBUISSON<sup>2</sup>, Sandrine BELOUZARD<sup>2</sup>, Sevser SAHPAZ<sup>1#</sup>, Karin SÉRON<sup>2#\*</sup>.

<sup>#</sup>equally contributed. \*Correspondant

1 University of Lille, Université de Liège, Université de Picardie Jules Verne, JUNIA, UMRT 1158 BioEcoAgro, Métabolites Spécialisés d'Origine Végétale, Lille, France ; 2 University of Lille, CNRS, INSERM, CHU Lille, Institut Pasteur de Lille, U1019-UMR 9017-CIIL-Center for Infection and Immunity of Lille, Lille, France ; 3 UFR Sciences de la Nature, Université Nangui Abrogoua, Abidjan, Côte d'Ivoire ; 4 University of Bordeaux, CBMN UMR 5248, Pessac, France.

The recent pandemics has highlighted the need for broad-spectrum antivirals against human coronaviruses (HCoVs). Other viruses, such as hepatitis C virus (HCV), are still infecting millions of people worldwide. Before the outbreak of the severe acute respiratory syndrome coronavirus 2 (SARS-CoV-2), an ethnobotanical survey was carried out in Côte d'Ivoire, and aimed at finding anti-HCV products. We selected 15 plants that were traditionally used to treat « yellow malaria », a nosological category including illness characterized by symptomatic jaundice such as hepatitis, and we screened their extracts against HCV. The most active extracts were further studied to specify their IC<sub>50</sub> and toxicity *in vitro*, and several tanins were shown to be active in two plants: *Carapa procera* (Meliaceae) and *Pericopsis laxiflora* (Fabaceae) [1]. We screened the same 15 crude extracts against HCoV-229E, a coronavirus associated with common cold. The most active extract was from *Mallotus oppositifolius* (Euphorbiaceae) and was selected for bioguided fractionation that successfully led to the identification of a highly active antiviral molecule: pheophorbide a (Pba) [2]. Pba was also shown to be active against highly pathogenic SARS-CoV-2 and Middle East respiratory syndrome coronavirus (MERS-CoV), and its mechanism of action was further assessed. Pba is an inhibitor of coronavirus entry by directly targeting the viral particle. Interestingly, the antiviral activity of Pba depends on light exposure, and Pba was shown to inhibit virus-cell fusion by stiffening the viral membrane. Moreover, Pba was shown to be broadly active against several other enveloped viruses and reduced SARS-CoV-2 and MERS-CoV infection in primary human bronchial epithelial cells. Pba is a natural antiviral agent against SARS-CoV-2 with direct photosensitive virucidal activity that holds potential for COVID-19 therapy or disinfection of contaminated surfaces.

**References:** [1] Bamba M, Bordage S, Sahuc ME, Moureu S, *et al.* Anti-HCV Tannins From Plants Traditionally Used in West Africa and Extracted With Green Solvents. *Frontiers Pharmacol.*, **2021**, 12, 789688

[2] Meunier T, Desmarests L, Bordage S, Bamba M, *et al.* A Photoactivable Natural Product with Broad Antiviral Activity against Enveloped Viruses, Including Highly Pathogenic Coronaviruses. *Antimicrob. Agents Chemother.*, **2022**, 66(2), e01581-21.

The authors declare no conflict of interest.

## Communication courte 2

### KNOWLEDGE OF HERBAL REMEDIES FOR THE TREATMENT OF SALMONELLOSIS IN PLATEAU OF BENIN: PHARMACOLOGICAL EVIDENCE

**AMOUSSA Abdou Madjid O.**<sup>1,2</sup>, **JULLIAN Valérie**<sup>1</sup> and **CHASSAGNE François**<sup>1\*</sup>

1. UMR 152 Pharmadev, Université de Toulouse, IRD, UPS, France.

2. Unité de Biochimie et Biologie Moléculaire, Laboratoire de Biochimie et Substances Naturelles Bioactives, Faculté des Sciences et Techniques, Université d'Abomey-Calavi, 04 BP 0320, Cotonou, Benin.

**Background:** Non-typhoidal invasive *Salmonella* (NTiS) diseases, like other zoonotic diseases is a global public health problem. Because of its impact on the humans and animals' health, and through the costs associated with its care, this disease represents an economic burden of both industrialized and developing countries. The present study aimed to explore the antipathogenic potential of some plants traditionally used in Benin folk medicine against NTiS diseases using *in vitro* and *in vivo* models.

**Methods:** Twenty-four selected plants belonging to 14 families were collected from different communes of the Plateau department in Benin. The *in vitro* antimicrobial activity of hydroethanolic extracts of the selected plants were screened against clinical isolates and ATCC reference strains of *Salmonella* using a broth microdilution assay. In addition, antibiofilm activities of the extracts were determined using a modified crystal violet assay. Finally, a *Salmonella enterica* serovar Typhimurium-infected rat model was used to examine the *in vivo* antibacterial potential of plants extracts.

**Results:** The results indicated that out of 24 plants, 18 plants exhibited antimicrobial activity against one or more clinical isolates and ATCC *Salmonella enterica* strains with the MIC ranging from 0.1 to 1.25 mg/mL. Among the plants tested, *Anacardium occidentale*, *Leucaena leucocephala*, *Artemisia afra*, *Detarium senegalense* and *Detarium microcarpum* were the most active. Extracts from *D. senegalensis*, *D. microcarpum* and *A. afra* (0.156 mg/mL) showed biofilm inhibition greater than 50% against clinical isolates *Salmonella* strains used. In infected rats, the number of viable *S. Typhimurium* recovered from faeces was significantly reduced at 4 days post-infection in the *D. senegalensis* and *A. afra* extracts treated group (oral administration, at 100 mg/kg;  $p < 0.05$ ) as compared with the non-treated group. Both plants extracts were found to have an effective dose (ED<sub>50</sub>) less than 100 mg/kg and are likely to stop the salmonellosis in infected animals after 10 days of treatment. In addition, these extracts did not produce any toxic signs or changes in the biochemical and hematological parameters in the treated animals. However, significant differences ( $p > 0.05$ ) were observed on toxicological parameters in infected non-treated group as compared with non-infected group.

**Conclusion:** The results indicate clear evidence supporting the antisalmonellosis activity of some selected plants. *Detarium senegalense* and *Artemisia afra* could be potential sources of new antisalmonellosis agents. Both plants represent good candidates to be further investigated for developing alternative natural salmonellosis therapies.



*Detarium senegalense* J.F. Gmel.



*Artemisia afra* Jacq ex Willd

### Communication courte 3

## LES PLANTES INVASIVES AQUATIQUES : NOUVELLE SOURCE DE COMPOSES ACTIFS CONTRE LES BIOFILMS DE *CANDIDA ALBICANS*- *STAPHYLOCOCCUS AUREUS*

**HAMION Guillaume**<sup>1\*</sup>, **AUCHER Willy**<sup>1</sup>, **TARDIF Charles**<sup>2</sup>, **MIRANDA Julie**<sup>2</sup>, **CRAPART Stéphanie**<sup>1</sup>, **ROUGER Caroline**<sup>2</sup>, **IMBERT Christine**<sup>1</sup>, **GIRARDOT Marion**<sup>1</sup>

<sup>1</sup> Laboratoire EBI, UMR CNRS 7267, Université de Poitiers, France

<sup>2</sup> Institut des Sciences de la Vigne et du Vin (ISVV), UMR 1366 Œnologie, Bordeaux, France

Les biofilms microbiens constituent un problème majeur de santé publique et une des principales difficultés dans la lutte contre les infections, notamment dus à leur résistance à la plupart des médicaments conventionnels. Ces biofilms peuvent impliquer une ou plusieurs espèces, en particulier des champignons et/ou bactéries. Notre étude vise à rechercher des molécules capables d'inhiber les biofilms bi-espèces de *Staphylococcus aureus* et *Candida albicans* (*Sa-Ca*), deux espèces couramment isolées en cas d'infection [1]. Les plantes invasives sont reconnues pour leur remarquable efficacité à coloniser les territoires non indigènes, suggérant une production de métabolites secondaires facilitant leur propagation et leur résistance aux stress [2]. Notre postulat est que ces métabolites pourraient constituer de nouvelles armes anti-biofilms.

Cinq plantes aquatiques invasives ont été récoltées en Nouvelle-Aquitaine : *Ludwigia peploides*, *Ludwigia grandiflora*, *Myriophyllum aquaticum*, *Lagarosiphon major* et *Egeria densa*. Quarante extraits ont été préparés à l'aide de solvants de différentes polarités, à partir des feuilles, des tiges et des parties immergées des plantes, puis ont été testés (50-200 µg/mL, 24 h de traitement) contre des biofilms de 24 h de *S. aureus* et *C. albicans* préformés en microplaques. Leur activité a été évaluée par un test anti-biofilm utilisant la coloration au cristal violet (CV). L'activité des extraits réduisant 50 % de la biomasse totale du biofilm bi-espèce a été analysée par cytométrie en flux et microscopie électronique à balayage afin d'évaluer l'activité spécifique contre chaque espèce microbienne. Différents couples de souches cliniques et de référence ont été utilisés pour produire les biofilms afin de s'assurer que l'activité était indépendante de la souche. Les extraits actifs ont été fractionnés, et l'activité des fractions a été évaluée par CV. Des analyses UHPLC-MS/MS ont été effectuées pour étudier leur composition chimique. Un réseau moléculaire mis en relation avec la bioactivité a été mis en œuvre [3], combinant les données des analyses UHPLC-MS/MS et des tests anti-biofilm, pour identifier les composés potentiellement actifs. Parmi les quarante extraits obtenus, celui de tige de *L. grandiflora* au 2-méthyltétrahydrofurane a montré l'activité anti-biofilm la plus élevée (inhibition > 50 % à 50 µg/mL). Son fractionnement puis la mise en réseau des fractions ont mis en évidence neuf composés corrélés à cette activité. Le composé le plus corrélé, LUG1, a réduit de manière significative les biofilms *Ca-Sa* préformés, quelles que soient les souches utilisées (inhibition > 40 % à 55 µM).

En conclusion, *L. grandiflora* contient des composés actifs, en particulier LUG1, qui est un candidat anti-biofilm prometteur. En outre, les résultats confirment l'intérêt des réseaux moléculaires pour distinguer et identifier les composés actifs dans les matrices complexes.

**References :** [1] Peters *et al.*, Clin Microbiol Rev. 2012 25(1):193-213 [2] Skubel *et al.*, Sci. Rep., 2020, 10:9749 [3] Nothias *et al.*, J. Nat. Prod., 2018, 81, 758-767



#### Communication courte 4

### PHYTOCHEMICAL STUDY OF SECONDARY METABOLITES OF PLANTS GENUS *ALLIUM*, GROWING IN GEORGIA AND DETERMINATION OF THEIR BIOLOGICAL ACTIVITY

**JGERENIA Giorgi<sup>1,2</sup>, FREDERICH Michel<sup>2</sup>, MSKHILADZE Lasha<sup>1\*</sup>**

<sup>1</sup>Department of Pharmacognosy, Direction of Pharmacognosy and pharmaceutical Botany, Faculty of Pharmacy, Tbilisi State Medical University, 33, Vazha Pshavela Ave., Tbilisi, Georgia. <sup>2</sup>Laboratory of Pharmacognosy, Center of Interdisciplinary Research on Medicines (CIRM), University of Liège, B36, 4000 Liège, Belgium.

The genus *Allium* belongs to the former family Alliaceae (now included in Amaryllidaceae). This genus involves up to 1233 species, growing especially in the northern hemisphere[1]. The flora of the Caucasus, and especially that of Georgia, is highly endemic. In the region, about 21% of the flora (900 species) is endemic: About 600 taxa are Caucasian endemic species and about 300 are endemic to Georgia [2]. The objects of this research were to study the plants *A. saxatile* and *A. ponticum* growing in Georgia. Powdered plants were extracted with 80% EtOH, using an ultrasonic water bath at 50 °C. Dried extracts of each plant were subjected to Diaion HP-20 column chromatography. The mobile phase was H<sub>2</sub>O-MeOH in gradient condition (100:0; 50:50; 0:100 v/v) and finally EtOAc to give 4 enriched fractions of each plant (A.S.F1\_H<sub>2</sub>O; A.S.F2\_MeOH-50%; A.S.F3\_MeOH-100%; A.S.F4\_EtOAc; A.P.F1\_H<sub>2</sub>O; A.P.F2\_MeOH-50%; A.P.F3\_MeOH-100%; A.P.F4\_EtOAc). Cytotoxic, anti-inflammatory, analgesic, gastroprotective and antioxidant activities of total extracts of both plants and these fractions were evaluated using different assays. During the research, the total furostanolic content was quantified, in the plant material and crude extract of both plants. Cytotoxicity was studied on melanoma cells and according to the results, it was found that total extract of *A. saxatile* and 100%-MeOH (A.S.F3 and A.P.F3) fraction of both plants exhibit cytotoxic activity. Results of other biological tests have shown that total extracts of both plants and fractions A.S.F2, A.S.F3, A.P.F2, A.P.F3 have analgesic activity. Anti-inflammatory activity and gastroprotective activity are mostly exhibited in the plant *A. saxatile* and fraction A.S.F3\_MeOH-100%. Fractions A.S.F2 and A.P.F2 have shown antioxidant activity. Individual compounds were isolated from these active fractions and determination of their chemical structure is ongoing.

All these results are important contribution about these species which were never studied and to find new sources of biologically active compounds.

**References:** [1] *Allium* L. in GBIF Secretariat (2021). GBIF Backbone Taxonomy. Checklist dataset <https://doi.org/10.15468/39omei> accessed via GBIF.org on 2022-06-01. [2] M. Davlianidze, T. Ghviniashvili, M. Mukbaniani, L. Jinjolia-Imnadze, and T. Jugheli, Nomenclature list of Georgian flora. Tbilisi, Georgia: The Botanical Institute of Ilia State University, 2018.

### Communication courte 5

## ARGINASE INHIBITORY ACTIVITY OF EXTRACTS FROM *XIMENIA AMERICANA* L.

**SAHLI Ramla<sup>1\*</sup>, EL KHAMLI Sarah<sup>1</sup>, ZEDET Andy<sup>1</sup>, PUDLO Marc<sup>1</sup>, GIRARD Corine<sup>1</sup>**

<sup>1</sup> PEPITE EA4267, University Bourgogne Franche-Comté, F-25000 Besançon, France.

Arginase is an enzyme that contributes to a wide range of pathologies when overexpressed. Arginase inhibitors are numerous but most of them are not suitable for clinical use [1]. However, natural products such as polyphenols have already shown promising anti-arginase activities [2]. This work is focusing on *Ximenia americana* L. (Ximeniaceae) since the methanolic extracts of bark, roots and leaves have shown the most interesting activities during a screening of 24 plants originating from Ivory coast and Niger. Bioguided fractionation was initiated by liquid-liquid extraction and the percentage of inhibition was evaluated *in vitro* at 100 µg/ml using a colorimetric method [3]. The roots aqueous partition had the highest inhibitory effect on arginase (87%). Among the tested partitions of the bark methanolic extract, the aqueous partition showed the most interesting activity (64%). For the leaves, the greatest activity was attributed to the ethyl acetate partition (54%). For the aqueous partitions of bark and roots, HPLC analysis showed similar profiles. Thus, bioguided fractionation focused on the roots partition which showed the highest activity. Tannins were removed using SPE (polyamide column) since they were detected by TLC in both partitions. Activities of the three fractions obtained were analysed suggesting that the inhibitory capacity of the roots and the barks involves a non-specific action of tannins. For the leaves, HPLC analyses of the ethyl acetate partition showed two major compounds, namely P1 and P2, isolated by PLC together with two fractions F1 and F2. Arginase activity tests showed that F1 has the highest activity (59%) followed by P1 (31%). NMR analyses of P1 allowed its identification as the flavonoid avicularin for which an inhibitory effect was previously demonstrated against *Leishmania* arginase [4]. F1 was subjected to further purification steps associating CPC with PLC, which allowed the isolation of 5 compounds. Analyzing the activity of these compounds will lead to the identification of the products responsible for the inhibitory potential of the leaves.

