

Annexe 2: Cyclodipeptides et dicétopipérazines détectés dans les surnageants de culture bactérienne.

CDPS	Souche bactérienne	Colonne analytique	Pic					Identification	Validation	References		
			#	tR (min)	Aire (214 nm)	Ion précurseur (m/z)	Ions fragments (m/z)					
1	M15-pREP4	dC18	1	19.1	678	205	188,177,159,149,132,113,106,96,86,76,74	cCC	HMRS et analyse en composition d'acides aminés			
		HyperCarb	1	27.9	623	205	188,186,177,160,159,149,132,113,96	cCC	HMRS et analyse en composition d'acides aminés			
	BL21AI	dC18	1	19.3	513	205	188,177,149,132,113,106,96,86,74	cCC	HMRS et analyse en composition d'acides aminés			
		HyperCarb	1	28.2	813	205	188,177,159,149,132,113	cCC	HMRS et analyse en composition d'acides aminés			
	BL21AI-pREP4	dC18	1	19.1	313	205	188,177,159,149,132,113,106,96,86,76,74	cCC	HMRS et analyse en composition d'acides aminés			
		HyperCarb	1	27.9	387	205	188,186,177,160,159,149,132,113,96	cCC	HMRS et analyse en composition d'acides aminés			
2	M15-pREP4	dC18	1	19.2	Détection en EIC	205	no data	cCC ¹	HMRS et analyse en composition d'acides aminés			
	BL21AI	dC18	1	19.3	Détection en EIC	205	188,177,163,159,149,132,113,106,96,86,76	cCC	HMRS et analyse en composition d'acides aminés			
		HyperCarb	1	28.2	Détection en EIC	205	no data	cCC ¹	HMRS et analyse en composition d'acides aminés			
3	M15-pREP4	dC18	1	17.5	189	175	158,147,130,111,102,83,(76)	cCA	Aucune			
			2	19.2	100	205	188,177,159,149,132,113,106,96,76	cCC	HMRS et analyse en composition d'acides aminés			
			3	26.5	166	203	186,175,158,139,130,72,5	cCV	Aucune			
	BL21AI	HyperCarb	1	28,0	Détection en EIC	205	186,177,160,159,149,132,130,113,106	cCC	HMRS et analyse en composition d'acides aminés			
			dC18	1	17.5	459	175	158,157,147,130,111,102,83	cCA	Aucune		
		dC18	2	19.3	1038	205	188,177,159,149,132,113,106,96,86,76	cCC	HMRS et analyse en composition d'acides aminés			
			3	26.9	241	203	175,157,139,130,72,5	cCV	Aucune			
			1	28.2	349	205	188,177,159,149,132,113,106,96	cCC	HMRS et analyse en composition d'acides aminés			
		4	M15-pREP4	dC18	1	19.2	495	205	188,177,159,132,113,106,96	cCC	HMRS et analyse en composition d'acides aminés	
				HyperCarb	1	28	316	205	188,177,159,149,132,113,106,96	cCC	HMRS et analyse en composition d'acides aminés	
BL21AI	dC18		1	19.3	847	205	188,177,149,132,113,106,96,86,74	cCC	HMRS et analyse en composition d'acides aminés			
	HyperCarb		1	28.1	920	205	188,177,159,149,132,113,106,96	cCC	HMRS et analyse en composition d'acides aminés			
5	M15-pREP4	dC18	1	19.2	161	205	188,177,159,149,132,113,106,96,76	cCC	HMRS et analyse en composition d'acides aminés			
		HyperCarb	1	28	147	205	188,186,177,159,149,132,113,106,96,86	cCC	HMRS et analyse en composition d'acides aminés			
	BL21AI	dC18	1	19.3	292	205	188,177,149,132,113,106,96,86,76	cCC	HMRS et analyse en composition d'acides aminés			
		HyperCarb	1	28.1	422 ^a	205	188,177,159,149,132,113,106,96	cCC	HMRS et analyse en composition d'acides aminés			
6	M15-pREP4	dC18	1	19.2	Détection en EIC	205	no data	cCC ¹	HMRS et analyse en composition d'acides aminés			
		HyperCarb	1	28	30	205	188,186,177,159,149,132,113,106,96,86	cCC	HMRS et analyse en composition d'acides aminés			
	BL21AI	dC18	1	19.3	Détection en EIC	205	188,177,149,132,113,106,96,86,82	cCC	HMRS et analyse en composition d'acides aminés			
		HyperCarb	1	28.1	240 ^a	205	no data	cCC ¹	HMRS et analyse en composition d'acides aminés			
7	M15-pREP4	dC18	1	19.2	570	205	188,177,159,149,132,113,106,96,76	cCC	HMRS et analyse en composition d'acides aminés			
			2	26.6	Détection en EIC	203	175,158,140,72	cCV	Aucune			
	BL21AI	HyperCarb	1	28	604	205	188,186,177,159,149,132,113,106,96,86	cCC	HMRS et analyse en composition d'acides aminés			
		dC18	1	19.3	1135	205	188,177,149,132,113,106,96,86,76	cCC	HMRS et analyse en composition d'acides aminés			
		HyperCarb	1	28.2	1080	205	188,177,149,132,113,106,96,76	cCC	HMRS et analyse en composition d'acides aminés			
8	M15-pREP4	dC18	1	26.6	87	197	180,169,141,124,72,5,70,5	cVP	Comparaison avec des données de la littérature	1		
			1	20.9	2230	157	140,129,112,101,84,72,55	cVG	HMRS et analyse en composition d'acides aminés			
	BL21AI-pREP4	dC18	2	31.6	57	197	180,169,152,141,124,72,70,5	cVP	Comparaison avec des données de la littérature	1		
			1	18.4	1334	157	140,129,112,101,84,72,5,55	cVG	HMRS et analyse en composition d'acides aminés			
		HyperCarb	2	26.6	58	197	180,169,141,124,72,5,70,5	cVP	Comparaison avec des données de la littérature	1		
			1	21	539	157	140,129,112,101,84,72,5,55	cVG	HMRS et analyse en composition d'acides aminés			
2	32	Détection en EIC	197	180,169,141,124,72,70,4	cVP	Comparaison avec des données de la littérature	1					
9	M15-pREP4	dC18	1	19.1	989	205	188,177,159,149,132,113,106,96,86	cCC	HMRS et analyse en composition d'acides aminés			
		HyperCarb	1	28	896	205	188,177,159,149,132,113,106,96,86	cCC	HMRS et analyse en composition d'acides aminés			
	BL21AI	dC18	1	19.2	1246	205	188,177,149,132,113,106,96,86,76	cCC	HMRS et analyse en composition d'acides aminés			
		HyperCarb	1	28.2	1433	205	188,177,159,159,149,132,113,106,96,76	cCC	HMRS et analyse en composition d'acides aminés			
10	M15-pREP4	dC18	1	29.4	3389	229	181	cPM	Comparaison avec un standard			
			2	33.8	402	211	153,125,84,70 194,183,155,138,127,110,86,70	cPL	Comparaison avec un standard			

