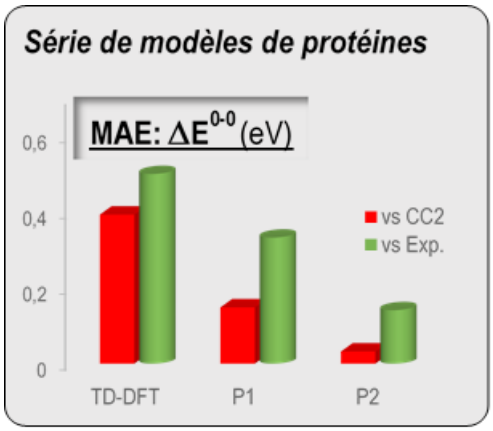
322 - Novembre-Décembre 2022

BRÈVES DE L'IRAMIS

Etats excités de modèles de protéines : performances de la TD-DFT

Valérie Brenner : tél : 01.69.08.37.88, valerie.brenner@cea.fr

Comprendre la dynamique électronique de systèmes d'intérêt biologique suite à une absorption lumineuse nécessite de modéliser et d'explorer les surfaces d'énergie potentielle (SEPs) de leurs états excités de plus basse énergie. Le but est de localiser sur ces SEPs les intersections coniques, et d'identifier les coordonnées pertinentes des mécanismes de désactivation non-radiatifs. Ces mécanismes représentent une étape clé dans la compréhension des propriétés photophysiques et/ou photochimiques de ces systèmes. Au vu des spécificités de ces systèmes (taille moyenne, flexibilité, non-symétrie et états excités de nature très différentes), l'étude de leurs états excités est un défi théorique car il faut décrire ces états simultanément et de manière équilibrée. Nous avons donc développé une stratégie originale " multi-échelle" qui consiste, dans un premier temps, à effectuer des simulations de dynamique non-adiabatique dans le cadre de la théorie de la fonctionnelle de la densité dépendante du temps (TD-DFT) afin d'identifier les coordonnées pertinentes des mécanismes. Cette étape est poursuivie par une modélisation efficace des SEPs par une approche de chimie quantique mono-référence plus précise, l'approche CC2 (méthode "Coupled Cluster" à l'ordre 2), dont la validation a été réalisée par une approche d'interaction de configuration multi-référence. C'est dans ce cadre que les performances de la TD-DFT, par rapport à CC2 et l'expérience, ont été évaluées (structures, énergies de transition adiabatiques et fréquences d'élongation NH) sur une série de modèles de protéines, des peptides protégés de taille et de nature différentes. Cette étude a révélé que la TD-DFT avec une fonctionnelle appropriée permettait d'obtenir un accord qualitatif dans la modélisation des SEPs. En revanche, un accord quantitatif par rapport à CC2 et l'expérience n'a été obtenu que grâce à des protocoles combinant TD-DFT et CC2. Ces protocoles constituent par ailleurs une alternative à CC2 pour les très grands systèmes, c'est-à-dire quand cette méthode n'est plus applicable à cause de temps de calcul prohibitifs.



Estimation des performances (énergies de transition adiabatiques) de la méthode TD-DFT et des protocoles mixtes TD-DFT/CC2 vs CC2 et l'expérience, sur une série de modèles de protéines.
P1 : Optimisation de géométrie DFT/TD-DFT - Calcul de fréquences DFT/TD-DFT
P2 : Optimisation de géométrie CC2 - Calcul de fréquences DFT/TD-DFT

Brèves des labos

Une école épicée

La première école de spintronique Paris-Saclay s'est tenue du 7 au 9 novembre 2022 dans le cadre du flagship SPiCY "SPin in nanosaClaY". Elle a eu lieu sur les sites des différents laboratoires partenaires du projet, Unité Mixte de Physique CNRS/Thales, C2N, LPS, Soleil et SPEC, où des visites étaient proposées après les cours. Cette école a rassemblé une petite centaine de participants de tous âges, dont une vingtaine d'étudiants en master, une trentaine de doctorants, des post-doctorants et les chercheurs du domaine.

Grégoire de Loubens (SPEC) et Romain Lebrun (Unité Mixte CNRS/Thales)

Une assistance nombreuse !

Hommage à notre collègue Patrick Baroni

C'est avec une grande tristesse que nous avons appris le décès de Patrick Baroni, survenu le jeudi matin 1er décembre à l'hopital d'Arpajon, des suites d'une maladie fulgurante.

Nous garderons de lui l'image d'un collègue jovial et travailleur, toujours prêt à aider ses collègues. Parmi ses réalisations les plus marquantes, on peut citer le détecteur de neutrons appelé Barotron qu'il a développé avec Laurence Noirez.

Nous n'oublierons pas non plus sa passion pour l'astronomie amateur au sein du club de l'AAC-CEA. Il nous avait invité en 2007 à suivre l'occultation de Vénus par la Lune, en 2015, l'observation d'une éclipse de soleil, puis le transit de Mercure devant le Soleil en 2016 et enfin une éclipse partielle de Lune en 2019.

L'ensemble de l'institut s'associe au personnel du LLB pour lui rendre hommage.