**References:** [1] Muller *et al.*, *RSC Med. Chem.*, 2020, 11 (5), 559-568. [2] Girard-Thernier *et al.*, *Mini-Rev Med Chem.*, 2015, 15(10),798-808. [3] Bordage *et al.*, *Planta Med.*, 2017, 83, 647–653. [4] Da Silva *et al.*, *Food Funct.*, 2019, 10, 3172–3180.

## Session 4 – Méthodologie, déréplication, microorganismes

modération : Pr Pascal RICHOMME (Université d'Angers)

### Communication courte 6

#### DEVELOPPEMENT DE METHODES DE CRIBLAGE POUR LA DEREPLICATION RAPIDE DU CONTENU EN STILBENES MAJORITAIRES ET DE PURIFICATION ET CARACTERISATION CHIMIQUE DES STILBENES

**AKISSI Evariste<sup>1</sup>, SURSIN Emmanuel<sup>2</sup>, FLOURAT Amandine<sup>2</sup>, VINET Julien<sup>2</sup>, MARTINEZ Agathe<sup>1</sup>, BORIE Nicolas<sup>1</sup>, PEYROT Cedric<sup>2</sup>, COUROT Eric<sup>3</sup>, NUZILLARD Jean-Marc<sup>1</sup>, RENAULT Jean-Hugues<sup>1</sup>, ALLAIS Florent<sup>2</sup> and VOUTQUENNE-NAZABADIOKO Laurence<sup>1</sup>**

<sup>1</sup> Institut de Chimie Moléculaire de Reims (ICMR), Université de Reims Champagne-Ardenne, France

<sup>2</sup> URD Agro-Biotechnologies Industrielles (ABI), AgroParisTech, CEBB, France

<sup>3</sup> Résistance Induite et Bioprotection des plantes (RIPB), Université de Reims Champagne-Ardenne, France

Les stilbènes ont reçu beaucoup d'attention au cours des deux dernières décennies, suite à la découverte du resvératrol dans le vin. Depuis lors, il y a eu un nombre croissant d'articles rapportant diverses activités biologiques des stilbènes naturels. Le but de cette étude était de déterminer de manière rapide les dimères majoritaires glycosylés ou non de stilbènes. Ces dimères ont été obtenus par synthèse enzymatique ou catalytique du resvératrol et du piceïd. Les mélanges de stilbènes ont été fractionnés par Chromatographie de Partage Centrifuge (CPC) en utilisant une méthode de gradient d'élution et les principaux stilbènes contenus dans les fractions ont ensuite été identifiés en utilisant la procédure CaraMel (Caractérisation dans un Mélange), qui est une méthode de déréplication basée sur la RMN <sup>13</sup>C et d'autres analyses RMN 2D telles que HSQC, HMBC et COSY, ainsi que la spectrométrie de masse. Par la suite, les fractions ont successivement été purifiées par différentes techniques de chromatographie liquide haute performance (CLHP), afin de tester leur activité biologique des produits purs. Ainsi, nous avons pu identifier l' $\epsilon$ -viniférine, les diastéréoisomères du *E*-labruscol, le leachianol F et G, la  $\delta$ -viniférine, le pallidol, la scirpusine A, la  $\delta$ -piceïd, ainsi que d'autres dimères.

**Références :** [1] Nivelle *et al.*, *Molecules*, 2017, 22, 474. [2] Aires *et al.*, *Mol. Nutr. Food Res.*, 2014, 58, 1785-1794. [3] Zhang *et al.*, *Int. J. Mol. Sci.*, 2012, 13, 5998-6008. [4] Ponzoni *et al.*, *Adv. Synth. Catal.*, 2007, 349, 1497-1506.

## Communication courte 7

### IDENTIFICATION DE NOUVEAUX ALCALOÏDES ACTIFS CONTRE LA MALARIA PAR RÉSEAUTAGE MOLÉCULAIRE SUR BASE DES ACTIVITÉS ANTIPLASMODIALES *IN VITRO* DE 28 ESPÈCES DE *STRYCHNOS*

**BONNET Olivier<sup>1\*</sup>, BENIDDIR Mehdi A.<sup>2</sup>, CHAMPY Pierre<sup>2</sup>, DEGOTTE Gilles<sup>1</sup>, MAMEDE Lúcia<sup>1</sup>, DESDEMOUSTIER Pauline<sup>1</sup>, LEDOUX Allison<sup>1</sup>, TIABOU TCHINDA Alembert<sup>1,3</sup>, ANGENOT Luc<sup>1</sup>, FRÉDÉRICH Michel<sup>1</sup>**

<sup>1</sup>CIRM, Laboratoire de Pharmacognosie, Université de Liège, Belgique. <sup>2</sup>Équipe de « Chimie des produits naturels », BioCIS, CNRS, Université Paris-Saclay, 92290 Châtenay-Malabry, France. <sup>3</sup>Institut de recherches Médicales et d'études des Plantes Médicinales (IMPM), PO Box 13033 Yaoundé, Cameroun

Les plantes du genre *Strychnos* ont fait l'objet de nombreuses recherches tant pour leurs propriétés tétanisantes et curarisantes [1] que pour leurs multiples usages traditionnels [2]. Parmi ceux-ci, nous pouvons citer le traitement contre des morsures de serpent, les bronchites, les rhumatismes et les fièvres. Lors des recherches antérieures, il a été mis en évidence des activités antiplasmodiales prometteuses contre des souches de *Plasmodium falciparum* sensibles et/ou résistantes à la chloroquine (CQS et CQR, respectivement). C'est notamment le cas de l'extrait à l'acétate d'éthyle des racines de *Strychnos usambarensis* (CI<sub>50</sub> de 0,457 ± 0,005 µg/mL (CQS) et 0,039 ± 0,0029 µg/mL (CQR)). De nombreux alcaloïdes ont été isolés de ces espèces comme la 3',4'-dihydrousambarensine, isolée des racines de *S. usambarensis* et active contre les souches sensibles et résistantes à la chloroquine de *P. falciparum* (CI<sub>50</sub> de 0,857 ± 0,061 µM (CQS) et 0,032 ± 0,002 µM (CQR)) [3].

Avec le développement d'outils de déréplication, notamment le réseautage moléculaire [4], nous avons pu explorer les métabolites de 43 extraits bruts méthanoliques obtenus à partir de différentes parties de 28 espèces de *Strychnos*. Grâce à la mise en place de bases de données spectrales partagées comme la MIADB, qui contient un vaste panel de spectres de masse d'alcaloïdes indolomonoterpéniques [5], nous avons pu discriminer les métabolites connus de ceux qui ne le sont pas. Parmi les molécules connues, nous avons pu identifier la strychnine [6], l'icajine, la sungucine, l'usambarensine, la strychnofoline, et bien d'autres. Pour explorer en détail le réseau moléculaire, ce dernier a été classifié au moyen du workflow MolNetEnhancer [7]. De plus, une dimension biologique a été ajoutée comme métadonnées sur la base d'une évaluation des activités antiplasmodiales des 43 extraits bruts méthanoliques, déterminées à partir de 3 expériences indépendantes. Les différents niveaux d'activités biologiques ont été divisés en 5 niveaux afin de faciliter l'exploitation du réseau moléculaire. L'exploration de ce dernier a permis de mettre en évidence de nouveaux alcaloïdes potentiellement actifs. C'est par exemple le cas des alcaloïdes de masses *m/z* 408,2434, 447,2552, 463,2373 et 893,5042, non identifiables dans le dictionnaire des produits naturels [8] et présents dans le cluster de l'usambarensine et de ses dérivés. Il s'agit probablement de dérivés de l'usambarensine, dont la structure reste à élucider. D'autres métabolites intéressants ont également été détectés dans le cluster de la sungucine et de la strychnogucine B ainsi que dans celui de la strychnofoline.

Cette étude démontre que les plantes du genre *Strychnos* restent une source prometteuse de nouvelles substances bioactives et que l'avènement de divers outils de déréplication nous offre de nouvelles pistes d'identification de molécules à haute valeur ajoutée.

**Références :** [1] Philippe, G. *et al.*, *Toxicon*, 2004, 44, 405-416. [2] Dr. Duke's Phytochemical and Ethnobotanical Databases, US Dpt of agriculture, <https://phytochem.nal.usda.gov/phytochem/search/list>, consulté le 13 juin 2022. [3] Frédéric, M. *et al.*, *Antimicrob. Agents Chemother.*, 1999, 43, 2328-2331. [4] Fox Ramos, A.E. *et al.*, *Nat. Prod. Rep.*, 2019, 36,960-980. [5] Fox Ramos, A.E. *et al.*, *Sci. Data*, 2019, 6, 15. [6] Bonnet, O. *et al.*, *Toxicon*, 2022, *in press*, [doi: 10.1016/j.toxicon.2022.06.002](https://doi.org/10.1016/j.toxicon.2022.06.002) [7] Ernst, M. *et al.*, *Metab.*, 2019, 9, 1-25. [8] <https://dnp.chemnetbase.com/faces/chemical/ChemicalSearch.xhtml>, consulté le 13 juin 2022.

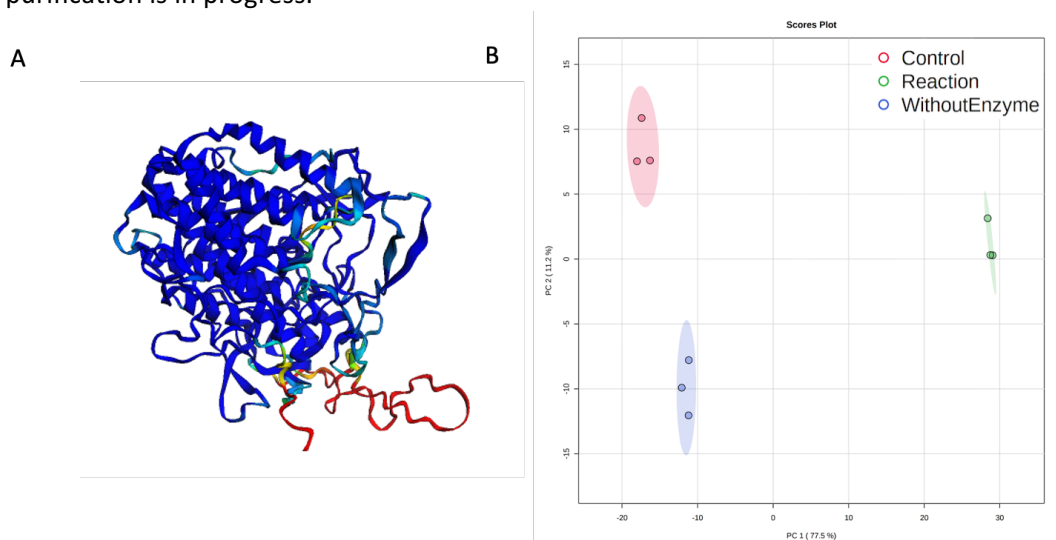
## Communication courte 8

# A NOVEL VANADIUM HALOPEROXIDASE FROM A MARINE DERIVED FUNGAL STRAIN TO INCREASE CHEMODIVERSITY WITHIN COMPLEX FUNGAL EXTRACTS

COCHEREAU Bastien<sup>1,2</sup>, LOKUHITIGE Sandamali<sup>1</sup>, POUCHUS Yves-François<sup>1</sup>, MESLET-CLADIÈRE Laurence<sup>2</sup> and ROULLIER Catherine<sup>1\*</sup>

<sup>1</sup> Institut des Substances et Organismes de la Mer (ISOMER UR-2160), Nantes Université, France ; <sup>2</sup> Laboratoire Universitaire de Biodiversité et d'Écologie Microbienne (LUBEM UR-3882), Université de Bretagne Occidentale, France.

Vanadium-haloperoxydases (vHPOs) are metalloenzymes which catalyze the synthesis of halogenated metabolites<sup>1</sup>. They usually activate C-H bonds by adding chlorine, bromine or iodine atom to an electron rich substrate. First described in algae, they have rarely been observed in fungi<sup>2,3</sup>. Using genome mining approaches on different marine fungal strains, one gene of vHPO was detected in the filamentous black yeast *Hortaea werneckii* (UBOCC-A-208029). This enzyme, which is the second to be described in a marine fungal derived strain, was heterologously expressed in *Escherichia coli* BL21 (DE3). The recombinant, purified protein (HwvCPO) was biochemically characterized and found to possess higher affinity for bromine ( $K_m = 26 \mu\text{M}$ ) than for chlorine ( $K_m = 237 \text{mM}$ ) (Figure 1-A). In the field of medicinal chemistry, halogen atoms can increase drug-target affinity, optimize pharmacokinetic parameters or increase stability of the biomolecular conformation by creating halogen-water-hydrogen bridges<sup>4,5</sup>. In the field of natural product chemistry, identifying new bioactive compounds becomes very challenging as many major compounds have already been described and lab culture conditions do not always allow to express silent biosynthetic gene clusters. Therefore, we investigated a new strategy to increase chemodiversity of fungal extract by enzymatic modifications using HwvCPO. Extracts from *Penicillium expansum* (Figure 1-B), *Aspergillus pseudoglaucus*, *Trichoderma* sp. and *H. werneckii* were used for reactions. Our first results using HwvCPO, allowed us to highlight the production of new compounds with potentially new activities which purification is in progress.



**Figure 1:** **A)** *Hortaea werneckii* chloroperoxydase (HwvCPO) model obtain using AlphaFold2. **B)** Principal component analysis of the metabolic profiles (ESI+) from *Penicillium expansum* extract that was subjected to three treatments: negative control (red), enzymatic reaction with HwvCPO (green) and reaction mix without enzyme (blue).

**References:** [1] McKinnie *et al.*, *Methods Enzymol.*, 2018, 604, 405-424. [2] Agarwal *et al.*, *Chem Rev.*, 2017, 117 (8), 5619-5674. [3] Leblanc *et al.*, *Coord Chem Rev.*, 2015, 301-302, 134-146. [4] Zhou *et al.*, *J Struct Biol.*, 2010, 169 (2), 172-82. [5] Xu *et al.*, *J Chem Inf Model.*, 2014, 54 (1), 69-78.