		HyperCarb	1	40.7	3655	229	153,125,97,84,70	cPM	Comparaison avec un standard	
			2	43.7	trace	211	194,183,167,155,138,86,70	cPL	Comparaison avec un standard	
	BL21AI	dC18	1	29.4	6425	229	153,125,84,70	cPM	Comparaison avec un standard	
			2	33.8	294	211	194,183,155,138,127,110,86,70	cPL	Comparaison avec un standard	
		HyperCarb	1	41.7	5082	229	181	cPM	Comparaison avec un standard	
						181	153,125,97,84,70	cPM	Comparaison avec un standard	
11	M15-pREP4	no cyclodipeptide detected								
	BL21AI	no cyclodipeptide detected								
12	M15-pREP4	no cyclodipeptide detected								
	BL21AI	no cyclodipeptide detected								
13	M15-pREP4	dC18	1	43.7	6633	227	199,182,171,154,98,86	cLL	Comparaison avec un standard	
			2	44.6	512	261	233,216,188,120,86	cLF	Comparaison avec des données de la littérature	2
		HyperCarb	1	27	95	171	154,143,126,115,98,86,75	cLG	Comparaison avec un standard	
			2	47.2	2349 ^b	227	199,182,171,154,98,86	cLL	Comparaison avec un standard	
	BL21AI	dC18	1	43.7	6966	227	199,182,171,154,98,86	cLL	Comparaison avec un standard	
			2	44.6	123	261	233,216,188,120,86	cLF	Comparaison avec des données de la littérature	2
		HyperCarb	1	46.3	5204	227	199,182,171,154,98,86	cLL	Comparaison avec un standard	
			2	54.1	205	261	233,216,188,120,103,83	cLF	Comparaison avec des données de la littérature	2
14	M15-pREP4	dC18	1	46.7	11842	373	356,256,242,214,187,170,130	cWW	Comparaison avec des données de la littérature	3
	BL21AI	dC18	1	46.7	16131	373	356,256,242,214,187,170,130	cWW	Comparaison avec des données de la littérature	3
15	M15-pREP4	no cyclodipeptide detected								
	BL21AI	no cyclodipeptide detected								
16	M15-pREP4	dC18	1	26.4	74	197	180,169,152,141,124,72,70	cPV	Comparaison avec des données de la littérature	1
			2	36.6	786	213	185,168,140,86,72.5	cLV	Comparaison avec un standard	
		HyperCarb	1	30.9	62	185	157,140,129,112,86	cLA	Comparaison avec un standard	
			2	31.6	137 ^c	199	171,154,126,72	cVV	Comparaison avec un standard	
			3	31.8	152 ^c	197	180,169,152,141,124,72,70	cPV	Comparaison avec des données de la littérature	1
			4	38.3	1426	213	185,168,157,140,86,72	cLV	Comparaison avec un standard	
	BL21AI	dC18	1	26.9	116	197	180,169,14,124,100,72.5,70	cPV	Comparaison avec des données de la littérature	1
			2	29.2	144	185	157,140,129,112,101,86	cLA	Comparaison avec un standard	
			3	37.5	536 ^c	213	185,168,140,86,72.5	cLV	Comparaison avec un standard	
		HyperCarb	1	32.2	40	197	180,169,14,124,100,72.5,70	cPV	Comparaison avec des données de la littérature	1
			2	38.6	408	213	185,168,157,140,86,72	cLV	Comparaison avec un standard	
17	M15-pREP4	dC18	1	22.2	249	285	268,257,224,212,166,138,120	cHF	HMRS et analyse en composition d'acides aminés	
		HyperCarb	1	27	295	285	268,257,224,212,166,138,120,110,93,83	cHF	HMRS et analyse en composition d'acides aminés	
		dC18	1	19.6	Détection en EIC	285	268,257,240,224,212,166,138,120,110,93,83	cHF	HMRS et analyse en composition d'acides aminés	
		HyperCarb	1	27.1	103	285	268,257,240,224,212,166,138,120,110,93,83	cHF	HMRS et analyse en composition d'acides aminés	
18	M15-pREP4	dC18	1	19.6	1733	169	152,141,125,113,98,70.4	cAP	HMRS et analyse en composition d'acides aminés	
		HyperCarb	1	26.8	2610	169	152,141,125,113,98,96,70.4	cAP	HMRS et analyse en composition d'acides aminés	
	BL21AI	dC18	1	19.7	568	169	152,141,125,113,98,70.4	cAP	HMRS et analyse en composition d'acides aminés	
		HyperCarb	1	27	477	169	152,141,125,113,98,70.4	cAP	HMRS et analyse en composition d'acides aminés	
19	M15-pREP4	dC18	1	32.7	18	217	199,189,172,153,144,116,104,86	cLC	Aucune	
			2	33.2	Détection en EIC	211	194,183,166,155,138,114,86,70	cLP	Comparaison avec un standard	
			3	37.3	Détection en EIC	245	no data	cLM ¹	Comparaison avec des données de la littérature	2
			4	41.5	638	227	199,182,154,114,98,86	cLI	Comparaison avec un standard	
		HyperCarb	1	46.1	874	227	199,182,171,154,114,89	cLI	Comparaison avec un standard	
			2	48.2	Détection en EIC	245	197	cLM	Comparaison avec des données de la littérature	2
						197	169,152,141,124,113,101,96,85,73	cLM	Comparaison avec des données de la littérature	
	BL21AI	dC18	1	33.2	110	217	199,189,172,153,144,86	cLC	Aucune	
			2	33.8	58	211	194,183,153,138,98,86,70	cLP	Comparaison avec un standard	
			3	38.1	157	245	197	cLM	Comparaison avec des données de la littérature	2
						197	169,152,141,124,113,101,85,73	cLM	Comparaison avec des données de la littérature	
			4	42.7	3835	227	199,182,154,126,98,86	cLI	Comparaison avec un standard	
		HyperCarb	1	46.5	1766	227	199,182,171,154,114,89	cLI	Comparaison avec un standard	

