

SEMINAIRE ISMO

Dynamique et spectroscopie des systèmes moléculaires complexes

Cyril Falvo

IRSAMC, Université Paul Sabatier, Toulouse

La description de la dynamique femtoseconde dans les systèmes moléculaires complexes, en particulier en phase condensée, reste un défi majeur de la physique contemporaine ayant des implications importantes en chimie et en biologie. Dans ce contexte, la spectroscopie non-linéaire comme la spectroscopie pompe-sonde ou la spectroscopie bidimensionnelle sont des outils fondamentaux pour caractériser la dynamique vibrationnelle. Cependant, l'interprétation des spectres expérimentaux de ces systèmes est une tâche difficile et l'utilisation de simulations théoriques avancées est nécessaire. Au cours de cette présentation, nous allons aborder la problématique de la modélisation de la réponse infrarouge en utilisant une approche combinant dynamique quantique et dynamique classique. En particulier, nous détaillerons le cas de deux systèmes d'intérêt biologique: la protéine à repliement rapide «tête de villin» et l'hémoglobine.

* * * * *

Mardi 20 avril 2010 à 11 h 00
Amphi 1 - Bât 210 - 2^è étage
Université Paris-Sud 91405 ORSAY Cedex