
Photoisomerization Dynamics of a Retinal Model

Julien Eng^{*†1} and Etienne Gindensperger¹

¹Laboratoire de Chimie Quantique (LCQ) – CNRS : UMR7177, université de Strasbourg – 1 rue Blaise Pascal BP 296 R8 67008 Strasbourg Cedex, France

Résumé

Le photoisomérisation impliquée dans la première étape du cycle de vision est la plus efficace trouvée dans la nature (200 fs et un rendement de 67% [1],[2]).

Cette photoisomérisation a lieu au travers d'une intersection conique qui agit comme un entonnoir ultra-rapide entre l'état électronique excité et l'état fondamental.

Afin de mieux comprendre ce processus quantique, nous nous intéresserons à l'étude d'un système minimal du rétinol : le cation penta-2,4-dièniminium (PSB3), et nous explorerons les surfaces d'énergie potentielle selon quelques dimensions nucléaires impliquées dans la photoisomérisation.

Notre étude met en évidence l'importance des mouvements hors du plan des hydrogènes de la double liaison siège de la photoisomérisation (mouvements HOOP [3],[4]), qui nous permettent d'atteindre l'intersection conique pour un angle de torsion inférieur à 90°. Ces mouvements modulent l'orientation des orbitales p des carbones de la liaison centrale de façon à ce qu'elles soient orthogonales à des angles de torsion différents de 90°.

R. A. Mathies, C. H. Brito Cruz, W. T. Pollard and C. V. Shank, *Science.*,1988, 240, 777-779

F. Lumento, V. Zanirato, S. Fusi, E. Busi, L. Latterini, F. Elisei, A. Sinicropi, T. Andruniow, N. Ferré, R. Basosi and M. Olivucci, *Angew. Chem.*,2007, 119, 418-424

I. Schapiro, M. Ryanzantsev, L. M. Frutos, N. Ferré, R. Lindh and M. Olivucci, *J. Am. Chem. Soc.*,2011, 133, 3354-3364

N. Klaffki, O. Weingart, M. Garavelli and E. Spohr, *Phys. Chem. Chem. Phys.*, 2012, 14, 14299-14305

Mots-Clés: Photoisomérisation, Dynamique Quantique, surfaces d'énergie potentielle, HOOP, rétinol, PSB3, Intersection conique

*Intervenant

†Auteur correspondant: eng@unistra.fr