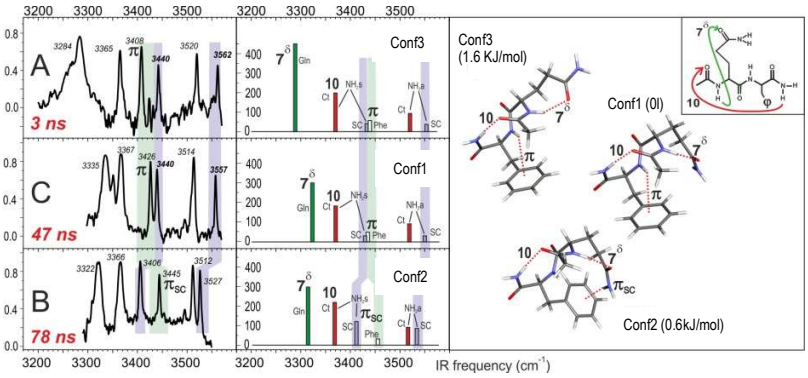
1- Les simulations de dynamique non-adiabatique réalisées sur le système NAPA-H_2O et les calculs de localisation d'intersections coniques ont permis d'identifier deux grands types de mécanismes de désactivation de l'état $\pi\pi^*$ différant par la liaison peptidique impliquée dans la première étape. Les uns impliquent la déformation de la liaison peptidique du groupe acétyle conduisant à un état excité $n\pi_{CO}^*$ localisé sur cette liaison alors que les autres impliquent celle de la liaison peptidique du groupement amide conduisant à un état excité $n\pi_{CO}^*$ localisé sur cette liaison. Par contre tous ces mécanismes présentent une barrière d'énergie faible pour la première étape (< 0.15 eV) et suggèrent donc une durée de vie sub-picoseconde, ce qui explique que cette durée de vie n'a pu être mesurée par des expériences pompe-sonde en régime nanoseconde.



2- La mesure des durées de vie des états excités du dipeptide Ac-Gln-Phe-NH_2 a mis en évidence des durées de vie pouvant différer d'un facteur 20 suivant le conformère (cf. figure). Ce dipeptide comporte deux groupements amides primaires ($CO-NH_2$), l'un sur la chaine latérale, l'autre en bout de chaine principale. Hors, on soupçonne ce groupement d'être à l'origine d'un abaissement notable de la durée de vie du conformère B de NAPA par couplage entre le phényl excité de Phe et cet amide primaire qui joue le rôle d'accepteur d'excitation. Les deux groupements amides du dipeptide sont donc en compétition pour la désactivation de l'excitation du phényl. Une série de simulations de dynamique non-adiabatique au niveau TDDFT ont donc été réalisées pour deux des conformères les plus stables de ce système (Conf1 et Conf3) afin de déterminer les coordonnées pertinentes des mécanismes de désactivation et notamment l'implication d'un ou des groupements amides. L'analyse des trajectoires et le calcul des profils énergétiques de ces mécanismes au niveau CC2 sont toujours en cours actuellement.