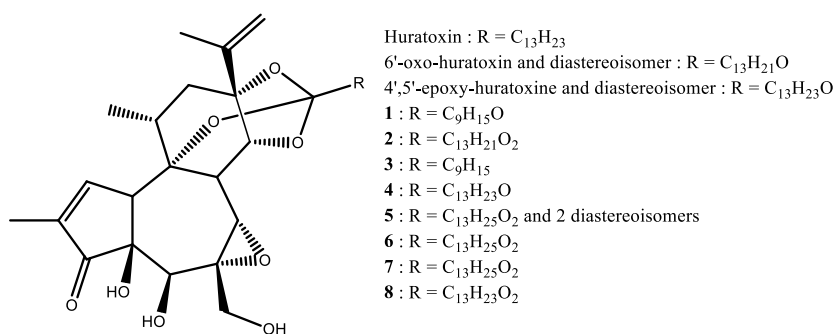
## Communication courte 9

# ISOLATION OF DAPHNANE-TYPE DITERPENES FROM THE LATEX OF *HURA CREPITANS* L. AND ACTIVITY AGAINST HUMAN COLORECTAL CANCER CELLS CACO-2

Elise CROSSAY,<sup>1</sup> Valérie JULLIAN<sup>1</sup>, Anne-Cécile LE LAMER<sup>1</sup>, Mejia KEMBER<sup>2</sup>, Billy Joel CABANILLAS<sup>3</sup>, Claire RACAUD-SULTAN<sup>4</sup> and Nicolas FABRE<sup>1</sup>

<sup>1</sup>UMR 152 PharmaDev, Université de Toulouse, IRD, UPS, France. <sup>2</sup> Instituto de Investigaciones de la Amazonia Peruana (IIAP), Iquitos, Peru. <sup>3</sup> Laboratorios de Investigación y Desarrollo, Facultad de Ciencias y Filosofía, Universidad Peruana Cayetano Heredia, Lima 15102, Peru. <sup>4</sup> IRSD U1220, ENVT, INRAe, INSERM, Université de Toulouse, UPS, Toulouse, France  
E-mail : elise.crossay@gmail.com

Plant biodiversity represents an important reservoir of original bioactive molecules. *Euphorbiaceae*, in particular, produce a latex containing many specialized bioactive metabolites such as diterpenes [1]. This project focuses on the study of the latex of *Hura crepitans* L. (*Euphorbiaceae*) collected in the Amazon rainforest, and in particular on the isolation of daphnane-type diterpenes owing to their biological potential [2]. Indeed, these molecules have shown interest in the treatment of colorectal cancer, which is the third most common cancer worldwide with 1.8 million cases in 2018 [2,3]. In this work, we present the isolation, structure elucidation and biological activity of fifteen daphnanes diterpenes. Thus, the structures of 3 known molecules (huratoxin, 6'-oxo-huratoxin and 4',5'-epoxyhuratoxin) [4] and twelve original derivatives (compounds **1-8**, iso-6'-oxo-huratoxin and iso-4',5'-epoxy-huratoxin) have been elucidated by the means of exhaustive spectroscopic techniques and particularly MS, NMR and Circular Dichroism. The cytostatic activity of five compounds was assessed on the human colorectal cancer cell line Caco-2. Huratoxin and 4',5'-epoxy-huratoxin were found to exhibit the most significant cell growth inhibition against Caco-2 and exhibited morphological modifications suggesting formations mimicking the intestinal crypt architecture.



**Figure 1:** Structure of isolated daphnanes

**References:** [1] Mwine JT, Van Damme P, *J. Med. Plant Res.*, 2011, 5, 652-662. [2] Trinel M, Le Lamer A-C, Jullian V, Jacquemin D, Graton J, Cristofolie V, Crossay E, Yassine M, Rolland C, Vergnolle N, Mejia K, Cabanillas B, Racaud-sultan C, Fabre N, *Bioorg. Chem.*, 2020, 103, 1-13. [3] OMS, Centre international de recherche sur le cancer, Communiqué de presse N°263, 2018, 1-3. [4] Trinel M, Thèse de doctorat, 2018, 1-276

## Communication courte 10

### MULTIVARIATE INVESTIGATION OF THE DIVERSITY OF WILD HOPS *HUMULUS LUPULUS* COLLECTED IN NORTHERN FRANCE (HAUTS-DE-FRANCE REGION)

**PAGUET Anne-Sophie<sup>1</sup>, SIAH Ali<sup>1</sup>, LEFEVRE Gabriel<sup>1</sup>, MOUREU Sophie<sup>1</sup>, DERAÇINOIS Barbara<sup>1</sup>, CADALEN Thierry<sup>1</sup>, RAMBAUD Caroline<sup>1</sup>, FAUCONNIER Marie-Laure<sup>1</sup>, WATERLOT Christophe<sup>2</sup>, FONTAINE Jean-Xavier<sup>1</sup>, MOLINIE Roland<sup>1</sup>, SAHPAZ Sevser<sup>1</sup>, RIVIERE Céline<sup>1</sup>**

<sup>1</sup>UMRt BioEcoAgro, Joint Research Unit 1158, Univ. Lille, INRAE, Univ. Liège, UPJV, JUNIA, Univ. Artois, Univ. Littoral Côte d'Opale, ICV—Institut Charles Viollette, F-59650 Villeneuve d'Ascq, France

<sup>2</sup>Univ. Lille, Institut Mines-Télécom, Univ. Artois, JUNIA, ULR 4515 – LGCgE, Laboratoire de Génie Civil et géo-Environnement, F-59000 Lille, France

North of France is a historical region for beer production and for hop cultivation. Female cones are used in brewery for their bitterness and their flavours, as well as for their antimicrobial properties. Because of several factors, this local production is declining since the middle of the XX<sup>th</sup> century. However, in recent years, a new dynamism is observed partly explained by a renewed interest in aromatic and craft beers. As a result, microbreweries are widely developing, using local and sustainable ingredients [1]. To answer this consumption shift, hops production is adapting. Especially hop growers are looking for hops suitable to local terroir, with good yields but above all, good chemical qualities for brewery. In addition, due to their chemical composition, hops have interesting biological properties [2]. In particular, hops produce prenylated chalcones including xanthohumol and desmethylxanthohumol as well as acylphloroglucinol derivatives with alpha and beta acids. The bitterness searched by brewers is due to alpha acids, whereas flavors come from volatile compounds [1].

As wild hops are recognized to be a potential source of traits of interest for varietal selection, several publications are dedicated to the genetic and the chemical investigation of wild hops [1,3]. Our work is the first investigation of the hop diversity in Northern France. We are exploring the chemical and genetic diversity among fifty wild hops collected in 2019 on several natural sites of the North of France. These wild hops are compared with ten commercial varieties and three old varieties. A biotope characterization was realized on soil samples. Genetic analyses were focused on the study of microsatellites regions [4]; the phytochemical characterization of hops was based on the quantification of their major secondary metabolites by UHPLC-UV, untargeted metabolomics analysis by UHPLC-HRMS and volatile compounds analysis by HS-SPME GC-MS. Multivariate data have been correlated by principal component analysis and multifactorial analysis. These results allowed a differentiation of collection sites and revealed a great genetic diversity among wild accessions, compared to the 13 hop varieties. This diversity was also observed among the chemical characterization. These different datasets and their statistical analysis provided a good framework for the investigation of this diversity.

**References:** [1] Paguet, Siah, Lefèvre, Sahpaz and Rivière. Agronomic, genetic and chemical tools for hop cultivation and breeding. *Phytochemistry Reviews* **2022**, 21, 667-708. [2] Bocquet, Sahpaz, Hilbert, Rambaud and Rivière. *Humulus lupulus* L., a Very Popular Beer Ingredient and Medicinal Plant: Overview of Its Phytochemistry, Its Bioactivity, and Its Biotechnology. *Phytochemistry Reviews* **2018**, 17 (5), 1047-90. [3] Mongelli, Rodolfi, Ganino, Marieschi, Dall'Astra, Bruni. Italian hop germplasm: Characterization of wild *Humulus lupulus* L. genotypes from Northern Italy by means of phytochemical, morphological traits and multivariate data analysis. *Industrial Crops and Products* **2015**, 70, 16–27 [4] Jakse, Luthar, and Javornik. New Polymorphic Dinucleotide and Trinucleotide Microsatellite Loci for Hop *Humulus lupulus* L. *Molecular Ecology Resources*. **2008**, 8 (4), 769-72.

## COMMUNICATIONS FLASH : résumés

### Session 2 – Phytochimie et savoirs traditionnels

modération : Pr Olivier GROVEL (Nantes)

#### Communication flash 1

### EVALUATION OF THE ANTIMICROBIAL AND ANTIPARASITIC ACTIVITIES OF PLANTS USED IN TRADITIONAL MEDICINE IN SENEGAL

**Abda Ba<sup>1,2,\*</sup>, Vincent Roumy<sup>1</sup>, Jennifer Samaille<sup>1</sup>, Maude Bourlet<sup>3</sup>, Thierry Hennebelle<sup>1</sup>, Sevser Sahpaz<sup>1</sup>, Insa Seck<sup>2</sup>, Samba Fama Ndoye<sup>2</sup>, Lala Aïcha Ba<sup>2</sup>, Rokhaya Sylla Guèye<sup>2</sup>, Djibril Fall<sup>2</sup>, Christel Neut<sup>4</sup>, Joëlle Quetin Leclercq<sup>3</sup>, Matar Seck<sup>2</sup>, Céline Rivière<sup>1</sup>**

<sup>1</sup> Joint Research Unit 1158 BioEcoAgro, University of Lille, Junia, INRAE, University of Liège, UPJV, University of Artois, ULCO, 59000 Lille, France

<sup>2</sup> Laboratoire de Chimie Organique et Thérapeutique, Faculté de Médecine, de Pharmacie et d'Odontologie de l'Université Cheikh Anta Diop de Dakar, BP 5005, Dakar-Fann, Sénégal

<sup>3</sup> Pharmacognosy Research Group, Louvain Drug Research Institute, Université Catholique de Louvain, Avenue E. Mounier, 72, B 01.72.03-1200 Brussels, Belgium

<sup>4</sup> Univ. Lille, INSERM, CHU Lille, U1286 INFINITE Institute for Translational Research in Inflammation, Univ. Lille, F-59000 Lille, France

Infectious diseases with bacterial origin represent one of the main causes of death in the world. Each year, they are the cause of approximately 17 million deaths [1]. Parasitic infections also deserve special attention due to the lack of effective treatments. Among these infections, human African trypanosomiasis, or sleeping sickness, and leishmaniasis represent a real public health problem [2]. The impact of these infections on mortality requires the research and development of new antibacterials and antiparasitics. The discovery of new active natural products can be based on plant biodiversity. Africa in general, and Senegal in particular, is rich in many medicinal plants used by traditional medicine in the treatment of infectious diseases [3]. An ethnobotanical survey was conducted in Senegal among herbalists, traditional healers and households. A total of 127 informants participated in this study. This survey allowed to identify a total of 41 plant species belonging to 20 botanical families used for the management of infectious pathologies. Based on the number of citations per plant, different parts of 27 plant species were collected. The antimicrobial activity of the crude methanolic extracts of the different parts of harvested plants was evaluated *in vitro* on a panel of 36 human pathogenic strains, including Gram-positive and Gram-negative bacteria and yeasts. The antiparasitic activity of the crude extracts was also determined *in vitro* on two parasites: *Trypanosoma brucei brucei* and *Leishmania mexicana mexicana*. Finally, the cytotoxic activity of methanolic extracts on non-cancerous lung fibroblasts WI-38 was evaluated. The most active methanolic extracts were fractionated by solvents of increasing polarity and the sub-extracts were tested against the same microbial strains. This screening confirms the antimicrobial and antiparasitic potential of most plants.

**References:** [1] World Health Organization. (2021). Global antimicrobial resistance and use surveillance system (GLASS) report: 2021. World Health Organization. <https://apps.who.int/iris/handle/10665/341666> [2] Bocquet et al. Phenolic Compounds from *Humulus lupulus* as Natural Antimicrobial Products: New Weapons in the Fight against Methicillin Resistant *Staphylococcus aureus*, *Leishmania mexicana* and *Trypanosoma brucei* Strains. *Molecules*, **2019**, 24(6), 1024. <https://doi.org/10.3390/molecules24061024> [3] Le Grand, A., & Wondergem, P. A. Les phytothérapies anti-infectieuses de la forêt-savane, Sénégal (Afrique occidentale) I. Un inventaire. *Journal of Ethnopharmacology*, **1987**, 21(2), 109-125.



Communication flash 2

**ETUDE PHYTOCHIMIQUE D'EXTRAITS DE FEUILLES DE *DIALIUM GUINEENSE* WILLD. (CAESALPINIOIDEAE) EN PHASE GAZEUSE COUPLEE A LA SPECTROMETRIE DE MASSE, EVALUATION DE L'ACTIVITE ANTIOXYDANTE**

DIASSY Henry<sup>1,3</sup>, DIATTA Charles<sup>2</sup>, SPINA Rosella<sup>1</sup>, GASSAMA Abdoulaye<sup>3</sup>, SY Guata Yoro<sup>2</sup>, LAURAIN-MATTAR Dominique<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Laboratoire Agronomie et Environnement, LAE UMR 1121, INRAE, Université de Lorraine, F-54000 Nancy, France

<sup>2</sup>Laboratoire de Pharmacologie et Pharmacodynamie, FMPO, UCAD, BP 5005, Dakar-Fann, Sénégal

<sup>3</sup>Laboratoire de Chimie et Physique des Matériaux (LCPM), FST, Université Assane SECK de Ziguinchor, Sénégal

*Dialium guineense* Willd. (Caesalpinioideae, Fabaceae) est une plante de la pharmacopée africaine, dont les feuilles sont utilisées traditionnellement au Sénégal dans le traitement du diabète de type 2 [1]. Cette étude a pour objectif de réaliser une étude phytochimique d'extraits de feuilles de *D. guineense* pour laquelle il existe très peu d'informations scientifiques dans la littérature. Les feuilles ont été extraites successivement avec du cyclohexane, du chloroforme, de l'acétate d'éthyle et de l'éthanol.

Le criblage phytochimique, réalisé par CCM, de différents extraits de feuilles montre la présence de terpènes, de stérols et de flavonoïdes. L'analyse en GC-MS des différents extraits a permis de dénombrer 17 et 35 composés dans l'extrait cyclohexanique, 63 et 42 dans l'extrait chloroformique, 44 et 76 dans l'extrait d'acétate d'éthyle et 25 et 43 dans l'extrait éthanolique respectivement, avant et après dérivatisation. L' $\alpha$ -tocophérol (Figure 1) a été identifié et quantifié dans les extraits cyclohexanique (647  $\mu\text{g}/\text{mL}$ ), chloroformique (128  $\mu\text{g}/\text{mL}$ ) et l'extrait à l'acétate d'éthyle (112  $\mu\text{g}/\text{mL}$ ). Cette molécule n'est pas présente dans l'extrait éthanolique.

L'évaluation de l'activité antioxydante a été réalisée sur les quatre extraits. En perspectives de ce travail, l'activité hypoglycémiant sera évaluée pour les quatre extraits et les composés isolés.