			2	48.1	2568 ^a	245	197				
						197	169,152,141,124,113,101,96,85,73	cLM	Comparaison avec des données de la littérature	2	
20	M15-pREP4	dC18	1	36	100	245	217,120,70,5	cFP	Comparaison avec un standard		
		HyperCarb	1	38.8	1066	262	245	cFN	Comparaison avec un standard		
			2		96	245	203,175,130	cFP	Comparaison avec un standard		
						245	217,120,70,5				
21	M15-pREP4	dC18	1	31.1	Détection en EIC	277	249,232,204,171,136,107,86	cLY	Comparaison avec un standard		
			2	38	76	245	197	cLM	Comparaison avec des données de la littérature	2	
						197	169,152,141,113,85				
			3	42.4	2212	227	199,182,54,143,86	cLL	Comparaison avec un standard		
			4	43.5	569	261	233,216,188,120,86	cLF	Comparaison avec des données de la littérature	2	
		HyperCarb	1	30.8	194	242	225	cLQ	Aucune		
						225	197,141,129,113,86,84				
			2	45	3253	227	199,182,154,143,86	cLL	Comparaison avec un standard		
			3	47.3	530	245	197	cLM	Comparaison avec des données de la littérature	2	
						197	169,152,141,113,85				
			4	54	846	261	233,216,188,120,86	cLF	Comparaison avec des données de la littérature	2	
	BL21AI	dC18	1	31.1	Détection en EIC	277	249,232,204,171,147,136,119,107,86	cLY	Comparaison avec un standard		
			2	33	Détection en EIC	217	199,189,172,153,144,101,86	cLC	Aucune		
			3	33.5	Détection en EIC	211	194,183,167,155,1338,127,114,99,86,70.5	cLP	Comparaison avec un standard		
			4	38.7	124	245	197	cLM	Comparaison avec des données de la littérature	2	
						197	169,152,141,113,85				
			5	43.4	2206	227	199,182,54,143,86	cLL	Comparaison avec un standard		
			6	44.5	361	261	233,216,188,120,86	cLF	Comparaison avec des données de la littérature	2	
		HyperCarb	1	30.8	100	242	225	cLQ	Aucune		
						225	197,141,129,113,86,84				
			2	45.5	2226	227	199,182,154,143,86	cLL	Comparaison avec un standard		
			3	47.3	262	245	197	cLM	Comparaison avec des données de la littérature	2	
						197	169,152,141,113,85				
			4	54	338	261	233,216,188,120,86	cFL	Comparaison avec des données de la littérature	2	
22	M15-pREP4	dC18	1	19.2	218	251	233,223,205,178,145,136,107,99,87	cYS	Comparaison avec un standard		
			2	20.2	2124	265	247,237,219,191,174,162,141,136,113,107,85	cYT	Aucune		
			3	21.8	2045	235	207,147,136,129,107	cYA	Comparaison avec un standard		
			4	26.5	330	249	231,221,203,186,175,158,146,120,91	cFT	Comparaison avec un standard		
			5	26.8	4618	261	233,155,147,136	cYP	Comparaison avec un standard		
			6	30	5931	263	235,218,190,157,136,119,107,91	cYV	HMRS et analyse en composition d'acides aminés		
			7	30.5	758	219	191,174,120	cFA	Comparaison avec un standard		
			8	32.8	232	277	249,232,204,136,86	cYL	Comparaison avec un standard		
			9	36	2019	245	217,200,189,131,120,70	cFP	Comparaison avec un standard		
			10	39.7	1435	247	214,202,174,120,72	cFV	Comparaison avec un standard		
		HyperCarb	1	39.9	280	251	233,223,205,178,145,136,107,87	cYS	Comparaison avec un standard		
			2	42.2	858	219	191,174,120	cFA	Comparaison avec un standard		
			3	42.7	2792	235	207,190,164,147,136,129,107	cYA	Comparaison avec un standard		
			4	43.9	937	249	231,221,203,175,158,146,120,91	cFT	Comparaison avec un standard		
			5	44.6	3251	265	247,237,219,191,174,162,141,136,113,107,85	cYT	Aucune		
			6	51.2	6319	261	233,215,155,147,136	cYP	Comparaison avec un standard		
			7	52.1	3139	245	217,200,120,70	cFP	Comparaison avec un standard		
			8	56.2	1727	247	219,202,174,72	cFV	Comparaison avec un standard		
			9	56.9	8088	263	235,218,190,157,136,119,107,91	cYV	HMRS et analyse en composition d'acides aminés		
			10	59.0	244	277	249,232,204,136,86	cYL	Comparaison avec un standard		
23	M15-pREP4	dC18	1	44.6	71	261	233,216,188,120,86	cFL	Comparaison avec des données de la littérature	2	
			2	47.4	888	295	267,250,22,120,103	cFF	Comparaison avec des données de la littérature	2	
		HyperCarb	1	54	90	261	233,216,188,120,86	cFL	Comparaison avec des données de la littérature	2	
	BL21AI	dC18	1	44.6	24	261	233,216,188,120,86	cFL	Comparaison avec des données de la littérature	2	
			2	47.4	1439	295	267,250,22,120,103	cFF	Comparaison avec des données de la littérature	2	

