

Les protéines sont des molécules dont la structure est liée à leur fonction dans les organismes vivants. Cette thèse porte sur la caractérisation de cette structure et de sa dynamique et s'inscrit dans le développement de l'analyse par spectrométrie de masse en biologie structurale. La spectrométrie de masse couplée à des techniques de spectroscopie optique résolue en temps permet de mettre en lumière des mécanismes d'absorption, de relaxation et de transfert de charges photo-induits impliqués dans la dynamique conformationnelle et électronique de ces molécules biologiques. Ces approches expérimentales avec la combinaison de techniques de biologie moléculaire (expression, gel électrophorèse, dichroïsme circulaire, etc.) sont présentées en début de manuscrit. C'est par l'étude de l'activation photo-induite de chromophores utilisés pour l'analyse de la structure de protéines qu'a commencé ce travail de thèse. Les mécanismes d'absorption de photons et de relaxation non radiative de chromophores greffés sur des peptides ont été sondés. Nous avons ensuite sondé les mécanismes de transferts de charges photo-induits au sein de petits peptides afin de comprendre l'influence de la taille de ces systèmes et de la composition en acides aminés sur la dynamique conformationnelle de ces peptides. Ceci a nécessité le montage d'un dispositif pompe-sonde pour l'étude de la dynamique de transfert de charge. Enfin nous nous sommes intéressés à un processus de changement de conformation du peptide PUMA présent dans les organismes de mammifères en utilisant la spectrométrie de mobilité ionique comme sonde de conformation et de dynamique structurale.

Protein function in live organism is governed by its 3D structure. In this thesis we will focus on conformational and dynamics characterisation by mass spectrometry analysis developed for structural biology questions. Mass spectrometry coupled to time resolved optical spectroscopy set up highlights photon absorption, relaxation and photo-induced charge transfer mechanisms at the origin of biomolecules electronic and conformational dynamics. These experimental approaches combined with molecular biology techniques will be presented in this manuscript. This study starts with photo-induced activation of chromophores grafted peptides analysis used as a probe of protein structure. We probed photo-induced intramolecular charge transfer in order to look at the influence of the system size and amino acids composition on peptides conformational dynamics. A two color pump-probe set-up was designed for this study. Finally, we investigated conformational changes on mammalian PUMA peptide by ion mobility spectrometry.