



université
PARIS-SACLAY

LIDYL

LABORATOIRE INTERACTIONS, DYNAMIQUES ET LASERS

LIDYL-UMR 9222

CEA, CNRS, Université Paris-Saclay

SEMINAIRE LIDYL

Roberto Improta^{1,2}

1 Istituto Biostrutture e Bioimmagini, Consiglio Nazionale delle Ricerche (Italy)

2 LIDYL, Groupe DICO

**Le Vendredi 29 Septembre 2017 à 11h00
- Bâtiment 522 - Salle 138**

"Modeling the photoactivated dynamics of multichromophore systems by Quantum mechanical calculations: the DNA as a test-case"

By discussing some of the results obtained in the theoretical study of the excited state behavior of DNA,[1] we highlight the potentialities of Quantum Mechanical calculations for the study of the processes triggered by the interaction between Light and soft materials, pointing out some of the open issues and of the challenges to be tackled, which are common to several others multichromophore systems. We provide examples concerning the calculation of spectra (absorption, emission, IR, ECD) in systems of different size from a small molecule (including radical species)[2-5] up to fairly long DNA fragments [6-12] and show that calculations can provide very useful insights on processes occurring on multiple time-scale, from < 100 fs up to several milliseconds. On this ground we can give a quick glimpse on the complex photoactivated dynamics of DNA.

References

- [1] R. Improta et al. Chem. Rev. 2016, 116, 3540-3593
- [2] L. Martinez Fernandez et al, J. Chem. Theory. Comp.2016, 12 , 4430.
- [3] L. Martinez Fernandez et al. J. Am. Chem. Soc. 2017, 139, 7780.
- [4] AJ Pepino et al. J. Phys. Chem. Lett. 2017, 8, 1777-1783.
- [5] Y. Zhang, et al. Proc. Nat. Acad. Sci. U.S.A. 2014, 111, 11612.
- [6] A. Banyasz, et al. J. Phys. Chem. Lett. 2016, 7, 2020
- [7] L. Martinez Fernandez et al., Phys. Chem. Chem. Phys. 2016, 18, 21241
- [8] Huix-Rotllant, M. et al. J. Phys. Chem. Lett. 2015, 6, 2247
- [9] Y. Zhang, et al. J. Am. Chem. Soc. 2015, 137, 7059.
- [10] I. Vayà et al, Chem. Eur. J. 2016, 22, 4904.
- [11] A.Banyasz, et al. J. Am. Chem. Soc. 2017, 139, 10561.
- [12] I. Conti et al. Chem. Eur. J 2017, in press

Formalités d'entrée :

Visiteur U.E. : Se faire connaître au moins 48 heures à l'avance pour l'établissement de votre autorisation d'entrée sur le Centre de Saclay.

Visiteur hors U.E. : Se faire connaître au moins 4 jours à l'avance pour les formalités d'entrée et se faire accompagner par un agent CEA.

Sans autorisation, vous ne pourrez entrer sur le Centre de Saclay. Tél. : 33.1.69.08.74 09- Fax : 33. 1.69.08.76.39 - email : caroline.lebe@cea.fr ou veronique.gerecny@cea.fr
Dans TOUS LES CAS, se munir d'une pièce d'identité (passeport et carte d'identité - pas de permis de conduire)