



Désactivation des états excités de modèles de protéines : simulations de dynamique non-adiabatique et méthodes ab initio

Spécialité Physique moléculaire

Niveau d'étude Bac+4/5

Formation Ingenieur/Master

Unité d'accueil [LIDYL/LUMO-SBM](#)

Candidature avant le 29/03/2019

Durée 4 mois

Poursuite possible en thèse oui

Contact [BRENNER Valerie](#)
+33 1 69 08 37 88
valerie.brenner@cea.fr

Résumé

Ce stage porte sur la caractérisation des mécanismes de désactivation d'états excités de modèles de protéines, des peptides protégés, et plus particulièrement, la détermination pour de tels systèmes des performances d'une méthode de chimie quantique dédiée au calcul des états excités.

Sujet détaillé

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).^{1,2} 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).³ 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.

[1] W. Y. Sohn, V. Brenner, E. Gloaguen and M. Mons, Local NH- π interactions involving aromatic residues of proteins: influence of backbone conformation and $\pi\pi^*$ excitation on the π H-bond strength, as revealed from studies of isolated model peptides. PCCP 2016, 18, 29969.

[2] N. Ben Amor, S. Hoyau, D. Maynaud 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

Calcul d'états excités, Méthodes « Coupled Cluster », Dynamique non-adiabatique

Compétences

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).

Logiciels

Station de travail locales et Supercalculateurs Nationaux

Excited states deactivation in model proteins chains: Non-adiabatic dynamics and ab initio methods

Summary

This internship focuses on the characterization of the deactivation excited states mechanisms in model proteins chains, capped peptides, and in particular, the determination of the performances for such systems of a quantum chemistry method dedicated to the excited states computation.

Full description

The proteins are endowed with mechanisms of excited-state deactivation following UV absorption. These mechanisms are of major importance for the photochemical stability of these species since they provide them a rapid and efficient way to dissipate the electronic energy in excess into vibration, thus avoiding photochemical processes to take place and then structural damages which affect the biological function of the system. In this context, an efficient modelling of the potential energy surfaces of excited states of model proteins should lead to better understanding the photophysical phenomena involved in the deactivation mechanisms. An efficient method for this modeling is the "Coupled Cluster" method of order 2 (CC2).^{1,2} However, this method is difficult to apply for large systems due to very long computation times and in non-adiabatic dynamics simulations for convergence problems. The main objective of this internship is then to test on a series of model proteins, capped peptides, the performances of an alternative quantum chemistry method to treat excited states, the ADC (2) method (Algebraic Diagrammatic Construction through Second Order).³ This theoretical work will be backed up by key gas phase experiments performed in the team, experiments using recent development of the spectroscopic techniques in gas phase.

[1] W. Y. Sohn, V. Brenner, E. Gloaguen and M. Mons, Local NH- π interactions involving aromatic residues of proteins: influence of backbone conformation and $\pi\pi^*$ excitation on the π 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.

Keywords

Excited states computation, Coupled Cluster methods, Non-adiabatic dynamics

Skills

During the course, the candidate will be trained in methods calculating excited states as well as to use quantum chemistry softwares: Turbomole (CC2 and ADC(2) methods) and NEWTON-X (Non-adiabatic dynamics).

Softwares

Station de travail locales et Supercalculateurs Nationaux