

## Suivi de la dynamique et des changements structuraux de protéines par spectroscopie électronique ultra-rapide à deux dimensions

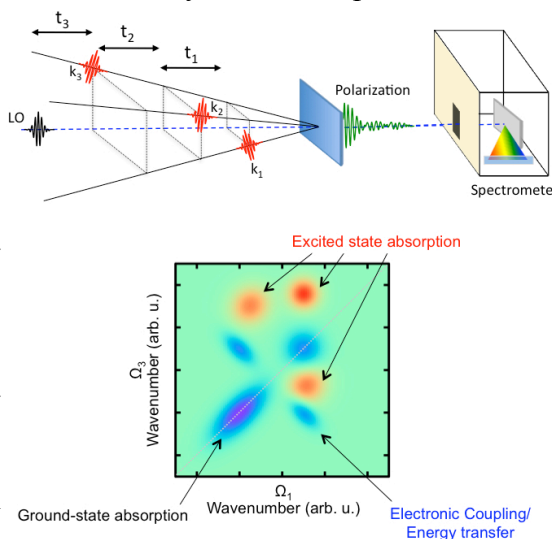
Ivan Rivalta<sup>‡†</sup>, Artur Nenov<sup>†</sup>, Shaul Mukamel<sup>#</sup>, Marco Garavelli<sup>†‡</sup>

<sup>‡</sup>Laboratoire de Chimie, École Normale Supérieure de Lyon, 46, allée d'Italie 69364 Lyon, France.

<sup>†</sup>Dipartimento di Chimica "G. Ciamician", Università di Bologna, V. F. Selmi 2, 40126 Bologna, Italy.

<sup>#</sup>Department of Chemistry, University of California, Irvine, California 92697-2025, USA.

La spectroscopie électronique à deux dimensions (two-dimensional electronic spectroscopy, 2DES), basée sur des pulsations laser ultra-rapides, est une technique de pointe pour le suivi des transitions électroniques dans des systèmes complexes, avec des résolutions temporelles et spectrales sans précédent.[1-4] La 2DES peut être utilisée pour étudier les transferts énergétiques, les changements de conformation et de structures, et la réactivité chimique dans toute une gamme de systèmes pour la chimie physique, les transferts d'énergie ou la biophysique.[2,5] L'interprétation de spectres électroniques 2D est un défi, et des techniques de modélisation sont nécessaires pour extraire l'information contenue dans la réponse non-linéaire des échantillons. Nous avons développé un outil informatique[6] qui peut être appliqué à la modélisation systématique de spectres 2DES de systèmes contenant plusieurs chromophores. Nous avons utilisé des méthodes multi-configurationnelles et des approches perturbatives pour calculer des façon fiable les propriétés électroniques de tels systèmes, dans un cadre hybride QM/MM, en conjonction avec des techniques de dynamique moléculaire pour évaluer les effets de l'environnement et de la conformation des chromophores sur l'aspect du spectre électronique 2D. Nous montrons une application de cette méthode à l'étude de la dynamique de repliement d'une protéine en solution[7], démontrant que la 2DES peut devenir un nouvel outil de diagnostique, complémentaire aux techniques éprouvées de RMN et de 2DIR.



[1] S. Mukamel *Annu. Rev. Phys. Chem.* **2000**, 51, 691-729.

[2] T. Brixner, J. Stenger, H. M. Vaswani, M. Cho, R. E. Blankenship, G. R. Fleming *Nature*. **2005**, 434, 625-628.

[3] M. H. Cho *Chem. Rev.* **2008**, 108, 1331-1418.

[4] B. A. West, A. M. Moran *J. Phys. Chem. Lett.* **2012**, 3, 2575-2581.

[5] N. S. Ginsberg, Y.-C. Cheng, G. R. Fleming *Acc. Chem. Res.* **2009**, 42, 1352-1363.

[6] I. Rivalta, A. Nenov, G. Cerullo, S. Mukamel, M. Garavelli *Int. J. Quantum Chem.* **2014**, 114, 85-93.

[7] A. Nenov, I. Rivalta, G. Cerullo, S. Mukamel, M. Garavelli *J. Phys. Chem. Lett.* **2014**, 5, 767-771.

[8] I. Rivalta, A. Nenov, O. Weingart, G. Cerullo, M. Garavelli, S. Mukamel *The Journal of Physical Chemistry B*. **2014**.