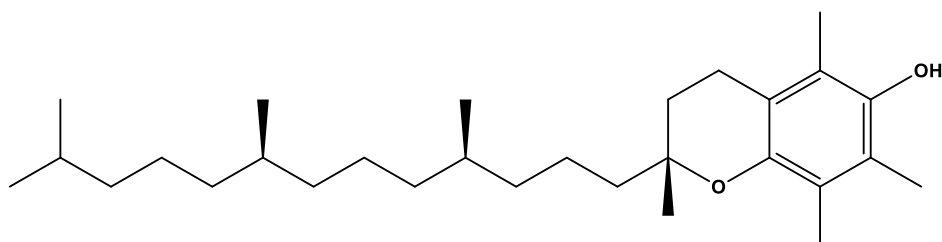


Figure 1 : Structure de l' $\alpha$ -tocophérol

**Références :** [1] F. S. Barboza, M. Sène, D. Doupa, and M. Ba. "Opposite Effects of F1 and F5 Fractions of Total Methanol Leaf-extract of *Dialium guineense* (Cesalpinaceae) on Blood Glucose in Rat," *JAMPS*, 2020, 22(2), 1–8.

### Communication flash 3

## OLEANANE-TYPE GLYCOSIDES FROM TWO CULTIVARS OF *WEIGELA FLORIDA*: “MINOR BLACK” AND “BRIGELA”

**HOBLOSS Samir<sup>1</sup>, BRUGUIERE Antoine<sup>1</sup>, CHAMPY-TIXIER Anne-Sophie<sup>1,4</sup>, MIYAMOTO Tomofumi<sup>2</sup>, TANAKA Chiaki<sup>2</sup>, DESSERTAINE Simon<sup>1</sup>, SAUTOUR Marc<sup>3</sup>, LACAILLE-DUBOIS Marie-Aleth<sup>1</sup>, MITAINE-OFFER Anne-Claire<sup>1\*</sup>**

<sup>1</sup>Centre des Sciences du Goût et de l'Alimentation, CNRS, INRAE, Institut Agro, Laboratoire de Pharmacognosie, UFR des Sciences de Santé, Université de Bourgogne Franche-Comté, BP 87900, 21079 Dijon cedex, France ; <sup>2</sup>Graduate School of Pharmaceutical Sciences, Kyushu University, Fukuoka, 812-8582, Japan ; <sup>3</sup>Parasitology and Mycology Laboratory, Hôpital du Bocage, BP 77908, 21079 Dijon cedex, France ; <sup>4</sup>PAT Zerbaz, 97410 Saint-Pierre, Ile de la Réunion, France.

Saponins are triterpene or steroidal glycosides known for their vast panel of biological activities, among which their defense role against phytopathogens. The *Weigela* genus has been the subject of several studies leading to the isolation of such triterpene glycosides. Thirteen saponins were thus extracted from two *Weigela* cultivars: *W. florida* “Minor black” and *W. florida* “Brigela”. Four of the compounds were never reported in the literature before: 3-*O*-β-D-xylopyranosyl-(1→4)-β-D-xylopyranosyl-(1→3)-α-L-rhamnopyranosyl-(1→2)-β-D-xylopyranosyl oleanolic acid, 3-*O*-β-D-xylopyranosyl-(1→4)-β-D-xylopyranosyl-(1→3)-α-L-rhamnopyranosyl-(1→2)-α-L-arabinopyranosyl oleanolic acid, 3-*O*-β-D-xylopyranosyl-(1→4)-β-D-xylopyranosyl-(1→4)-β-D-xylopyranosyl-(1→3)-α-L-rhamnopyranosyl-(1→2)-α-L-arabinopyranosyl oleanolic acid, and 3-*O*-β-D-xylopyranosyl-(1→4)-β-D-xylopyranosyl-(1→4)-β-D-xylopyranosyl-(1→4)-β-D-xylopyranosyl-(1→3)-α-L-rhamnopyranosyl-(1→2)-α-L-arabinopyranosyl oleanolic acid. Their full structural elucidation, reported in this article, required extensive 1D and 2D NMR experiments, as well as mass spectrometry analysis. Four compounds among the known ones were in sufficient amount to be tested for their antifungal activity against *Candida albicans*, and their antibacterial activity against *Staphylococcus aureus* and *Pseudomonas aeruginosa*. None of the molecules showed an interesting activity, but it allowed us to discuss the structure-activity relationship of saponins.

#### Communication flash 4

### COMPARISON OF METABOLIC CONTENTS AND PHARMACOLOGICAL PROFILING OF *ARTEMISIA AFRA* AND *ARTEMISIA ANNUA* FROM DIFFERENT GEOGRAPHICAL REGIONS IN CAMEROON BY TLC, HPLC-DAD AND ANTI-PLASMODIAL PROPERTIES.

**Lahngong METHODIUS SHINYUY<sup>1,2,3</sup>, Gisèle ETAME LOE<sup>2</sup>, Olivia JANSEN<sup>1</sup>, Lúcia MAMEDE<sup>1</sup>, Naima BOUSSIF<sup>1</sup>, Bertin SONE<sup>2</sup>, Alisson LEDOUX<sup>1</sup>, Kristiaan DEMEYER<sup>3</sup>, Michel FREDERICH<sup>1</sup>**

<sup>1</sup>Laboratory of Pharmacognosy, Department of Pharmacy, Center of Interdisciplinary Research on Medicine (CIRM), University of Liege, Belgium.

<sup>2</sup>Laboratory of Pharmacochemical and natural pharmaceutical substances, Doctoral Training Unit in Health Sciences. Faculty of Medicine and Pharmaceutical Sciences, University of Douala, Cameroon.

<sup>3</sup>Laboratory of In Vitro Toxicology and Dermato-Cosmetology (IVTD), Department of Analytical, Applied Chemometrics and Molecular Modeling (FABI), Faculty of Medicine and Pharmacy, Vrije University of Brussels, Belgium

Malaria remains a public health problem with a high burden and mortality [1]. Due to the limitations of the control strategies, there is the need for new highly efficacious, safer and cost-effective antimalarial agents. This study is aimed at comparing and analyzing the Metabolic Contents of *A. afra* and *A. annua* from five geographical regions in Cameroon by TLC, HPLC-DAD and investigating their anti-plasmodial properties alongside those of *Hibiscus sabdariffa* to develop a galenic formulation that will be used in phase two clinical trial following a bottom-up strategy to eliminate malaria.

Crude extracts were prepared by maceration and Soxhlet methods, concentrated by rotatory evaporation [2]. Analysis of metabolic contents was done by hyphenated techniques such as TLC and HPLC-DAD. Identification of secondary metabolites was done by comparison of the UV-Spectrum and the retention time (RT) for HPLC and retention factor (RF) for TLC with the reference samples. All extracts were investigated for their antiplasmodial activity using the chloroquine resistant W2 *Plasmodium falciparum* strain by measuring the activity of the parasite lactate dehydrogenase (pLDH) enzyme using solutions of Malstat and NBT/PES.

The results of this work show that there are differences in the phytochemical constituent between *A. afra* and *A. annua*, and between the same plant obtained from different regions. *Hibiscus sabdariffa* is poor in terpenes, as compared to artemisia and inactive. *A. afra* and *A. annua* are active with *A. annua* more active at lower concentration against *P. falciparum*. This result also shows the effectiveness of *Artemisia afra* plant against malaria with no artemisinin content. and after comparison, *Artemisia afra* from Adamawa Region has the highest *in vitro* antiplasmodial activity.

**References:** [1] WHO. (2020). World malaria report 2020: 20 years of global progress (<https://apps.who.int/iris/handle/10665/337660>). [2] Mbah, J., Ngemenya, M., Abawah, A., Babiaka, S., Nubed, L., Nyongbela, K and Efange, S. (2012). Bioassay-guided discovery of antibacterial agents: *in vitro* screening of *Peperomia vulcanica*, *Peperomia fernandopoiana* and *Scleria striatinux*. *Annals of Clinical Microbiol Antimicrob.*, 11, 10.

## Communication flash 5

### IDENTIFICATION ET CARACTERISATION DE COMPOSES ANTI-COLLAGENASE ET ANTI-CYCLOOXYGENASE A PARTIR D'*ECLIPTA ALBA*

**LE CABEC Audrey<sup>1</sup>, MESSAILI Souhila<sup>1</sup>, COLAS Cyril<sup>1,2</sup>, CAMPOS Pierre-Eric<sup>1</sup>, DESTANDAU Emilie<sup>1\*</sup>**

<sup>1</sup> Institut de Chimie Organique et Analytique (ICOA), UMR 7311, Université d'Orléans, France.

<sup>2</sup> Centre de Biophysique Moléculaire (CBM), UPR 4301, CNRS-Université d'Orléans, France.

Les produits naturels sont de plus en plus étudiés pour des applications pharmaceutiques et cosmétiques. Dans notre quête de nouveaux ingrédients actifs naturels, nous nous intéressons à *Eclipta alba*. Cette plante, de la famille des *Asteraceae*, est traditionnellement utilisée en médecine Ayurvédique pour le traitement des troubles digestifs, respiratoires, hépatiques et cutanées ainsi que pour son activité promotrice de la croissance des cheveux [1].

L'extrait brut obtenu à partir des parties aériennes par extraction assistée aux ultrasons dans l'éthanol présente un effet inhibiteur la collagénase, enzyme responsable de la dégradation du collagène et impliquée dans le processus de vieillissement de la peau [2], et de la cyclooxygénase-2, enzyme sur-exprimée lors de la réponse inflammatoire [3]. Afin de mettre en évidence les molécules impliquées dans ces activités, un fractionnement bio-guidé et l'analyse par chromatographie liquide couplée à la spectrométrie de masse haute résolution ont été entrepris.

L'extrait brut a été soumis à une extraction liquide/liquide. La phase aqueuse, montrant une plus forte inhibition des deux enzymes, est ensuite fractionnée par chromatographie de partage centrifuge et l'activité biologique est de nouveau testée. Dans le cas de la collagénase, une fraction a pu être identifiée comme étant plus fortement active. Les analyses HRMS et RMN de cette fraction ont permis d'identifier les deux molécules majoritaires. La wedelolactone, une coumestane que l'on retrouve communément dans *Eclipta alba* [4], ainsi qu'un isoflavonol décrit et caractérisé pour la première fois dans cette plante.

La même méthodologie est en cours d'application pour l'identification de molécules inhibitrices de la cyclooxygénase-2. Enfin, une fois les molécules responsables de ces deux activités identifiées, un travail d'optimisation des conditions d'extraction permettra d'enrichir notre extrait en molécules bioactives.

**Références :** [1] Jahan, et al. *Int Sch Res Notices*, 2014, 2014, 385969. [2] Stoughton, et al., *J Invest Dermatol.*, 1951, 16, :43-52. [3] Kurumbail, et al. *Nature*, 1996, 384, 644–648. [4] Shaukat et al., *Int. J. Biosciences*, 2020, 17, 338–352.

Communication flash 6

## LECANORA ALBOFLAVIDA (LECANORACEAE) AS A SOURCE OF CHLORINATED XANTHONES

MARZOUG Rania<sup>1</sup>, PINSON Hermann<sup>1</sup>, FERRON Solenn<sup>1</sup>, ESNAULT Joel<sup>1</sup>, BOUSTIE Joël<sup>1</sup>, URIAC Philippe<sup>1</sup>, CHOLLET-KRUGLER Marylène<sup>1\*</sup>, LOHEZIC-LE-DEVEHAT Françoise<sup>1\*</sup>

<sup>1</sup> Univ Rennes, CNRS, ISCR - UMR 6226, France

\*E-mail: [francoise.le-devehat@univ-rennes1.fr](mailto:francoise.le-devehat@univ-rennes1.fr), [marylene.chollet@univ-rennes1.fr](mailto:marylene.chollet@univ-rennes1.fr)

Xanthones are ubiquitous compounds present in plants, fungi and also lichens. In these symbiotic organisms, the biogenetic pathway for xanthones is quite different from plants and most of them are chlorinated in position 2,4,5,7 with or without a methoxy group (resulting in lichexanthone/norlichexanthone respectively) [1]. Molecules of this chemical family are very helpful for lichenologists because they are taxonomic markers for some crustaceous lichen species. Nevertheless, their identification remains tricky. In this aim, we decided to create a library of all xanthones described in lichens, associated with an in-house database. Our first choice was focused on *Lecanora alboflavida* (Lecanoraceae) [2]. The phytochemical study of the lichen *L. alboflavida* resulted in the isolation of two chlorinated xanthones and the characterization of four compounds through NMR and HR-MS studies. The isolated compounds are the 2,4,5-trichloronorlichexanthone named arthothelin and 2,4,5-trichloro-3-O-methylnorlichexanthone called thuringione (Figure 1A,B). A common depside easily identified as atranorin was detected as well as a dichloronorlichexanthone. In parallel a chemical strategy was investigated to synthesize a series of seven mono- and di-chlorinated norlichexanthones (Figure 1C) by a cyclization reaction between appropriate chlorinated orsellinic acids and phloroglucinol derivatives in the presence of Eaton's reagent [3]. Comparison between synthetic standards and *L. alboflavida* crude extract by LC-MS analysis allowed the identification of the 4,5-dichloronorlichexanthone which is supposed to be a biosynthetic precursor of arthothelin and thuringione in the lichen *L. alboflavida*.

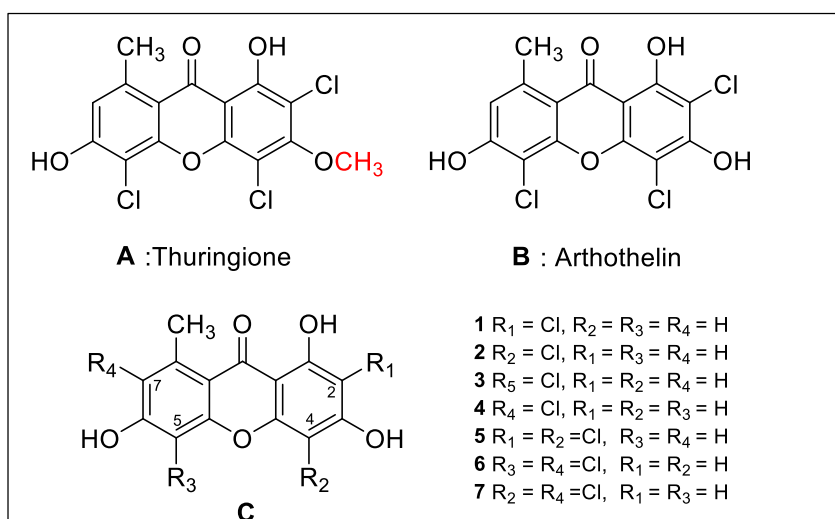


Figure 1 : Structures of isolated (A, B) and synthesized (C) xanthones.

**Références :** [1] Le Pogam P. *et al.*, *Molecules*, 2018. [2] Wayne Smith C., 2009, *The Lichens of Great Britain and Ireland* [3] Moreau *et al.*, *Eur. J. Med. Chem.*, 2002, 37, 237-253.

