

## Polymères et polypeptides : deux exemples de repliement induits par complexation

*R. Ballivian • F. Chirot • P. Dugourd • J. Lemoine • UMR 5180 LSA, et 5579 LASIM • Université Lyon 1-CNRS, Villeurbanne, France.  
J. De Winter • P. Gerbaux • P. Dubois • O. Coulembier • Mass Spectrometry Research Group, CISMa, and CIRMAP, Laboratory of Polymeric and Composite Materials • University of Mons, Mons, Belgium.  
E. Canon • P. Sarni-Manchado • UMR 1083 Sciences Pour l'Oenologie (SPO), INRA, Montpellier, France.*

La mobilité ionique couplée à la spectrométrie de masse permet une étude conformationnelle de systèmes moléculaires ou biomoléculaires en phase gazeuse. Elle est de plus en plus utilisée comme technique de séparation d'isomères et permet également de mettre en évidence des changements de conformation, par exemple liés à la complexation.

La mesure, par mobilité ionique, de la section efficace de diffusion des complexes étudiés peut en outre permettre de déterminer précisément leur conformation à travers la comparaison avec des structures calculées. Cette méthode repose cependant sur la capacité des calculs à proposer des structures réalistes, et devient donc d'autant plus difficile que la taille du système augmente. Néanmoins, dans le cas de complexes ne présentant pas de sites de liaison spécifiques, et dont la conformation ne peut être déterminée correctement en phase liquide, cette démarche apparaît comme une des seules alternatives envisageables.

Nous présenterons deux exemples originaux de systèmes relativement grands pour lesquels la mobilité ionique, couplée à des calculs de type gros-grain, permet non seulement de mettre en évidence des changements de conformation mais aussi de donner une image des mécanismes qui les induisent. Nous avons étudié d'une part, des polymères (polylactides) de différentes tailles cationisés par des alcalins, et d'autre part la complexation de tanins sur une protéine salivaire (IB5, 6.9kDa). Dans les deux cas, nous observons un effondrement lié à la complexation qui est qualitativement, voir quantitativement, bien reproduit par les modèles de calcul utilisés.