24	M15-pREP4	dC18	1	44.5	769	261	233,216,188,120,86	cFL	Comparaison avec des données de la littérature	2		
			2	47.3	863	295	267,250,120,103	cFF	Comparaison avec des données de la littérature	2		
	BL21AI	HyperCarb	1	54	821	261	233,216,188,120,86	cFL	Comparaison avec des données de la littérature	2		
			dC18	1	44.5	974	261	233,216,188,120,86	cFL	Comparaison avec des données de la littérature	2	
		dC18	2	47.3	1916	295	267,250,22,120,103	cFF	Comparaison avec des données de la littérature	2		
			HyperCarb	1	54.2	881	261	233,216,188,120,86	cFL	Comparaison avec des données de la littérature	2	
25	M15-pREP4	dC18	1	22.8	4112	195	151,98,70.4	cPP	Comparaison avec des données de la littérature	1,4		
			2	26.8	85	261	244,233,155,136,113,91	cPY	Comparaison avec un standard			
			3	31.3	Détection en EIC	211	194,183,166,155,138,86,70.4	cPi ²	Aucune			
			4	33	Détection en EIC	211	194,183,166,155,138,127,86,70.5	cPL	Comparaison avec un standard			
			5	36	197	245	217,172,120,70.4	cPF	Comparaison avec un standard			
			6	38.1	707	284	267,239,170,153,132,130,115	cPW	Aucune			
	BL21AI-pREP4	HyperCarb	1	30.8	4554	195	151,98,70.4	cPP	Comparaison avec des données de la littérature	1,4		
			2	41.1	53	211	194,183,166,155,138,86,70.5	cPL	Comparaison avec un standard			
		dC18	1	23	1914	195	151,98,70.4	cPP	Comparaison avec des données de la littérature	1,4		
			2	27.3	168	261	244,233,155,136,113,91	cPY	Comparaison avec un standard			
			3	32	Détection en EIC	211	194,183,166,155,138,99,86,70.5	cPi ²	Aucune			
			4	33.4	Détection en EIC	211	194,183,166,155,138,86,70.4	cPL	Comparaison avec un standard			
		HyperCarb	5	36	40	245	217,172,120,70.5	cPF	Comparaison avec un standard			
			6	38.9	Détection en EIC	284	267,239,170,153,132,130,115	cPW	Aucune			
			1	31.8	1993	195	151,98,70.4	cPP	Comparaison avec des données de la littérature	1,4		
			2	41.1	32	211	194,183,166,155,138,86,70.5	cPL	Comparaison avec un standard			
	26	M15-pREP4	dC18	1	22.8	1989	195	151,98,70.4	cPP	Comparaison avec des données de la littérature	1,4	
				HyperCarb	1	30.8	2096	195	151,98,70.4	cPP	Comparaison avec des données de la littérature	1,4
		BL21AI-pREP4	dC18	1	23.1	129	195	151,98,70.4	cPP	Comparaison avec des données de la littérature	1,4	
				HyperCarb	1	31.1	176	195	151,98,70.4	cPP	Comparaison avec des données de la littérature	1,4
	27	M15-pREP4	HyperCarb	1	19.9	1779	172	155	cGN	HMRS et analyse en composition d'acides aminés		
				155	127,113,99,85							
BL21AI-pREP4		HyperCarb	1	20	1181	172	155	cGN	HMRS et analyse en composition d'acides aminés			
			155	127,113,99,85								
28	M15-pREP4	dC18	1	15.6	2828	143	115,98,87,70.5	cAA	Comparaison avec un standard			
			2	19.6	106	169	151,141,125,113,98,70.4	cAP	HMRS et analyse en composition d'acides aminés			
			HyperCarb	1	21.8	3093	143	115,98,87,70.5	cAA	Comparaison avec un standard		
			2	26.8	125	169	151,141,124,113,98,70.5	cAP	HMRS et analyse en composition d'acides aminés			
	BL21AI-pREP4	dC18	1	15.4	957	143	115,98,87,70.5	cAA	Comparaison avec un standard			
			2	19.6	65	169	151,141,125,113,98,70.4	cAP	HMRS et analyse en composition d'acides aminés			
		HyperCarb	1	21.8	2024	143	115,98,87	cAA	Comparaison avec un standard			
			2	27	130	169	152,141,124,113,98,96,70.5	cAP	HMRS et analyse en composition d'acides aminés			
		29	M15-pREP4	dC18	1	15.6	805	143	115,98,87,70.5	cAA	Comparaison avec un standard	
					2	19.6	Détection en EIC	169	151,141,125,113,98,70.4	cAP	HMRS et analyse en composition d'acides aminés	
HyperCarb	1				21.7	1129	143	115,98,87,70.5	cAA	Comparaison avec un standard		
2	26.8				125	169	151,141,124,113,98,70.5	cAP	HMRS et analyse en composition d'acides aminés			
BL21AI-pREP4	dC18		1	15.4	739	143	115,98,87,70.5	cAA	Comparaison avec un standard			
			2	19.6	Détection en EIC	169	151,141,125,113,98,70.4	cAP	HMRS et analyse en composition d'acides aminés			
	HyperCarb		1	21.9	1027	143	115,98,70.5	cAA	Comparaison avec un standard			
			2	27	28	169	152,141,124,113,98,96,70.5	cAP	HMRS et analyse en composition d'acides aminés			
30	M15-pREP4	dC18	1	24.1	66	203	155	cAM	Aucune			
			155	127,110,99,84								
			2	28.6	139	185	157,140,129,112,86	cAP	HMRS et analyse en composition d'acides aminés			
			3	28.9	100	229	181	cMP	Comparaison avec un standard			
			181	153,125,97,84,70.4								
			4	30.4	61	219	191,174,146,120	cAF	Comparaison avec un standard			
			5	33	Détection en EIC	211	194,183,166,155,138,127,114,98,86	cLP	Comparaison avec un standard			
			HyperCarb	1	26.8	153	171	154,143,126,115,108,98,86,72	cLG	Comparaison avec un standard		
				2	29.6	243	189	141	cMG	Aucune		
				141	113,85							