Communication flash 7

## ÉTUDE PHYTOCHIMIQUE ET ÉVALUATION DE L'ACTIVITÉ ANTIPLASMODIALE DE *PSEUDOLACHNOSTYLIS MAPROUNEIFOLIA* PAX (EUPHORBIACEAE)

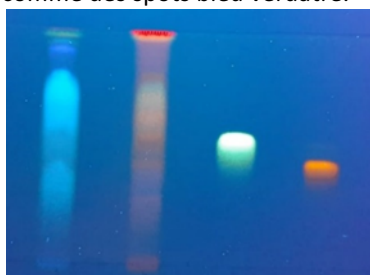
Patricia Mbombo Mungitshi<sup>1, 2\*</sup>, Allison Ledoux<sup>1</sup>, Paulin Mutwale Kapepula<sup>2</sup>, Alembert Tiabou Tchinda<sup>3</sup>, Adjo Elisabeth – Brou<sup>1</sup>, Jonathan Mukanya Mpoyi<sup>2</sup>, Nadège Ngombe Kabamba<sup>2</sup>, Michel Frederich<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Laboratoire de Pharmacognosie, Centre Interdisciplinaire de Recherches sur le Médicament (CIRM), ULiège, Belgique ; <sup>2</sup>Centre d'Etudes des Substances Naturelles d'Origine Végétale (CESNOV), Université de Kinshasa, DR Congo ; <sup>3</sup>Institute of Medical Research and Medicinal Plants Studies (IMPM), Cameroun

L'objectif de ce travail est d'identifier de nouveaux composés et d'évaluer l'activité antiplasmodiale de *Pseudolachnostylis maprouneifolia* Pax, qui est une plante de la famille des Euphorbiacées, récoltée en R. D. Congo et utilisée localement en Médecine Traditionnelle pour soigner diverses maladies y compris le paludisme.

Le paludisme est une maladie parasitaire due au *Plasmodium*, transmise à l'homme par les piqûres de l'anophèle « vecteur du paludisme » qui est un moustique femelle. Le nombre de personnes atteintes et de décès ne cessent de croître. La prise en charge du paludisme se fait en prévention par la lutte antivectorielle et par la chimio-prévention, le traitement du paludisme se base sur un test positif confirmant la présence des plasmodies, ainsi le traitement se fait par cas selon les recommandations de l'OMS [1,2]. Les échantillons utilisés ont été obtenus par macération de poudre de fruits et de feuilles de *Pseudolachnostylis maprouneifolia*, la chromatographie sur couche mince (Figure 1) et la détermination en polyphénols totaux ont démontré que la plante contient une grande quantité de composés polyphénoliques dans les fruits (818,24 ± 127,64 mgGAE/1gD). Les extraits de fruits et de feuilles de *Pseudolachnostylis maprouneifolia* ont montré une activité antioxydante proche de celle des références utilisées en utilisant la méthode DPPH et ABTS, aussi une activité antiplasmodiale intéressante en mesurant l'activité du lactate déshydrogénase (pLDH) comme décrit par Jansen *et al.* [3]. Les polyphénols sont connus pour être responsables de nombreuses activités biologiques des plantes [4,5], ainsi l'activité antioxydante et antiplasmodiale des fruits et des feuilles de *Pseudolachnostylis maprouneifolia* seraient dues à la grande quantité de polyphénols en présence. Cette théorie est soutenue par le fait que nous avons isolé et caractérisé deux molécules dans le fruit : le gallate de méthyle et l'acide gallique, qui ont été précédemment montrés par différents travaux comme ayant une activité antiplasmodiale et sont considérés comme de potentiels composés antiplasmodiaux [6].

**Figure 1** : CCM, Chromatogramme des extraits méthanoliques de feuilles et fruits de *P. maprouneifolia*, acide chlorogénique et rutine comme standards, développé acétate d'éthyle-acide formique-acide acétique glacial-eau (100 :11 :11 :26) avec visualisation sous UV 366nm avec réactif DPBAE/PEG. Flavonoïdes détectés comme des spots jaune-orangé et autres polyphénols comme des spots bleu verdâtre.



**Tableau 1** : Valeurs  $CI_{50}$  ( $\mu\text{g} / \text{mL}$ ) des extraits de feuilles et fruits dans les tests antiplasmodiaux (moyenne  $\pm$  SD,  $n = 3$ ).

Extraits totaux	$CI_{50}$ ( $\mu\text{g}/\text{mL}$ )
1. Fruit	4,56 $\pm$ 0,19
2. Feuille	14,59 $\pm$ 0,45
Extraits séquentiels	
3. Fruit Acétate d'éthyle	10,95 $\pm$ 0.157
4. Fruit Méthanol	13,12 $\pm$ 0,726

**Références** : [1] WHO Guidelines for Malaria. Geneva, 2021. [2] WHO, *Guidelines for the Treatment of Malaria*, Geneva, 2015. [3] Jansen O, *et al. J. of Ethnopharmacol.* 2010, 130(1):143-50. [4] Mamede L, *et al. Planta Med.* 2020, 86(9):585-618. [5] Li AN, *et al. Nutrients*, 2014, 6(12):6020-47. [6] Degotte G, *et al. Let. Drug Des. Discov.*, 2021, 18, 0.

Communication flash 8

## THE PHYTOCHEMICAL CHARACTERIZATION OF MEDICINAL PLANTS USED IN ETHNOMEDICINE OF ARMENIA

NAZARYAN Samvel<sup>1</sup>, BRUGUIERE Antoine<sup>1</sup>, HOVHANNISYAN Nelli<sup>2</sup>, MIYAMOTO Tomofumi<sup>3</sup>, MITAINE-OFFER Anne-Claire<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Centre des Sciences du Goût et de l'Alimentation, CNRS, INRAE, Institut Agro, Université de Bourgogne Franche-Comté F-21000 Dijon, France

<sup>2</sup>Yerevan State University (YSU), Armenia

<sup>3</sup>Graduate School of Pharmaceutical Sciences, Kyushu University, Fukuoka, 812-8582, Japan

*Scabiosa caucasica* (Armenian chrysanthemum) and *Scabiosa ochroleuca* (Caprifoliaceae), are perennial species, native to subalpine meadows in the northern Caucasus and Transcaucasus. They are wild *Scabiosa* growing in high mountain meadows over 2500 metres elevations in Lori, Syunik, Tavush, Aragatsothn, Gegarkunik, Vayots Dzor and Shirak regions of Armenia (**1**). The Armenian chrysanthemum is most commonly known for reducing skin irritation, such as scabies. They generally also can be used as herbal tea to treat influenza symptoms (**2**). This genus is well known for its richness in triterpene glycosides (**3**), so the phytochemical study to isolate saponins was achieved. The extraction of *S. caucasica* and *S. ochroleuca* was performed by maceration and microwave-assisted extraction. Vacuum Liquid Chromatography was used for pre-purification, followed by Sephadex and Medium Pressure Liquid Chromatography. Thin Layer Chromatography was used to control the separation and purification processes. The presence of polar saponins was presumed based on their migration on TLC plates and on their HPLC profile. The purity of samples was established by HPLC-UV-ELSD. The structures of purified saponins were elucidated by spectroscopic analysis (1D and 2D-NMR - <sup>1</sup>H-<sup>1</sup>H COSY, TOCSY, HSQC, ROESY and HMBC) and mass spectrometry (ESI-MS). Four previously undescribed oleanolic acid glycosides were identified (**1-4**), and their structures possess a common partial sequence with β-D-glucopyranosyl-(1 → 4)-β-D-xylopyranosyl-(1 → 3)-α-L-rhamnopyranosyl-(1 → 2)-β-D-arabinopyranosyl at C-3 and a gentiobiose unit at C-28. The only changes among the four identified saponins from *S. caucasica* and *S. ochroleuca* are located at 5<sup>th</sup> sugar. The last terminal rhamnopyranosyl is attached to xylopyranosyl in compound **3** (C4 position) and compound **4** (C3 position), or glucopyranosyl in compound **1** (C4 position) and compound **2** (C3 position).

Surprisingly, these structures are close to those isolated from some *Weigela* species (**4**), which belongs to Caprifoliaceae family, Diervilloideae subfamily. From a chemotaxonomic point of view, the *Scabiosa* genus belongs to the Dipsacales order, Caprifoliaceae family, Dipsacoideae subfamily. The saponins from the two genera share the 3-O-β-D-xylopyranosyl-(1 → 3)-α-L-rhamnopyranosyl-(1 → 2)-β-D-arabinopyranosyloleanolic acid sequence, which might be a chemotaxonomic marker of these two subfamilies, and maybe of the whole Caprifoliaceae family.

**References :** [1] Vardanian S.A., Amirdovlat A., 1999. Amirdovlat Amasiatsi: a fifteenth-century Armenian natural historian and physician, 1st ed. ed, Anatolian and Caucasian studies. Caravan Books, Delmar, N.Y. [2] Mehrabyan, A., Redfern, S., 2010. Medicinal plants and their uses and benefits with reference to small farmers in Armenia. Online Book. [3] Bendamene S. *et al.*, 2020. *Phytochemistry* 180, 112526. [4] Rezgui A., *et al.*, 2016. *Phytochemistry* 123, 40–47.

Communication flash 9 \*

## CULTIVABLE FILAMENTOUS ENDOPHYTIC FUNGI ISOLATED FROM *ISATIS TINCTORIA* L. AND THEIR POTENTIAL PARTICIPATION IN INDIGO PRODUCTION

**PACHECO Romina<sup>1</sup>, VITRAI Adrien<sup>1</sup>, MOCQUARD Julia<sup>1,2</sup>, DHILLY Elise<sup>1</sup>, JARGEAT Patricia<sup>3</sup>, BANESSY Sandrine<sup>4</sup>, GERMAIN Jean-Jacques<sup>4</sup>, LE LAMER Anne-Cécile<sup>1\*</sup>, VANSTEELANDT Marieke<sup>1\*</sup>.**

<sup>1</sup> UMR 152 PharmaDev, Université de Toulouse, IRD, UPS, France ; <sup>2</sup> Laboratoire de Chimie Agro-Industrielle (LCA), Université de Toulouse, INRA, INPT, 4 Allée Emile Monso, 31030 Toulouse, France ; <sup>3</sup> Laboratoire Evolution et Diversité Biologique UMR 5174, Université de Toulouse, CNRS, IRD, UPS, 31062 Toulouse, France ; <sup>4</sup> Terre de Pastel, 629 rue Max Planck 31670 Toulouse-Labège, France.

Indigo dye is one of the oldest natural pigments and the most widely used for textile industry. In order to reduce the impacts of the industrial production of indigo and to combat the need of harmful chemicals, whole-cell biotransformations serve as an alternative to achieve a green chemistry<sup>1</sup>. Endophytic fungi possess a powerful genetic diversity that have co-evolved with their host plant and capable of producing specialized metabolites and enzymes useful for the plant<sup>2</sup>. So far, the endophytic community of *Isatis tinctoria* remains in the dark. Little few studies such as the endophytic fungi isolated from the leaves of *Indigofera suffruticosa* Miller<sup>3</sup> and the endophytic bacteria isolated from the roots, leaves, stems, petioles and flowers of *Isatis indigotica*<sup>4</sup> have been done. In the aim of the optimisation of indigo production from *Isatis tinctoria*, the study of the participation of endophytic fungi, in particular, represents a good approach to perform the biotransformation of the main indigo precursors (indican, isatan A and B). To date, a total of 160 of fungal endophytic strains have been isolated from the leaves of *Isatis tinctoria* L., of which 4 identified strains were selected for the preliminary biotransformation assays using indican, a commercially available and stable indigo precursor. In this study, the biotransformation assays were repeated using triplicates for all the conditions. Metabolomics analyses were also performed to individually evaluate the changes of the endophytes metabolome under the addition of indican. *Septoria* sp. and *Cladosporium* sp. hydrolysed indican 10 and 7 times more, respectively, than the hydrolysis of indican observed in the culture medium after 72h, which confirms the previous observations about the enzymatic capacity of these two strains in comparison with *Stemphyllium* sp. and *Alternaria* sp. On the other hand, the glycosylated molecule of indican was detected during the biotransformation assays after 24 h of indican addition up to 7 days later, but not observed in the control. These results suggest the production of  $\beta$ -glucosidases and glucosyltransferases by these endophytic strains. In this regard,  $\beta$ -glucosidases have already been identified and isolated from *Isatis tinctoria*<sup>5</sup> and from *Polygonum tinctorium*<sup>6</sup>, responsible of the cleavage of the O-glycosidic linkage in the precursor indican and isatan B but not that of isatan A. The multivariate analysis of the metabolomic data indicate the general modulation of the metabolome of each endophyte in presence of indican during an early stage (up to 72 hours of culture) and late stage (until day 7 of culture) with groups of metabolites significantly up-regulated or down-regulated ( $p < 0.05$ , ANOVA) which might reflect the products of the biotransformation of indican.

**References :** [1] Choudhary, M. et al. *Front. Bioeng. Biotechnol.* 9, (2021), [2] Alvin, A. et al. *Microbiol. Res.* 169, 483–495 (2014), [3] Prazeres dos Santos, I. et al. *African J. Microbiol. Res.* 9, 1227–1235 (2015), [4] Wang, X. et al. *Biotechnol. Bull.* 34, 163–169 (2018), [5] Oberthür, C. et al. *Chem. Biodivers.* 1, 174–182 (2004), [6] Minami, Y. et al. *Plant Cell Physiol.* 38, 1069–1074 (1997)

\* Thématique session 4



## Session 4 – Méthodologie, déréplication, microorganismes

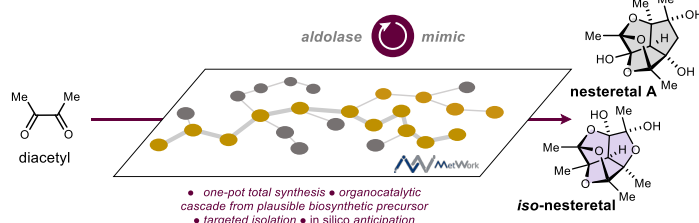
modération : Pr Pascal RICHOMME (Université d'Angers)

## Communication flash 10

 CHEMOINFORMATIC EXPLORATION OF “BIOINSPIRED METABOLOMES”  
 ILLUMINATES DIACETYL ASSEMBLY PATHWAYS TOWARD NESTERETAL A-LIKE  
 CAGE MOLECULES

 LEBLOND Axel<sup>1</sup>, HOUARI Inès<sup>1</sup>, BEAUXIS Yann<sup>2</sup>, LEBLANC Karine<sup>1</sup>, POUPON Erwan<sup>1</sup>, BENIDDIR Mehdi<sup>1\*</sup>
<sup>1</sup>Laboratoire Biomolécules : Conception, Isolement et Synthèse (BioCIS) équipe « Chimie des Substances Naturelles », Université Paris-Saclay, France ; <sup>2</sup>Laboratoire Cibles Thérapeutiques et Conception de Médicaments (CiTCoM), Université de Paris Cité, France.

Nesteretal A, a representative of a novel class of cage-like metabolites, was isolated in 2019 by Yang *et al.* from the coral-derived actinomycete *Nesterenkonia halobia*.<sup>[1]</sup> This new molecule exhibits interesting biological properties as well as an intriguing structure with four intricately fused cycles, six quaternary carbons and three tertiary alcohols (Figure 1). Moreover, the biosynthetic pathway proposed by the authors involving diacetyl as a plausible and unique precursor makes nesteretal A an interesting synthetic target for a bio-inspired total synthesis. From diacetyl (Figure 1), by a succession of self-aldolizations/hemiacetalizations catalyzed by (S)-proline mimicking an aldolase we realized an expeditious one-pot total synthesis of nesteretal A.<sup>[2]</sup> Versatility in the diacetyl auto-assembly prompted us to explore the “bioinspired metabolomes” created in the flask using chemoinformatic tools such as MetWork.<sup>[3]</sup> This powerful *in silico* anticipation tool allowed us to illuminate the hypothetical biosynthetic pathway leading to nesteretal A, along with a wide chemical space including nesteretal A-like cage molecules. Among them, *iso*-nesteretal (Figure 1) which was anticipated, targeted, and isolated.


