

# Spécialité de Master « Optique, Matière, Paris »

Stage de recherche (4 mois minimum, à partir de début mars)

## Proposition de stage

Date de la proposition : 25/10/2018

<b>Responsable du stage / internship supervisor:</b>			
Nom / name:	Brenner	Prénom/ first name :	Valérie
Tél :	+33(0)169083788	Fax :	+33(0)69081213
Courriel / mail:	valerie.brenner@cea.fr		
<b>Nom du Laboratoire / laboratory name:</b>			
Code d'identification :	UMR9222	Organisme :	CEA - CNRS
Site Internet / web site:	<a href="#">Equipe</a> , <a href="#">Laboratoire Interactions, Dynamiques et Lasers</a>		
Adresse / address:	DRF/IRAMIS/LIDYL, CEA Saclay, Bât 522, 91191 Gif sur Yvette		
Lieu du stage / internship place:	CEA Saclay		

### Titre du stage / internship title: Désactivation des états excités de modèles de protéines : simulations de dynamique non-adiabatique et méthodes *ab initio*.

#### Résumé / summary

Dans les protéines, les états excités peuplés par l'absorption UV bénéficient de mécanismes de désactivation d'importance majeure pour la photostabilité de ces espèces. Ces processus, souvent ultrarapides, offrent un moyen rapide et efficace de dissiper l'excitation électronique sous forme de vibration, évitant ainsi les réactions photochimiques conduisant généralement à des dommages structurels susceptibles d'affecter la fonction biologique du système. Notre connaissance de ces processus qui contrôlent la durée de vie de l'état excité peut être approfondie à travers une modélisation précise des surfaces d'énergie potentielle des états excités de modèles de ces systèmes. Une méthode performante pour cette modélisation est la méthode « Coupled Cluster » d'ordre 2 (CC2).<sup>1,2</sup> Cependant, cette méthode s'avère difficilement applicable à des systèmes de grande taille pour des raisons de temps de calculs et dans les simulations de dynamique non-adiabatique pour des problèmes de convergence. L'objectif principal de ce stage est donc de tester sur une série de peptides protégés les performances d'une méthode de chimie quantique alternative à cette méthode, la méthode ADC(2) (Algebraic Diagrammatic Construction through second order).<sup>3</sup> Ce sujet est en lien direct avec des expériences de spectroscopies menées dans l'équipe, expériences utilisant les récents développements des techniques expérimentales de spectroscopie en phase gazeuse.

#### Techniques ou méthodes utilisées / Specific techniques or methods

Au cours du stage, le candidat se formera aux méthodes de calculs d'états excités ainsi qu'à l'utilisation de logiciels de chimie quantique : Turbomole (Méthodes CC2 et ADC(2)) et NEWTON-X (Simulations de dynamique non-adiabatique).

#### Références / References

- [1] W. Y. Sohn, V. Brenner, E. Gloaguen and M. Mons, Local NH- $\pi$  interactions involving aromatic residues of proteins: influence of backbone conformation and  $\pi\pi^*$  excitation on the  $\pi$  H-bond strength, as revealed from studies of isolated model peptides. PCCP 2016, 18, 29969.
- [2] N. Ben Amor, S. Hoyau, D. Maynau and V. Brenner, Low-lying excited states of models proteins: Performances of the CC2 method versus MRCI methods. J. Chem. Phys 2018, 148, 184105.
- [3] (a) J. Schirmer, Beyond the random-phase approximation: a new approximation scheme for the polarization propagator. Physical Review A. 1982, 26, 2395. (b) A. B. Trofimov and J. Schirmer, An efficient polarization propagator approach to valence electron excitation spectra. Journal of Physics B. 1995, 28, 2299.

**Mots clés / Key words:** Calcul d'états excités, Méthodes « Coupled Cluster », Dynamique non-adiabatique

**Ce stage pourra-t-il se prolonger en thèse ? Possibility of a PhD ? :** Oui

**Si oui, financement de thèse envisagé/ financial support for the PhD:** Concours Ecole doctorale/CEA

Lumière, Matière, Interactions

Lasers, Optique, Matière