			3	30.7	75	185	157,140,129,112,101,86	cAL	Comparaison avec un standard
			4	33.6	Détection en EIC	203	155	cAM	Aucune
			5	41	385 unresolved	211	127,110,99	cLP	Comparaison avec un standard
				41.2		229	194,183,166,155,138,127,114,86,70.5	cMP	Comparaison avec un standard
						181	153,125,97,84,70.5	cAF	Comparaison avec un standard
			7	42.2	153	219	191,174,120	cAM	Aucune
			1	24.3	67	203	155	cAM	Aucune
						155	127,110,99,84	cAL	Comparaison avec un standard
			2	28.8	94	185	167,157,140,129,112,101,86	cMP	Comparaison avec un standard
			3	29.3	91	229	181	cMP	Comparaison avec un standard
						181	153,125,97,84,70.4	cAF	Comparaison avec un standard
			4	30.8	40	219	191,174,120	cLP	Comparaison avec un standard
			5	33.5	39	211	194,183,166,155,138,127,114,98,86,70.5	cLG	Comparaison avec un standard
		HyperCarb	3	27	43	171	154,143,126,115,108,98,86,72	cMG	Aucune
			4	29.7	102	189	141	cAL	Comparaison avec un standard
						141	113,85	cAL	Aucune
			5	30.9	19	185	157,140,129,112,101,86	cLP	Comparaison avec un standard
			6	33.9	71	203	155	cAL	Aucune
						155	127,110,99	cLP	Comparaison avec un standard
			7	41.3	86 unresolved	211	194,183,166,155,138,127,114,86,70.5	cMP	Comparaison avec un standard
			8	41.5		229	181	cMP	Comparaison avec un standard
						181	153,125,97,84,70.5	cAF	Comparaison avec un standard
			9	42.3	21	219	191,174,146,120	cAG	Comparaison avec un standard
31	M15-pREP4	dC18	1	8.5	5828	129	112,101,84,73,56	cAA	Comparaison avec un standard
			2	15.9	929	143	115,98,87,70.5	cAP	HMRS et analyse en composition d'acides aminés
			3	31	104	169	152,141,125,113,96,70.4	cAG	Comparaison avec un standard
		HyperCarb	1	20.3	5509	129	112,101,84,73,72,56	cAA	Comparaison avec un standard
			2	21.8	856	143	115,98,87,70.4	cAP	HMRS et analyse en composition d'acides aminés
			3	26.8	127	169	152,141,125,113,96,70.5		
32	M15-pREP4	no cyclodipeptide detected							
	BL21AI	no cyclodipeptide detected							
33	M15-pREP4	HyperCarb	1	20	1245	115	98,87,70,59	cGG	Comparaison avec un standard
	BL21AI	HyperCarb		19.9	1201	115	97,87,70,59	cGG	Comparaison avec un standard
34	M15-pREP4	no cyclodipeptide detected							
	BL21AI	no cyclodipeptide detected							
35	M15-pREP4	no cyclodipeptide detected							
	BL21AI	no cyclodipeptide detected							
36	M15-pREP4	dC18	1	20.5	77	215	197,187,181,160,152,141,126,113,86	cLT	Aucune
			2	24.1	385	203	155	cMA	Aucune
						155	127,110,99	cLE	HMRS et analyse en composition d'acides aminés
			3	27.8	4793	243	225	cLA	Comparaison avec un standard
						225	197,141,129,113,86	cMP	Comparaison avec un standard
			4	28.6	1735	185	157,140,129,112,101,86	cLC	Aucune
			5	28.9	106	229	181	cLP	Comparaison avec un standard
						181	153,125,97,84,70.5	cLV	Comparaison avec un standard
			6	32.6	98	217	189,172,153,144,86	cLL	Comparaison avec un standard
			7	33	1156	211	194,183,167,155,138,127,114,86,70.4	cAE	Comparaison avec un standard
			8	36.6	Détection en EIC	213	185,168,140,86,72.5	cLT	Aucune
			9	42.4	Détection en EIC	227	199,182,154,86	cLA	Comparaison avec un standard
		HyperCarb	1	25.4	76	201	183	cMA	Aucune
						183	155,127,110,84		
			2	27.2	163	215	197,187,169,153,141,126,113,86		
			3	30.7	1812	185	157,140,129,112,101,86		
			4	33.7	815	203	155		