 Figure 1: Chemoinformatic anticipation of nesteretal A and *iso*-nesteretal from reaction mixtures and their one-pot total synthesis.

**References:** [1] Xie, C.-L.; Chen, R.; Yang, S.; Xia, J.-M.; Zhang, G.-Y.; Chen, C.-H.; Zhang, Y.; Yang, X.-W. *Org. Lett.* 2019, 21, 8174–8177. [2] Leblond, A.; Houari, I.; Beauxis, Y.; Leblanc, K.; Poupon, E.; Beniddir, M. A. *Org. Lett.* 2022, 24, 1247–1252. Leblond, A.; Houari, I.; Beauxis, Y.; Leblanc, K.; Poupon, E.; Beniddir, M. *ChemRxiv Preprint* 2021. For subsequent nesteretal A total syntheses see: Kawamoto, Y.; Kitsukawa, H.; Kobayashi, T.; Ito, H. *Org. Lett.* 2021, 23, 7074–7078 and Dentani, T.; Kawachi, A.; Kato, M.; Yoshimura, T.; Matsuo, J. *Org. Chem. Front.* 2022. [3] Beauxis, Y.; Genta-Jouve, G. *Bioinformatics* 2019, 35, 1795–1796.

## Communication flash 11

### COMPARAISON DE METHODES POUR L'OBTENTION D'HUILE ESSENTIELLE D'ARTEMISIA ANNUA

**BUSONT Océane<sup>1</sup>, CHARTIER Agnès<sup>1</sup>, DESTANDAU Emilie<sup>1</sup>**

<sup>1</sup> ICOA, UMR7311, Université d'Orléans, France.

La production d'huile essentielle réalisée par hydrodistillation, est une méthode qui nécessite une grande consommation d'eau ainsi qu'un temps d'extraction long. Dans le cadre de ce projet, et dans une démarche d'extraction plus verte, différentes méthodes ont été testées, afin de réduire la durée d'extraction ainsi que la consommation d'eau utilisée lors du processus. Les méthodes utilisées sont l'hydrodistillation conventionnelle avec un appareil de Clevenger, ainsi que l'hydrodistillation assistée par micro-onde avec ou sans ajout d'eau.

Cette étude a été réalisée sur *Artemisia annua*, une plante annuelle, appartenant à la famille des Asteraceae et originaire d'Asie et qui a été cultivée en Région Centre-Val de Loire. Cette plante est principalement connue pour son activité antipaludique avec la présence d'artémisinine [1]. Ses composés volatils présentent des activités antimicrobiennes [2] et peuvent être également utilisés pour le traitement phytosanitaire.

L'utilisation de la chromatographie gazeuse couplée à un détecteur à ionisation de flamme (FID) a permis de comparer ici les différentes méthodes d'extraction. Les résultats obtenus ont montré des profils chromatographiques globalement similaires sur l'extraction des composés majoritaires (camphre, eucalyptol et artemisia-cétone). Toutefois, les proportions des composés varient suivant la méthode d'extraction utilisée, pouvant induire des différences d'activité biologique qui sont en cours d'évaluation.

L'hydrodistillation sans solvant assistée par micro-onde permet de réduire le temps d'extraction ainsi que la consommation d'eau tout en permettant une extraction efficace des composés volatils d'*Artemisia annua*.

**Références :** [1] Efferth, Thomas. "From Ancient Herb to Modern Drug: *Artemisia annua* and Artemisinin for Cancer Therapy." *Seminars in Cancer Biology*, 2017, 46, 65–83. [2] Marinas, Ioana C., et al. "Chemical Composition and Antipathogenic Activity of *Artemisia annua* Essential Oil from Romania." *Chemistry & Biodiversity*, 2015, 12(10), 1554–1564.

## Communication flash 12

# OPTIMISATION PAR PLAN D'EXPERIENCE AVEC METHODOLOGIE DE SURFACE DE REPONSE DE L'EXTRACTION VERTE DES PIGMENTS DE *RUBIA TINCTORUM* PAR MICRO-ONDES

**CHAMBAUD Marine<sup>1</sup>, DESTANDAU Emilie\*<sup>1</sup>**

<sup>1</sup> Institut de Chimie Organique et Analytique, ICOA – UMR 7311, Université d'Orléans

La garance (*Rubia tinctorum* L.) est une des plus anciennes plantes tinctoriales utilisées. On en extrait avec des solvants hydro-alcooliques un pigment rouge riche en hydroxyanthraquinones libres et glycosylées. A notre connaissance, aucune méthode d'extraction à l'eau des pigments de la garance n'a été reportée. Pourtant, l'extraction à l'eau est un des enjeux actuels de la chimie verte, particulièrement pour une valorisation cosmétique. En effet, l'eau est non toxique, facilement accessible à bas coût et peut être utilisée directement dans les formulations. Toutefois la solubilité dans l'eau de certaines des molécules cibles est faible. C'est pourquoi nous avons optimisé une méthode d'extraction assistée par micro-ondes (MAE) qui permet d'augmenter rapidement la température du milieu d'extraction en induisant une friction des molécules dipolaires, et ainsi d'augmenter la solubilité et la diffusivité des molécules.

Nous avons utilisé un plan d'expériences de type Box-Behnken et appliqué la méthodologie de surface de réponse (RSM) pour optimiser l'extraction. Cela nous a permis d'observer l'effet de différents paramètres en limitant le nombre d'expériences à réaliser. Nous avons mesuré l'influence du nombre de cycles d'extraction, de la puissance et du ratio plante/eau sur deux réponses : le rendement d'extraction et l'absorbance à 416 nm, longueur d'onde caractéristique des anthraquinones présentes dans les extraits. Les paramètres permettant d'optimiser le rendement se sont révélés différents de ceux permettant d'optimiser l'absorption à 416 nm et donc la couleur de l'extrait. La couleur des extraits (jaune-orangé-rouge) est également dépendante des conditions d'extraction.

Afin de comprendre ces différences, les extraits ont été caractérisés par HPLC-MS et comparés à des extraits obtenus par soxhlet et MAE en utilisant un mélange EtOH/eau (50/50) souvent décrit dans la littérature pour l'extraction des hydroxyanthraquinones afin de déterminer l'influence du solvant sur les composés extraits. Ainsi, nous pourrions corréler la couleur de l'extrait à sa composition chimique et aux paramètres d'extraction.

### Communication flash 13

## OPTIMIZATION OF EXTRACTION CONDITIONS AND PRODUCTION OF INDIGO DYE FROM *ISATIS TINCTORIA*

**MOCQUARD Julia<sup>1,2</sup>, CHASTRETTE Clément<sup>1</sup>, VITRAI Adrien<sup>2</sup>, VILAREM Gérard<sup>1</sup>, MATHIEU Céline<sup>1</sup>, LE LAMER Anne-Cécile<sup>2</sup>, VANDENBOSSCHE Virginie<sup>1</sup>**

<sup>1</sup> Laboratoire de Chimie Agro-Industrielle, LCA, Université de Toulouse, INRA, France; <sup>2</sup> UMR 152 PharmaDev, Université de Toulouse, IRD, UPS, France

Historically, the cultivation of woad (*Isatis tinctoria*) for the production of indigo pigment in France was mainly located in Occitania. As the indigo molecule is not present as such in *I. tinctoria*; the leaves, after harvesting, underwent various treatments including mechanical and biochemical transformations before being shaped into “woad balls” for their conservation [1]. This production declined at the beginning of the 20th century with the increasing demand for pigment by the textile industry and the development of the industrial production of synthetic indigo. Nevertheless, the environmental concerns raised by the synthesis of this pigment on an industrial scale led to the revival of the production of natural indigo. Modern pigment production usually relies on the extraction and hydrolysis of precursors such as isatan A and B from fresh leaves of *I. tinctoria* in an aqueous medium, followed by the addition of a base and open-air oxidation to convert the free indoxyl into indigo. Few researches have been initiated to better understand the reaction mechanisms leading to the formation of indigo which results from the hydrolysis and oxidation of the main precursors. Thus, the reactivity and interactions of these precursors with the extraction medium still remains obscure, leading to overly variable indigo yields and purities [2].

The objective of the study presented here is to improve pigment yield and indigo content, by understanding which parameters influence pigment production. An analytical method has been devised to monitor the content in precursors, while different conditions of extraction (pH, temperature, time, ...) have been screened to increase both yield and indigo content of the pigments.

Extraction yields higher than the usual yields previously obtained in our laboratory could be achieved by these methods, with a pigment production of about 20 g/kg of dry leaves, with a higher indigo content. In parallel, a spectrophotometric quantification method has been developed to determine more accurately indigo content of the pigment and the indigo/indirubin ratio.

**References:** [1] Hartl *et al.*, *J. Archaeol. Sci. Rep.*, 2015, 2, 9–39. [2] Kokubun *et al.*, *Phytochemistry*, 1998, 49, 79–87.

Communication flash 14

## DEVELOPPEMENT D'UN COUPLAGE INNOVANT POUR LA DECOUVERTE DE MOLECULES A POTENTIEL ALLELOPATHIQUE

FLIELLER Gwenaëlle<sup>1</sup>, RIFFAULT-VALOIS Ludivine<sup>1\*</sup>, BERGAENTZLE Martine<sup>1</sup>, ENNAHAR Saïd<sup>1</sup>

<sup>1</sup> Université de Strasbourg, CNRS, IPHC UMR 7178 - Équipe Chimie Analytique des Molécules BioActives et Pharmacognosie, F-67000 Strasbourg, France

L'utilisation massive d'herbicides de synthèse ces dernières décennies a eu des conséquences sur l'environnement et la santé humaine [1]. Des initiatives gouvernementales ont donc été mises en place comme le plan Ecophyto II+ en France. Il promeut les méthodes de biocontrôle qui sont plus respectueuses de l'environnement et la réduction de l'utilisation de produits phytopharmaceutiques néfastes. Les produits de contrôle peuvent être composés de micro-organismes, de médiateurs chimiques ou de substances naturelles d'origine végétale, animale ou minérale [2] et parmi les substances d'origine végétale utilisées et commercialisées en France, une seule a une activité herbicide : l'acide pélargonique [3]. Pour trouver de nouveaux composés actifs d'origine végétale, des plantes invasives ou ornementales vigoureuses ont été étudiées dans ce projet. En effet de par leur nature envahissante, elles produisent certainement des composés dits allélopathiques qui impactent le développement des plantes alentours et qui pourraient être utilisés comme bioherbicides.

Les méthodes permettant d'identifier de nouveaux composés allélopathiques sont nombreuses mais la méthode en boîte de Pétri avec du papier filtre est celle la plus utilisée pour l'analyse d'extraits. Malgré sa facilité d'utilisation, elle présente de nombreux inconvénients comme une grande quantité d'échantillon nécessaire. Pour s'affranchir de ce problème, une méthode en plaque 96 puits a été développée permettant une réduction de la quantité d'échantillon nécessaire et une visualisation de la germination des graines facilitée. De plus, en utilisant des plaques 96 puits, un couplage séparation analytique (utilisant la Chromatographie Liquide Haute Performance) – détection biologique est possible (Figure 1). De cette façon, une corrélation est aisément observable entre l'activité biologique visualisée et les zones du chromatogramme dans lesquelles se trouvent les composés d'intérêt. Cela facilite également les étapes de purification et d'identification des molécules actives.

Cette technique permet donc un criblage plus rapide des extraits de plantes dans le cadre de ce projet et de la découverte de nouvelles molécules à potentiel allélopathique.

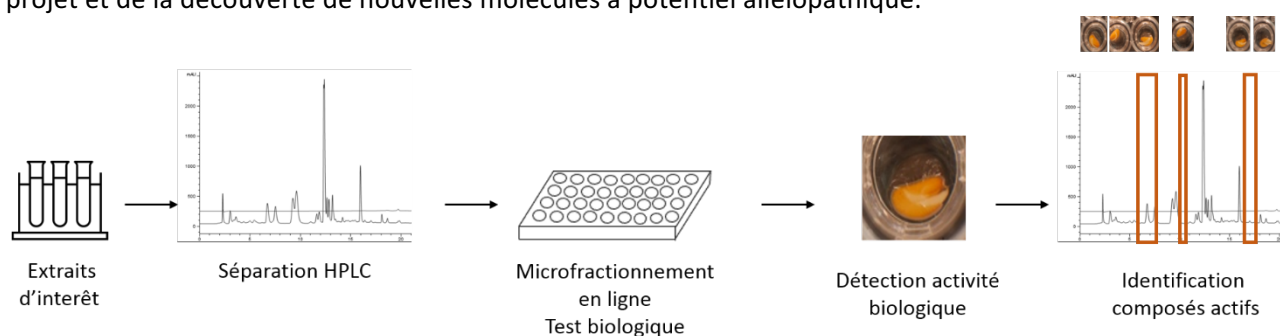


Figure 1 : Schéma du couplage HPLC – test biologique en ligne

**Références :** [1] Van Bruggen, A. H., et al., *Sci. Total Environ.*, 2018, 616, 255-268. [2] Ministère de l'agriculture et de l'alimentation, Article L. 253-6 du code rural et de la pêche maritime, consulté en ligne le 14 juin 2022. [3] Ministère de l'agriculture et de l'alimentation, DGAL/SDSPV/2022-341 du 03/05/2022 : Liste des produits phytopharmaceutiques de biocontrôle, au titre des articles L.253-5 et L.253-7 du code rural et de la pêche maritime, consulté en ligne le 14 juin 2022

## Communication flash 15

### MODULATION DE LA PRODUCTION DE MYCOTOXINES ET AUTRES METABOLITES SPECIALISES DE *FUSARIUM VERTICILLIOIDES*.

**GROPPI Emie<sup>1\*</sup>, GADEA Alice<sup>1</sup>, PONTS Nadia<sup>2</sup>, HADDAD Mohamed**

<sup>1</sup> UMR 152, PharmaDev, Université Paul Sabatier, Toulouse III, France ; <sup>2</sup> INRAE, Mycologie and Food Safety (MycSA), Villenave d'Ornon, France.

Les champignons du genre *Fusarium* sont fréquemment retrouvés dans les céréales et plus spécifiquement dans le maïs [1]. Ces moisissures se développent dans les champs avant, pendant ou après les récoltes. Ils peuvent produire des toxines fusariales comme les trichotécènes, la zéaralénone, les fumonisines mais aussi des mycotoxines dites « émergentes » comme la beauvéricine, les enniatines, la moniliformine, la fusaproliférine.... [2] Dans cette étude, nous nous sommes concentrés sur l'espèce *Fusarium verticillioides*. L'objectif de travail de recherche est d'étudier l'éco-physiologie du champignon mycotoxinogène *F.verticillioides* dans différentes conditions de culture (milieux, humidité, température...) au cours du temps. En effet, une meilleure compréhension de l'éco-physiologie de cette espèce fongique permettrait de comprendre les conditions de productions des toxines fusariales en laboratoire et de pouvoir les extrapoler aux produits destinés à la consommation alimentaire humaine et animale. L'étude de la croissance et du métabolome de cette souche et plus particulièrement des mycotoxines qu'elle produit, a fait l'objet d'un suivi cinétique selon les différentes conditions de culture appliquées (conditions optimales de croissance du champignon, conditions de croissance optimales de productions de fumonisines...). *F.verticillioides* a été inoculé sur différents milieux (PDA, MEA, CZA et CMA). Un suivi journalier sur 28 jours est réalisé. Une étude métabolomique, couplée à une approche dérégulative a permis de mettre en évidence et d'annoter les métabolites (dont les mycotoxines) induits dans chaque condition de culture. Une modification de la croissance fongique mais également une variation de la nature et des concentrations des mycotoxines produites sont observés en fonction des modifications des conditions de cultures et du temps.

