



## Relaxation électronique dans des biomolécules en phase gazeuse, une modélisation de la stabilité photochimique des constituants du vivant.

**Spécialité** Physique moléculaire

**Niveau d'étude** Bac+5

**Formation** Master 2

**Unité d'accueil**

**Candidature avant le** 31/03/2017

**Durée** 4 mois

**Poursuite possible en thèse** oui

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

### Résumé

Calcul des états excités de systèmes d'intérêt biologique - Détermination des mécanismes de relaxation - Dynamique non-adiabatique et méthode Coupled Cluster (CC).

### Sujet détaillé

De nombreux systèmes moléculaires complexes absorbent la lumière dans l'UV, certains d'extrême importance pour la biologie, comme les bases de l'ADN ou 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 l'étude en phase gazeuse de systèmes d'intérêt biologique modèles mimant des fragments des constituants du vivant comme par exemple, les peptides pour les protéines. La taille des systèmes, leur flexibilité, la présence de liaisons non-covalentes qui gouvernent les structures et la nature très diversifiée des états excités nécessitent d'avoir recours à des modèles théoriques sophistiqués pour une complète caractérisation des structures et la détermination des mécanismes de relaxation des premiers états excités. L'objectif principal de ce stage est donc de mettre au point une stratégie calculatoire faisant appel à des méthodes de chimie quantique sophistiquées permettant non seulement la caractérisation des premiers états excités de ces systèmes mais aussi une modélisation partielle des surfaces d'énergie potentielle de ces états afin d'en appréhender la dynamique électronique. Enfin, il est en relation directe avec des expériences de spectroscopies menées dans l'équipe, expériences utilisant les récents développements des techniques expérimentales de spectroscopie en phase gazeuse.

### Mots clés

---

Modélisation, Chimie Physique

**Compétences**

Chimie Quantique Simulation numérique - Station de travail et/ou supercalculateur.

**Logiciels**

Logiciels de Chimie quantique (TURBOMOLE, GAUSSIAN) Logiciels de visualisation.

---

## **Electronic relaxation in gas phase bio-relevant systems: toward a modeling of photochemical stability of life.**

### **Summary**

Computational study of excited states of bio-relevant systems - Ab initio investigations of the nonradiative relaxation mechanisms - Non-adiabatic dynamics and size-extensive Coupled Cluster (CC) methods.

### **Full description**

Many complex molecular systems absorbing light in the near UV spectral range, including those of paramount biological importance, like DNA bases or 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, the study of gas phase bio-relevant systems such peptides as proteins building blocks should lead to better understanding the photophysical phenomena involved in the relaxation mechanisms of life components. The focus of this work concerns the implementation of a computational strategy to both characterize the first excited states and simulate their potential energy surfaces in order to determine the relaxation pathways. This theoretical research project contains then the development, evaluation and validation of modern quantum chemical methods dedicated to excited states. It will be backed up by key gas phase experiments performed in the two partner teams of this project, experiments using recent development of the spectroscopic techniques in gas phase.

### **Keywords**

Simulation, Physical Chemistry

### **Skills**

Quantum Chemistry Simulation - Local computer and/or supercomputer.

### **Softwares**

Logiciels de Chimie quantique (TURBOMOLE, GAUSSIAN) Logiciels de visualisation.