					155	127,110,99	cMA	Aucune	
		5	35.6	5117	243	225			
					225	197,141,129,113,86	cLE	HMRS et analyse en composition d'acides aminés	
		6	38	Détection en EIC	213	185,168,140,86,72.5	cLV	Comparaison avec un standard	
		7	41.1	926	211	194,183,167,155,138,127,114,86,70.4	cLP	Comparaison avec un standard	
		8	47	Détection en EIC	245	197			
					197	169,152,141,113,85	cML	Comparaison avec des données de la littérature	2
	BL21AI-pREP4	dC18	1	20.5	148	215	197,187,181,160,152,141,126,113,86	cLT	Aucune
			2	24.3	271	203	155	cMA	Aucune
						155	127,110,99		
			3	28.1	3670	243	225	cLE	HMRS et analyse en composition d'acides aminés
						225	197,141,129,113,86		
			4	28.9	1236	185	157,140,129,112,101,86	cLA	Comparaison avec un standard
			5	29.3	79	229	181	cMP	Comparaison avec un standard
						181	153,125,97,84,70.5		
			6	33	169	217	189,172,153,144,86	cLC	Aucune
			7	33.5	609	211	194,183,167,155,138,127,114,86,70.4	cLP	Comparaison avec un standard
			8	34.1	39	263	215		
						215	167	cMM	Comparaison avec un standard
			9	37.2	55	213	185,168,157,140,86,72.5	cLV	Comparaison avec un standard
			10	43.4	103	227	199,182,154,86	cLL	Comparaison avec un standard
		HyperCarb	1	27.4	159	215	197,187,169,152,141,126,113,86	cLT	Aucune
			2	31	1145	185	157,140,129,112,101,86	cLA	Comparaison avec un standard
			3	33.9	539	203	155		
						155	127,110,99	cMA	Aucune
			4	35.6	3353	243	225	cLE	HMRS et analyse en composition d'acides aminés
						225	197,141,129,113,86		
			5	38.4	455 ^a	213	185,168,157,140,86,72.5	cLV	Comparaison avec un standard
			6	14.4	640	211	194,183,167,155,138,127,114,86,70.4	cLP	Comparaison avec un standard
			7	47.4	42	245	197		
						197	169,152,141,124,113,85	cLM	Comparaison avec des données de la littérature
						197	169,152,141,124,113,85		2
37	M15-pREP4	dC18	1	15.7	7822	201	183	cEA	Comparaison avec un standard
						183	155,127,110,84		
		HyperCarb	1	25.4	9526	201	183	cEA	Comparaison avec un standard
						183	127,110,99,84		
		dC18	1	15.7	10998	201	183	cEA	Comparaison avec un standard
						183	155,127,110,84		
		HyperCarb	1	25.4	10115	1201	183	cEA	Comparaison avec un standard
						183	127,110,99,84		
38	M15-pREP4	dC18	1	15.6	116	143	115,98,87	cAA	Comparaison avec un standard
			2	15.7	3981	201	183	cEA	Comparaison avec un standard
						183	155,127,110,84		
		HyperCarb	1	21.8	81	143	115,98,87,70.5	cAA	Comparaison avec un standard
			2	25.4	4423	201	183		
						183	155	cEA	Comparaison avec un standard
						155	127,110,99,84		
	BL21AI	dC18	1	15.7	6595	201	183	cEA	Comparaison avec un standard
						183	155		
						155	127,110,84		
		HyperCarb	1	21.7	386	143	115,98,87,70.5	cAA	Comparaison avec un standard
			2	25.4	6558	201	183		
						183	155	cEA	Comparaison avec un standard
						155	127,110,99,84		
39	M15-pREP4	dC18	1	15.5	Détection en EIC	143	126,115,98	cAA	Comparaison avec un standard
			2	19.5	103	169	152,141,124,113,96,70	cAP	HMRS et analyse en composition d'acides aminés