**Références :** [1] Ma,L.J. *et al.*, *Annu. Rev. Microbiol.* 67, 399-416. 2013. [2] Munkvold, G.P., *Mycotoxigenic Fungo : Methods and Protocols* (eds. Moretti,A & Susca, A). 51-106, Springer. 2017.

## Communication flash 16

## MICROALGAL TOXIN MITIGATION BY CO-ISOLATED FUNGUS COMPOUNDS

**BERRY Olivier<sup>1</sup>, HERVE Fabienne<sup>2</sup>, TANNIOU Simon<sup>2</sup>, BRIAND Enora<sup>3</sup>, GROVEL Olivier<sup>1</sup>, BERTRAND Samuel<sup>1\*</sup>**

<sup>1</sup> Institut des Substances et Organismes de la Mer (ISOMER), Nantes Université, France ; <sup>2</sup> IFREMER – PHYTOX, METALG, F-44311 Nantes, France; <sup>3</sup> IFREMER – PHYTOX, GENALG, F-44311 Nantes, France.

\*corresponding author : samuel.bertrand@univ-nantes.fr

Along with climate change, harmful algal blooms occur more frequently, representing a threat concerning coastal biological ecosystem, as well as human coastal activities (such as shellfish farming) (1). In this project, we focus on a bloom forming and toxic microalgae *Prorocentrum lima*, and its co-isolated fungus. The objective is to seek and isolate marine fungal compounds able to interfere with okadaic acid and dinophysistoxin-1 production, two diarrhetic toxins produced by *P. lima*.

Preliminary studies showed that co-cultivation of *P. lima* with *Aspergillus pseudoglaucus* MMS1589 yielded toxin induction by the microalgae (2). Following this observation, a bioguided strategy was put in place: *P. lima* was exposed to *A. pseudoglaucus* crude extract and fractions at a concentration of 0.5 µg.mL<sup>-1</sup>. After six days, cell numeration of *P. lima*, combined to toxin quantification by LC-MS/MS revealed the interference of fungal compounds with toxin levels for both extracellular and intracellular compartments. While the crude extract showed no effect, four fractions provided either intra or extracellular toxin content induction, or decrease of toxin level.

Exploration of chemical diversity of those fractions through first molecular networking highlighted the presence of known compounds, such as auroglaucins, anthraquinones and derivatives. Furthermore, unreported compounds were highlighted and isolated for chemical characterisation.

This study represents one-steps the understanding of microalgal-fungal interaction in regard to *P. lima* toxin production regulation.

**Références :** [1] Levasseur M, Couture J, Weise A, Michaud S, Elbrächter M, Sauvé G, et al. Pelagic and epiphytic summer distributions of *Prorocentrum lima* and *P. mexicanum* at two mussel farms in the Gulf of St. Lawrence, Canada. *Aquat Microb Ecol.* 2003;30:283-93. [2] Berry O, Briand E, Bagot A, Chaigne M, Meslet-Cladière L, Wang J, et al. Deciphering microbiome impacts on fungal-microalgal interaction in a marine environment using metabolomics [Internet]. *Microbiology*; 2021 mai [cité 3 mai 2022]. Disponible sur: <http://biorxiv.org/lookup/doi/10.1101/2021.05.27.445989>

Communication flash 17\*

**ETUDE PHYTOCHIMIQUE ET BIOLOGIQUE DE PLANTES MEDICINALES  
ANTIMICROBIENNES DE CÔTE D'IVOIRE POUR UNE VALORISATION COMME  
ANTIPARASITAIRE CONTRE LA TOXOPLASMOSE ET COMME ANTIFONGIQUE  
CONTRE *CANDIDA AURIS*.**

**OUATTARA Nangouban**<sup>1,2,3\*</sup>, **VOUTQUENNE NAZABADIOKO Laurence**<sup>1</sup>, **VILLENA Isabelle**<sup>2</sup>, **YAO-KOUASSI Philomène Akoua**<sup>3</sup>, **ALABDUL MAGID Abdulmagid**<sup>1</sup>, **ESCOTTE-BINET Sandie**<sup>2</sup>, **HUGUENIN Antoine**.<sup>2</sup>

<sup>1</sup> Institut Chimie Moléculaire de Reims (UMR CNRS 7312 ICMR), Université de Reims Champagne Ardenne, France; <sup>2</sup> Epidémiologie et Circulation de Parasites dans les Environnements (EA 7510 ESCAPE), Université de Reims Champagne Ardenne, France; <sup>3</sup> UFR Sciences des Structures de la Matière et de Technologie (SSMT), Université Félix-Houphouët-Boigny, Côte d'Ivoire.

La toxoplasmose est une parasitose mondiale due à l'infection par *Toxoplasma gondii*, généralement bénigne dont les principales personnes à risque sont les patients immunodéprimés et le fœtus des femmes enceintes séroconverties. *Candida auris*, qui est un champignon levuriforme qualifié de supergerme nosocomial dont les personnes à risque sont également les patients immunodéprimés. Ces deux maladies présentent une chimiorésistance et/ou des effets secondaires graves face aux traitements actuels. L'objectif de cette thématique de recherche est de trouver de potentiels nouveaux métabolites spécialisés bioactifs de structures originales à travers une étude chimique bioguidée, contre la toxoplasmose et *Candida auris*.

Cette étude a débuté par une récolte (faite en Côte d'Ivoire) de neuf espèces de plantes médicinales potentiellement antimicrobiennes que sont : 1) les feuilles de *Combretum micranthum* G. Don (Combretaceae), 2) les feuilles *Elaeis guineensis* Jack. (Arecaceae), 3) la plante entière sans les racines de *Erigeron floribundus* Kunth Sch.Bip (Asteraceae), 4) les écorces du tronc de *Oldfieldia africana* Benth. & Hook. f. (Euphorbiaceae), 5) les feuilles et les écorces du tronc de *Omphalocarpum ahia* A. Chev. (Sapotaceae), 6) les écorces du tronc de *Octoknema borealis* Hutch. & Dalziel (Octoknemataceae), 7) les écorces du tronc de *Omphalocarpum elatum* Miers (Sapotaceae), 8) la plante entière sans les racines de *Tristemma coronatum* Benth. (Melastomataceae) et 9) la plante entière sans les racines de *Tristemma spp* (Melastomataceae). Ces plantes ont été sélectionnées au préalable par la suite de plusieurs études bibliographiques ethnobotaniques, biologiques et phytochimiques.

A l'aide d'une extraction fractionnée par polarité croissante d'éluant, 44 extraits ont été obtenus, puis ont été criblés sur *tachyzoïtes (souche RH, de type I) de T. gondii* à une concentration fixe de 25 µg/ml. Dix des 44 extraits de sept plantes différentes se sont avérés non cytotoxiques contre les cellules véro et inhibaient plus de 50% de la croissance parasitaire (ICP). Les trois extraits qui présentaient plus de 90% d'ICP (l'extrait DCM des écorces du tronc de *O. ahia*; l'extrait 80% MeOH de *E. guineensis* et l'extrait AcOEt des feuilles de *O. ahia*) ont été fractionnés par chromatographie de partage centrifuge puis purifiés par HPLC. Au total 20 molécules, dont 19 triterpènes (1 nouvelle) et 1 stérol glycosylé ont été isolés de l'extrait DCM des écorces du tronc de *O. ahia*. Une chimiosensibilité de 0,1-25 µg/ml sera effectuée afin de déterminer l'indice de sélectivité de 17 des 20 molécules non testées sur *T. gondii* dans la littérature. Les travaux sont en cours pour les 2 autres extraits actifs à plus de 90% d'ICP et pour l'étude chimique bio guidée contre *Candida auris*.

\* **Thématique session 3**



Communication flash 18

## LA RMN MULTIDIMENSIONNELLE : L'OUTIL D'EXPLORATION METABOLOMIQUE DE DEMAIN ?

**MICHAUD Aurore\***<sup>1,2,3,4</sup>, **GIRAudeau Patrick**<sup>2,4</sup>, **AKOKA Serge**<sup>2,4</sup>, **FARJON Jonathan**<sup>2,4</sup>, **BERTRAND Samuel**<sup>1,3</sup>, **MARTINEAU Estelle**<sup>2</sup>, **RUIZ Nicolas**<sup>1</sup>, **ROBIOU DU PONT Thibaut**<sup>1</sup>, **GENTIL Emmanuel**<sup>1,3</sup> and **GROVEL Olivier**<sup>1,3</sup>

<sup>1</sup> Nantes Université, Institut des Substances et Organismes de la Mer, ISOMER, UR 2160, F-44000 Nantes, France ; <sup>2</sup> Laboratoire de Chimie Et Interdisciplinarité, Synthèse, Analyse, Modélisation (CEISAM), UMR CNRS 6230, Nantes Université, France ; <sup>3</sup> Plateforme CORSAIRE-ThalassOMICS, Biogenouest, Nantes Université, France ; <sup>4</sup> Plateforme CORSAIRE-CEISAM, Biogenouest, Nantes Université, France.

La Résonance Magnétique Nucléaire (RMN), souvent perçue comme l'outil d'élucidation spectrale par excellence pour la caractérisation de nouvelles molécules pures, est également un outil employé pour les études métabolomiques. Dans ce cas on cherche généralement à analyser une grande quantité d'échantillons dans un laps de temps le plus réduit possible. Ceci explique pourquoi les spectres à une dimension tels que le <sup>1</sup>H, obtenus rapidement grâce à la grande sensibilité du noyau observé, sont très prisés dans cette application. En revanche, la contrainte majeure de cette technique reste les recouvrements spectraux lorsque ce sont des matrices complexes telles que des extraits naturels qui sont analysés, ce qui peut empêcher d'isoler des signaux caractéristiques des biomarqueurs responsables des différences métaboliques entre échantillons. L'annotation est également complexifiée. L'approche proposée dans ce projet est de faire émerger des techniques multidimensionnelles déjà existantes au sein de la communauté RMN et de les adapter pour qu'elles puissent être employées en métabolomique appliquée à des matrices naturelles complexes. En effet, les techniques 2D disposent de la capacité de dispersion qui fait défaut au <sup>1</sup>H et doivent permettre de résoudre les écueils présentés précédemment <sup>1</sup>. Dans ce contexte, nous présenterons les résultats obtenus à l'aide d'une séquence COSY ultrarapide développée dans une problématique d'écologie chimique : quelles variations d'expression métabolique d'une souche fongique d'*Aspergillus chevalieri* en présence de son holobionte originaire, l'éponge *Tetilla* sp. ? Avantages et limites des deux types d'analyse seront développés.

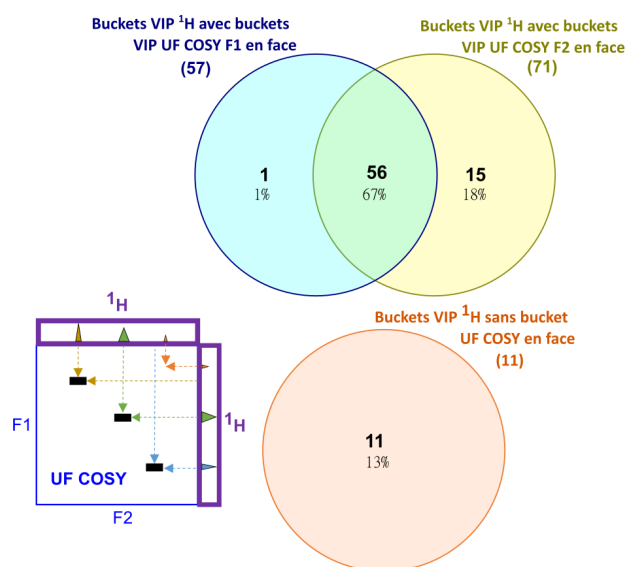


Figure 1 : Croisement des Buckets VIP 1H avec Buckets VIP UF COSY

Références : [1] Marchand, J. et al. *Metabolomics*, 2018, **14**, 60.

