La spectroscopie IR sélective en conformation de Ac-Ala-NH_2, une molécule privée de chromophore UV, a été obtenue par spectroscopie laser à double résonance IR / UV, en utilisant un marqueur UV (le toluène) non lié de façon covalente au peptide. Nous avons ainsi montré que le complexe Ac-Ala-NH_2 - toluène, détecté par un processus d'ionisation multiphotonique résonnante, est composé d'un peptide replié (C_7 conformation) lié à la molécule de toluène par une liaison NH - p. Les calculs de chimie quantique suggèrent que la structure de ce peptide complexé est très similaire à celle du peptide isolé, légitimant cette stratégie expérimentale pour étudier la structure peptidique. L'observation exclusive de peptides repliés, à l'encontre des mélanges de conformation C_5/C_7 observés par d'autres techniques, suggèrent que des changements conformationnels peuvent non seulement être induites par la complexation d'une seule molécule de solvant, même apolaire, et n'interagissant que faiblement comme le toluène.

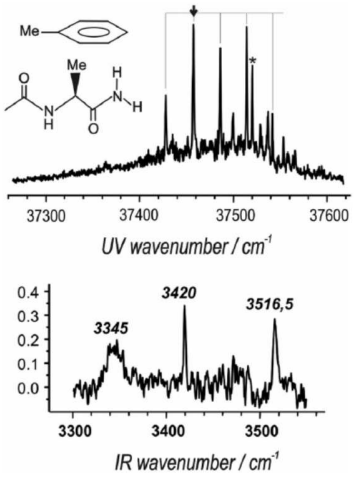

Fig. 1 *Upper panel* mass-selected (m/z = 131 amu) resonant multi-photon spectrum of a $AcAlaNH_2$/To mixture in the region of the first UV transition of toluene. Symbols (*arrow* and *asterisk*) indicate bands used for IR/UV double resonance spectroscopy (see text). *Lower panel* IR/UV double-resonance spectrum in the NH stretch region recorded by probing the ion signal with the transition at 37,457 cm^{-1} (*arrow* in the UV spectrum). Relative depletions, corresponding to IR absorptions, are displayed as positive bands

E. Gloaguen, B. Tardivel, M. Mons, Struc. Chem. 27, 225 (2016)