		HyperCarb	1	21.7	117	143	115,98,87,70,5	cAA	Comparaison avec un standard	
			2	23	53	217	199	cES	Aucune	
			3	25.4	4842	199	181,171,169,154,141,126,98,84			
						201	183			
						183	155	cEA	Comparaison avec un standard	
						155	127,110,99,84			
			4	26.8	98	169	152,141,125,113,96,70.5	cAP	HMRS et analyse en composition d'acides aminés	
	BL21AI	dC18	1	15.6	330	143	126,115,98	cAA	Comparaison avec un standard	
		HyperCarb	1	21.7	561	143	115,98,87,70,5	cAA	Comparaison avec un standard	
			2	22.9	Détection en EIC	217	199	cES	Aucune	
						199	181,171,169,154,126,98			
			3	25.4	8698	201	183			
						183	155	cEA	Comparaison avec un standard	
						155	127,110,99,84			
			4	27	200	169	152,141,125,113,96,70.5	cAP	HMRS et analyse en composition d'acides aminés	
40	M15-pREP4	dC18	1	15.8	5736	201	183			
						183	155,127,110,84	cEA	Comparaison avec un standard	
		HyperCarb	1	21.7	20	143	115,98,87,70.5	cAA	Comparaison avec un standard	
			2	23	147	217	199	cES	Aucune	
						199	181,171,169,154,141,126,98,84			
			3	25.4	6665	201	183			
						183	155	cEA	Comparaison avec un standard	
						155	127,110,99,84			
			4	26.8	178	169	152,141,125,113,96,70.5	cAP	HMRS et analyse en composition d'acides aminés	
	BL21AI	dC18	1	15.7	10963	201	183			
						183	155	cEA	Comparaison avec un standard	
						155	127,110,84			
		HyperCarb	1	21.7	20	143	125,115,98,87.3	cAA	Comparaison avec un standard	
			2	23	88	217	199	cES	Aucune	
						199	181,171,169,154,141,126,98,84,60.5			
			3	25.4	9389	201	183			
						183	155	cEA	Comparaison avec un standard	
						155	127,110,99,84			
			4	27	282	169	152,141,70.4	cAP	HMRS et analyse en composition d'acides aminés	
41	M15-pREP4	dC18	1	27.5	362	295	247			
						247	219,202,191,174,146,113,85	cYM	Comparaison avec des données de la littérature	2
			2	28.3	55	327	299,254,221,136,107	cYY	Comparaison avec des données de la littérature	2
			3	33.6	193	263	215	cMM	Comparaison avec des données de la littérature	2
						215	167,140,111			
			4	37.1	3702 ^a	311	283,266,238,205,136,120	cYF	Comparaison avec des données de la littérature	2
			5	38	242	245	197	cLM	Comparaison avec des données de la littérature	2
						197	169,152,141,124,113,85			
			6	39.1	1173	279	231	cFM	Comparaison avec des données de la littérature	2
						231	203,186,158,130,120,91			
			7	42.4	214	227	199,182,171,154,98,86	cLL	Comparaison avec un standard	
			8	43.6	9267	261	233,261,188,120,86	cFL	Comparaison avec des données de la littérature	2
			9	46.2	4425	295	267,250,220,120	cFF	Comparaison avec des données de la littérature	2
		HyperCarb	1	44.4	256	227	199,182,171,154,98,86	cLL	Comparaison avec un standard	
			2	47.3	582	245	197	cLM	Comparaison avec des données de la littérature	2
						197	169,152,141,124,113,101,85			
			3	50.5	204	263	215	cMM	Comparaison avec des données de la littérature	2
						215	167,140,111			
			4	52.5	160	277	249,232,204,171,136,107,86	cYL	Comparaison avec un standard	
			5	56.4	8655	261	233,261,188,120,86	cFL	Comparaison avec des données de la littérature	2
			6	58.2	1740	279	231	cEM	Comparaison avec des données de la littérature	2

