
Comprendre les modulations de couleur dans les pigments visuels : une approche théorique sur des équivalents de rhodopsines.

Baptiste Demoulin^{*1}, Ivan Rivalta¹, élise Dumont¹, and Marco Garavelli^{†1}

¹Laboratoire de Chimie (LC) – CNRS : UMR5182, École Normale Supérieure (ENS) - Lyon – Ens de Lyon, Site Jacques Monod - 46 allée d'Italie - 69364 Lyon cedex 07, France

Résumé

Comprendre la photochimie et la photophysique de chromophores de type rétinale dans les protéines et en solution pourrait mener à des avancées significatives dans la conception d'appareils opto-électroniques de taille nanométrique efficaces. Nous employons ici un protocole QM/MM hybride, basé sur les niveaux de calculs CASSCF//CASPT2/AMBER pour étudier trois protéines modifiées par bio-ingénierie pour imiter le comportement d'un pigment visuel, la rhodopsine. Ces protéines lient un chromophore, le rétinale, via une base de Schiff protonée, malgré l'absence de contre-ion à proximité, et présentent des différences significatives quant à leur énergie d'absorption maximale, en fonction des mutations effectuées, selon leur proximité avec le site où est lié le rétinale. En combinant des méthodes multi-références *ab initio* et une description au niveau mécanique moléculaire de l'environnement, nous avons caractérisé divers effets, parmi lesquels les distorsions structurales du rétinale et l'hydrophobicité de la protéine, qui affectent l'excitation verticale du chromophore.

Mots-Clés: Rétinale, QM/MM, CASPT2, AMBER, opsin shift

^{*}Intervenant

[†]Auteur correspondant: marco.garavelli@ens-lyon.fr