## Liste des participants

ABERKANE	Fatima	<a href="mailto:fatima.aberkane@norfeed.net">fatima.aberkane@norfeed.net</a>	Angers (France)
ABDIRHAMAN	Elmi	<a href="mailto:abelfourreh@hotmail.com">abelfourreh@hotmail.com</a>	Djibouti (Djibouti)
AKISSI	Evariste	<a href="mailto:zachee-louis-evariste.akissi@univ-reims.fr">zachee-louis-evariste.akissi@univ-reims.fr</a>	Reims (France)
AMOUSSA	Abdou Madjid	<a href="mailto:chifmadjid@gmail.com">chifmadjid@gmail.com</a>	Toulouse (France)
APEL	Cécile	<a href="mailto:cecile.apel@cnrs.fr">cecile.apel@cnrs.fr</a>	Paris-Saclay (ICSN) (France)
ATTIA	Rym	<a href="mailto:rym.attia@univ-orleans.fr">rym.attia@univ-orleans.fr</a>	Orléans (France)
AZNAR	Aude	<a href="mailto:a.aznar@synadiet.org">a.aznar@synadiet.org</a>	Synadiet (France)
BA	Abda	<a href="mailto:abda.ba.etu@univ-lille.fr">abda.ba.etu@univ-lille.fr</a>	Lille (France) / Dakar (Sénégal)
BAGHDIKIAN	Béatrice	<a href="mailto:beatrice.baghdikian@univ-amu.fr">beatrice.baghdikian@univ-amu.fr</a>	Aix-Marseille (France)
BENIDDIR	Mehdi	<a href="mailto:mehdi.beniddir@universite-paris-saclay.fr">mehdi.beniddir@universite-paris-saclay.fr</a>	Paris-Saclay (BioCIS) (France)
BERGOEND	Annabelle	<a href="mailto:annabelle.bergoend@iteipmai.fr">annabelle.bergoend@iteipmai.fr</a>	Chemillé (ITEIPMAI) (France)
BERRY	Olivier	<a href="mailto:olivier.berry@etu.univ-nantes.fr">olivier.berry@etu.univ-nantes.fr</a>	Nantes (France)
BERTRAND	Samuel	<a href="mailto:samuel.bertrand@univ-nantes.fr">samuel.bertrand@univ-nantes.fr</a>	Nantes (France)
BOISARD	Séverine	<a href="mailto:severine.boisard@univ-angers.fr">severine.boisard@univ-angers.fr</a>	Angers (France)
BONNET	Olivier	<a href="mailto:olivier.bonnet@uliege.be">olivier.bonnet@uliege.be</a>	Liège (France)
BORDAGE	Simon	<a href="mailto:simon.bordage@univ-lille.fr">simon.bordage@univ-lille.fr</a>	Lille (France)
BOUTEFNOUCHET	Sabrina	<a href="mailto:sabrina.boutefnouchet@u-paris.fr">sabrina.boutefnouchet@u-paris.fr</a>	Paris-Cité (France)
BOYER	François- Didier	<a href="mailto:francois-didier.boyer@cnrs.fr">francois-didier.boyer@cnrs.fr</a>	Paris-Saclay (ICSN) (France)
BUCAR	Franz	<a href="mailto:franz.bucar@uni-graz.at">franz.bucar@uni-graz.at</a>	Karl-Franzens-Universität, Graz (Autriche)
BUCHE	Gaëlle	<a href="mailto:gaelle.buche@univ-orleans.fr">gaelle.buche@univ-orleans.fr</a>	Orléans (France)
BUN-LLOPET	Sok-Siya	<a href="mailto:sok-siya.bun@univ-amu.fr">sok-siya.bun@univ-amu.fr</a>	Marseille (France)
BUSONT	Océane	<a href="mailto:oceane.busont@univ-orleans.fr">oceane.busont@univ-orleans.fr</a>	Orléans (France)
CHAMBAUD	Marine	<a href="mailto:marine.p-r@hotmail.fr">marine.p-r@hotmail.fr</a>	Orléans (France)
CHAMPY	Pierre	<a href="mailto:pierre.champy@universite-paris-saclay.fr">pierre.champy@universite-paris-saclay.fr</a>	Paris-Saclay (BioCIS) (France)
CHASSAGNE	François	<a href="mailto:francois.chassagne@ird.fr">francois.chassagne@ird.fr</a>	Toulouse (France)
CHOLLET-KRUGLER	Marylène	<a href="mailto:marylene.chollet@univ-rennes1.fr">marylene.chollet@univ-rennes1.fr</a>	Rennes (France)
COCHEREAU	Bastien	<a href="mailto:bastien.cochereau@etu.univ-nantes.fr">bastien.cochereau@etu.univ-nantes.fr</a>	Nantes (France)
COLLOT	Valérie	<a href="mailto:valerie.collot@unicaen.fr">valerie.collot@unicaen.fr</a>	Caen (France)
CRISTOFOLI	Valérie	<a href="mailto:valerie.cristofoli@univ-tlse3.fr">valerie.cristofoli@univ-tlse3.fr</a>	Toulouse (France)
CROSSAY	Elise	<a href="mailto:elise.crossay@univ-tlse3.fr">elise.crossay@univ-tlse3.fr</a>	Toulouse (France)
DERBRE	Séverine	<a href="mailto:severine.derbre@univ-angers.fr">severine.derbre@univ-angers.fr</a>	Angers (France)
DESRAT	Sandy	<a href="mailto:sandy.desrat@cnrs.fr">sandy.desrat@cnrs.fr</a>	Paris-Saclay (ICSN) (France)
DESTANDAU	Emilie	<a href="mailto:emilie.destandau@univ-orleans.fr">emilie.destandau@univ-orleans.fr</a>	Orléans (France)
DIASSY	Henry	<a href="mailto:henrydiassy92@gmail.com">henrydiassy92@gmail.com</a>	Nancy (France) / Ziguinchor, (Sénégal)
EPARVIER	Véronique	<a href="mailto:veronique.eparvier@cnrs.fr">veronique.eparvier@cnrs.fr</a>	Paris-Saclay (ICSN) (France)
FERRON	Solenn	<a href="mailto:solenn.ferron@univ-rennes1.fr">solenn.ferron@univ-rennes1.fr</a>	Rennes (France)

### Liste des participants / comité scientifique

FLIELLER	Gwenaelle	<a href="mailto:gwenaelle.flieller@etu.unistra.fr">gwenaelle.flieller@etu.unistra.fr</a>	Strasbourg (France)
FOUGÈRE	Laëtitia	<a href="mailto:laetitia.fougere@univ-orleans.fr">laetitia.fougere@univ-orleans.fr</a>	Orléans (France)
FREDERICH	Michel	<a href="mailto:M.Frederich@uliege.be">M.Frederich@uliege.be</a>	Liège (Belgique)
FOURNEAU	Christophe	<a href="mailto:Christophe.fourneau@universite-paris-saclay.fr">Christophe.fourneau@universite-paris-saclay.fr</a>	Paris-Saclay (France)
GADEA	Alice	<a href="mailto:alice.gadea@univ-tlse3.fr">alice.gadea@univ-tlse3.fr</a>	Toulouse (France)
GARCIA-BAEZA	Antoni	<a href="mailto:antoni.garcia-baeza@etu.univ-nantes.fr">antoni.garcia-baeza@etu.univ-nantes.fr</a>	Nantes (France)
GARGADENNEC-LEGOUIN	Béatrice	<a href="mailto:BEATRICE.LEGOUIN@UNIV-RENNES1.FR">BEATRICE.LEGOUIN@UNIV-RENNES1.FR</a>	Rennes (France)
GIRARD	Corine	<a href="mailto:corine.girard@univ-fcomte.fr">corine.girard@univ-fcomte.fr</a>	Besançon (France)
GIRARDOT	Marion	<a href="mailto:marion.girardot@univ-poitiers.fr">marion.girardot@univ-poitiers.fr</a>	Poitiers (France)
GROPPI	Emie	<a href="mailto:emie.groppi@univ-tlse3.fr">emie.groppi@univ-tlse3.fr</a>	Toulouse (France)
GROVEL	Olivier	<a href="mailto:Olivier.Grovel@univ-nantes.fr">Olivier.Grovel@univ-nantes.fr</a>	Nantes (France)
GUILLET	David	<a href="mailto:david.guilet@univ-angers.fr">david.guilet@univ-angers.fr</a>	Angers (France)
HAMANN	Carla	<a href="mailto:carla.hamann16@gmail.com">carla.hamann16@gmail.com</a>	Liège (Belgique)
HAMION	Guillaume	<a href="mailto:guillaume.hamion@univ-poitiers.fr">guillaume.hamion@univ-poitiers.fr</a>	Poitiers (France)
HAY DE BETTIGNIES	Anne-Emmanuelle	<a href="mailto:hay.de-bettignies@univ-lyon1.fr">hay.de-bettignies@univ-lyon1.fr</a>	Lyon (France)
HOBLOSS	Samir	<a href="mailto:samir.hobloss@univ-fcomte.fr">samir.hobloss@univ-fcomte.fr</a>	Dijon (France)
JAGORA	Adrien	<a href="mailto:adrien.jagora@universite-paris-saclay.fr">adrien.jagora@universite-paris-saclay.fr</a>	Paris-Saclay (BioCIS) (France)
JGERENAIA	Giorgi	<a href="mailto:giorgi.jgerenaia@doct.uliege.be">giorgi.jgerenaia@doct.uliege.be</a>	Liège (Belgique)
KERZAON	Isabelle	<a href="mailto:isabelle.kerzaon@univ-lyon1.fr">isabelle.kerzaon@univ-lyon1.fr</a>	Lyon (France)
LACAILLE-DUBOIS	Marie-Aleth	<a href="mailto:Marie-Aleth.Lacaille-Dubois@u-bourgogne.fr">Marie-Aleth.Lacaille-Dubois@u-bourgogne.fr</a>	Dijon (France)
LACHHAB	Zineb	<a href="mailto:zineblachhabpharma@gmail.com">zineblachhabpharma@gmail.com</a>	Marrakech (Maroc) (France)
LAHNGONG	Methodius Shinyuy	<a href="mailto:lahngongmethodius@gmail.com">lahngongmethodius@gmail.com</a>	Liège (Belgique) / Douala (Cameroun)
LAVAUD	Catherine	<a href="mailto:catherine.lavaud@univ-reims.fr">catherine.lavaud@univ-reims.fr</a>	Reims (France)
LE CABEC	Audrey	<a href="mailto:audrey.le-cabec@univ-orleans.fr">audrey.le-cabec@univ-orleans.fr</a>	Orléans (France)
LE LAMER	Anne-Cécile	<a href="mailto:anne-cecile.le-lamer@univ-tlse3.fr">anne-cecile.le-lamer@univ-tlse3.fr</a>	Toulouse (France)
LE RAY-RICHOMME	Anne-Marie	<a href="mailto:anne-marie.richomme@univ-angers.fr">anne-marie.richomme@univ-angers.fr</a>	Angers (France)
LEBLOND	Axel	<a href="mailto:axel.leblond@universite-paris-saclay.fr">axel.leblond@universite-paris-saclay.fr</a>	Paris-Saclay (BioCIS) (France)
LECLERCQ	Joëlle	<a href="mailto:joelle.leclercq@uclouvain.be">joelle.leclercq@uclouvain.be</a>	Bruxelles (Belgique)
LITAUDON	Marc	<a href="mailto:marc.litaudon@cnsr.fr">marc.litaudon@cnsr.fr</a>	Paris-Saclay (ICSN) (France)
LOHEZIC-LE DEVEHAT	Françoise	<a href="mailto:francoise.le-devehat@univ-rennes1.fr">francoise.le-devehat@univ-rennes1.fr</a>	Rennes (France)
MAKHOULFI	Hind	<a href="mailto:hind.makhloufi@etu.unilim.fr">hind.makhloufi@etu.unilim.fr</a>	Limoges (France)
MAMBU	Angèle	<a href="mailto:lengo.mambu@unilim.fr">lengo.mambu@unilim.fr</a>	Limoges (France)
MARZOUG	Rania	<a href="mailto:raniamar@live.fr">raniamar@live.fr</a>	Rennes (France)
MATTAR	Dominique	<a href="mailto:dominique.mattar@univ-lorraine.fr">dominique.mattar@univ-lorraine.fr</a>	Nancy (France)
MBENG OBAME	Rany	<a href="mailto:rany.mbeng-obame@universite-paris-saclay.fr">rany.mbeng-obame@universite-paris-saclay.fr</a>	Paris-Saclay (BioCIS) (France)
MBOMBO MUNGITSHI	Patricia	<a href="mailto:pmbombo@doc.uliege.be">pmbombo@doc.uliege.be</a>	Liège (Belgique)/ Kinshasa (RDC)
MENGHINI	Luigi	<a href="mailto:Lmenghini@unich.it">Lmenghini@unich.it</a>	Dipartimento di Farmacia - Università di Chieti (Italie)

## Liste des participants / comité scientifique

MICHAUD	Aurore	<a href="mailto:aurore.michaud@univ-nantes.fr">aurore.michaud@univ-nantes.fr</a>	Nantes (France)
MILLOT	Marion	<a href="mailto:marion.millot@unilim.fr">marion.millot@unilim.fr</a>	Limoges (France)
MOCQUARD	Julia	<a href="mailto:julia.mocquard@toulouse-inp.fr">julia.mocquard@toulouse-inp.fr</a>	Toulouse (France)
NAZARYAN	Samvel	<a href="mailto:samnazaryan94@gmail.com">samnazaryan94@gmail.com</a>	Dijon (France)
OTOGO N'NANG	Elvis	<a href="mailto:elvisotogonnang@gmail.com">elvisotogonnang@gmail.com</a>	Franceville (Gabon)
OUATTARA	Nangouban	<a href="mailto:nangouban.ouattara@univ-reims.fr">nangouban.ouattara@univ-reims.fr</a>	Reims (France) / Abidjan (Côte d'Ivoire)
PACHECO	Romina	<a href="mailto:minapt.91@gmail.com">minapt.91@gmail.com</a>	Toulouse (France)
PAGUET	Anne-Sophie	<a href="mailto:anne-sophie.paguat@univ-lille.fr">anne-sophie.paguat@univ-lille.fr</a>	Lille (France)
PETIT	Bastien	<a href="mailto:bastien.petit@ext.cnrs.fr">bastien.petit@ext.cnrs.fr</a>	Paris-Saclay (ICSN) (France)
PETIT	Karina	<a href="mailto:karina.petit@univ-nantes.fr">karina.petit@univ-nantes.fr</a>	Nantes (France)
PICHON	Valentin	<a href="mailto:valentin.pichon@etu.unilim.fr">valentin.pichon@etu.unilim.fr</a>	Limoges (France)
POUPON	Erwan	<a href="mailto:erwan.poupon@u-psud.fr">erwan.poupon@u-psud.fr</a>	Paris-Saclay (BioCIS) (France)
RICHOMME	Pascal	<a href="mailto:pascal.richomme@univ-angers.fr">pascal.richomme@univ-angers.fr</a>	Angers (France)
RIEUSSET	Laura	<a href="mailto:laura.rieusset@hotmail.fr">laura.rieusset@hotmail.fr</a>	Vannes (France)
RIVIERE	Céline	<a href="mailto:celine.riviere@univ-lille.fr">celine.riviere@univ-lille.fr</a>	Lille (France)
RONDEAU	David	<a href="mailto:david.rondeau@univ-rennes1.fr">david.rondeau@univ-rennes1.fr</a>	Rennes (France)
ROUGER	Caroline	<a href="mailto:caroline.rouger@u-bordeaux.fr">caroline.rouger@u-bordeaux.fr</a>	Bordeaux (France)
ROULLIER	Catherine	<a href="mailto:catherine.roullier@univ-nantes.fr">catherine.roullier@univ-nantes.fr</a>	Nantes (France)
ROUMY	Vincent	<a href="mailto:vincent.roumy@univ-lille.fr">vincent.roumy@univ-lille.fr</a>	Lille (France)
ROUSSI	Fanny	<a href="mailto:fanny.roussi@cnrs.fr">fanny.roussi@cnrs.fr</a>	Paris-Saclay (ICSN) (France)
SAHLI	Ramla	<a href="mailto:sahliramla@gmail.com">sahliramla@gmail.com</a>	Besançon (France)
SPINA	Rosella	<a href="mailto:rosella.spina@univ-lorraine.fr">rosella.spina@univ-lorraine.fr</a>	Nancy (France)
SZWARC	Sarah	<a href="mailto:sarah.szwarc@universite-paris-saclay.fr">sarah.szwarc@universite-paris-saclay.fr</a>	Paris-Saclay (BioCIS) (France)
TAOUBI	Khalil	<a href="mailto:khalil.taoubi@boiron.fr">khalil.taoubi@boiron.fr</a>	Laboratoires Boiron (France)
TOMASI	Sophie	<a href="mailto:sophie.tomasi@univ-rennes1.fr">sophie.tomasi@univ-rennes1.fr</a>	Rennes (France)
VALOIS	Ludivine	<a href="mailto:ludivine.valois@unistra.fr">ludivine.valois@unistra.fr</a>	Strasbourg (France)
VITRA	Adrien	<a href="mailto:adrien.vitrai@ird.fr">adrien.vitrai@ird.fr</a>	Toulouse (France)
VONTHRON	Catherine	<a href="mailto:vonthron@unistra.fr">vonthron@unistra.fr</a>	Strasbourg (France)
VOUTQUENNE	Laurence	<a href="mailto:laurence.voutquenne@univ-reims.fr">laurence.voutquenne@univ-reims.fr</a>	Reims (France)

### Comité scientifique

**Dr. Sabrina BOUTEFNOUCHET** (Paris), **Pr Pierre CHAMPY** (Paris-Saclay), **Dr. François CHASSAGNE** (Toulouse), **Pr Michel FREDERICH** (Liège), **Pr Olivier GROVEL** (Nantes), **Dr. Anne-Emmanuelle HAY DE BETTIGNIES** (Lyon), **Dr. Isabelle KERZAON** (Lyon), **Dr. Anne-Cécile LE LAMER** (Toulouse), **Dr. Karina-Ethel PETIT** (Nantes), **Pr Pascal RICHOMME** (Angers), **Dr. Céline RIVIERE** (Lille), **Dr. Fanny ROUSSI** (ICSN)

<https://aferp.fr/>