	BL21AI	dC18	1	27.7	511	231 295 247	203,186,158,130,120,91 247 219,202,191,174,146,113,85	cYM	Comparaison avec des données de la littérature	4
			3	28.4	353	327	299,282,254,221,136,119	cYY	Comparaison avec des données de la littérature	2
			4	31.2	849	277	249,232,204,171,136,107,86	cYL	Comparaison avec un standard	
			5	34.2	176	263 215 167	215 167 139,110,84	cMM	Comparaison avec des données de la littérature	2
			6	37.6	4912	311	283,266,238,205,136,120	cYF	Comparaison avec des données de la littérature	2
			7	38.9	628	245 197	197 169,152,141,124,113,85	cLM	Comparaison avec des données de la littérature	2
			8	39.9	2593	279 231	231 203,186,158,130,120,91	cFM	Comparaison avec des données de la littérature	2
			9	43.6	366	227	199,182,171,154,98,86	cLL	Comparaison avec un standard	
			10	44.6	11407	261	233,261,188,120,86	cFL	Comparaison avec des données de la littérature	2
			11	47.1	2412	295	267,250,220,120	cFF	Comparaison avec des données de la littérature	2
		HyperCarb	1	44.8	222	227	199,182,171,154,98,86	cLL	Comparaison avec un standard	
			2	47.5	648	245 197	197 169,152,141,124,113,101,85	cLM	Comparaison avec des données de la littérature	2
			3	50.5	unresolved	263 215	215 167	cMM	Comparaison avec des données de la littérature	2
			4	56	11711 ^b	261	233,216,188,120,86	cFL	Comparaison avec des données de la littérature	2
			5	58.5	1926	279 231	231 203,186,175,158,130,113,91,84	cFM	Comparaison avec des données de la littérature	2
42	M15-pREP4	dC18	1	46	5535	373	356,256,242,214,187,170,130	cWW	Comparaison avec des données de la littérature	3
	BL21AI	dC18	1	46.6	14628	373	356,328,256,242,214,187,169,130,115	cWW	Comparaison avec des données de la littérature	3
43	M15-pREP4	dC18	1	15.7	Détection en EIC	201 183	183 155 155,127,110,84	cEA	Comparaison avec un standard	
	BL21AI	dC18	1	15.7	5346	201 183	183 155 155,127,110,84	cEA	Comparaison avec un standard	
		HyperCarb	1	25.4	5342	201 183 155	183 155 155,127,110,84 127,110,99,84	cEA	Comparaison avec un standard	
44	M15-pREP4	dC18	1	27.7	6869	243 225	225 197,141,129,113,86,84	cLE	HMRS et analyse en composition d'acides aminés	
			2	29	Détection en EIC	277 259	259 231,203,186,120	cFE	Comparaison avec un standard	
		HyperCarb	1	36.8	8066	243 225	225 197,141,129,113,86,84	cLE	HMRS et analyse en composition d'acides aminés	
			2	46.6	Détection en EIC	277 259	259 231,203,186,120	cFE	Comparaison avec un standard	
	BL21AI-pREP4	dC18	1	27.7	5231	243 225	225 207,197,141,129,113,84	cLE	HMRS et analyse en composition d'acides aminés	
			2	29.1	Détection en EIC	277 259	259 231,203,186,120	cFE	Comparaison avec un standard	
		HyperCarb	1	36.6	3184	243 225	225 197,141,129,113,86	cLE	HMRS et analyse en composition d'acides aminés	
			2	46.6	Détection en EIC	277 259	259 231,203,186,120	cFE	Comparaison avec un standard	
45	M15-pREP4	no cyclodipeptide detected								
	BL21AI-pREP4	no cyclodipeptide detected								
46	M15-pREP4	no cyclodipeptide detected								
	BL21AI-pREP4	no cyclodipeptide detected								
47	M15-pREP4	dC18	1	46.6	16600	373	356,328,256,242,214,187,170,130	cWW	Comparaison avec des données de la littérature	3

48	M15-pREP4	dC18	1	39.2	14006	373	356,345,328,256,242,214,187,170,169,130	cWW	Comparaison avec des données de la littérature	3	
49	M15-pREP4	dC18	1	16.7	530	235	207,179,147,136,129,119,107	cYA	Comparaison avec un standard		
			2	21.2	Détection en EIC	295	247		cYM	Comparaison avec des données de la littérature	2
						247	219,202,191,174,163				
			3	22.2	11570	327	299,254,211,136		cYY	Comparaison avec des données de la littérature	2
			4	24.3	Détection en EIC	277	249,232,171,136,107		cYL	Comparaison avec un standard	
			5	30.9	490	311	283,248,238,205,136,120		cYF	Comparaison avec des données de la littérature	2
			6	31.1	Détection en EIC	350	333,305,170,136,132,130	cYW	Comparaison avec des données de la littérature	2	

Les CDPS ont été exprimées dans une, deux ou trois souches bactériennes en fonction de l'efficacité de transformation. Chaque expérience d'expression a été réalisée une fois.

Les surnageants de culture ont été analysés par LC-MS/MS sur des colonnes dC18 (Waters) et Hypercarb (ThermoFisher) : l'absence de données indique qu'aucun cyclodipeptide n'a été détecté.

cCC signifie que du cyclo(L-cystine) a été détecté dans le surnageant de culture bactérienne. Quand une CDPS synthétise du cCC, il est retrouvé sous forme oxydée, c'est-à-dire de cyclo(L-cystine) dans le surnageant.

t_R : temps de rétention obtenu avec le gradient 1

t_R (*italique*) : temps de rétention obtenu avec le gradient 2

^a d'autres m/z sont visibles dans le pic

^b pic élargi

^c pic non résolu, valeur estimée

¹ identification s'appuyant sur le temps de rétention et le m/z

² pas inclus sur la Figure XX car le cyclodipeptide est presque indétectable et non confirmé

Références

- Chen, Y.-H., Liou, S.-E. & Chen, C.-C. Two-step mass spectrometric approach for the identification of diketopiperazines in chicken essence. *Eur Food Research Technology* **218**, 589-597 (2004).
- Gondry, M. *et al.* Cyclodipeptide synthases are a family of tRNA-dependent peptide bond-forming enzymes. *Nat Chem Biol* **5**, 414-420 (2009).
- Giessen, T. W., von Tesmar, A. M. & Marahiel, M. A. A tRNA-Dependent Two-Enzyme Pathway for the Generation of Singly and Doubly Methylated Dityryptophan 2,5-Diketopiperazines. *Biochemistry* **52**, 4274-4283 (2013).
- Guo, Y. C., Cao, S. X., Zong, X. K., Liao, X. C. & Zhao, Y. F. ESI-MSn study on the fragmentation of protonated cyclic-dipeptides. *Spectrosc-Int J* **23**, 131-139 (2009).