

Efecto del disolvente sobre la desexcitación radiante y no radiante de estados excitados en moléculas de interés biológico

Researchers:

El grupo de investigación [QCAMM](#) [1] (Quantum Chemistry And Molecular Modelling) del Departamento de Ingeniería Química y Física de la [Universidad de Extremadura](#) [2] está compuesto por los siguientes investigadores:

- **Francisco Javier Olivares del Valle (Coordinador del grupo)**
- **Manuel Ángel Aguilar Espinosa**
- **José Carlos Corchado Martín-Romo**
- **María Luz Sánchez Mendoza**
- **María Elena Martín Navarro**
- **Ignacio Fernández Galván**
- **Aurora Muñoz Losa**
- **Francisco Fernández García-Prieto**

Language Undefined

Objectives:

- El principal objetivo del proyecto es el estudio teórico de la espectroscopia y evolución temporal de estados excitados. Más específicamente se pretende desarrollar un tratamiento teórico unificado que permita clarificar el papel que representa el disolvente en la desexcitación de estados excitados. Desde el punto de vista práctico se pretende abordar problemas de gran interés como son la explicación y predicción de los espectros de emisión (fluorescencia y fosforescencia) de moléculas en disolución o el efecto del disolvente sobre procesos fotoquímicos en moléculas de interés biológico: retinal, GFP, etc.

Methodology:

Empleo de cálculos teóricos mecanocuánticos de alto nivel (CASSCF, CASPT2, TD-DFT) en la descripción de estados excitados de moléculas de interés biológico. Para ello se requiere una caracterización de los distintos puntos críticos de las hipersuperficies de energía potencial de los estados excitados que intervengan en la fotofísica y fotoquímica de los cromóforos.

En una primera fase el objetivo es describir los cromóforos ya sea en fase gas o en presencia de disolventes polares y en situación de equilibrio, para en fases posteriores incluir el efecto de la proteína en la que se encuentra el cromóforo o estudiar la evolución temporal de los distintos estados electrónicos excitados.

Achieved objectives:

- Se han realizado estudios teóricos sobre el fenómeno de la doble fluorescencia en disolventes polares para dos compuestos afines, como son el 1-fenilpirrol y el fluoraceno. Los resultados en ambos casos indican que posiblemente la estructura responsable de la banda de fluorescencia de baja energía no presenta un giro importante entre los dos anillos, lo que apoyaría el modelo PICT (planar intramolecular charge transfer) frente al TICT (twisted intramolecular charge transfer).
- Se ha completado un estudio sobre los estados excitados de una molécula de interés biológico como el 11-cis-retinal. En este caso se sugiere que la complejidad en el espectro de fluorescencia observado experimentalmente procede de la presencia de dos estados electrónicos excitados de distinta naturaleza. Además, se ha demostrado que el la desexcitación no radiante a través de una intersección cónica (que da lugar a la isomerización) puede transcurrir sin apenas barrera energética, aunque la reorganización del disolvente necesaria hace que el proceso sea mucho más lento en disolución que en vacío.

Journals and conferences:

- M. Elena Martín, M. Luz Sánchez, José C. Corchado, Aurora Muñoz-Losa, Ignacio Fdez. Galván, Francisco J. Olivares del Valle, Manuel A. Aguilar: Theoretical study of the role of solvent Stark effect in electron transitions. *Theor. Chem. Acc.* 128 (2011) 783-793.
- Ignacio Fdez. Galván, M. Elena Martín, Aurora Muñoz-Losa, M. Luz Sánchez, Manuel A. Aguilar: Solvent Effects on the Structure and Spectroscopy of the Emitting States of 1-Phenylpyrrole. *J. Chem. Theory Comput.* 7 (2011) 1850-1857.
- Ignacio Fdez. Galván, M. Elena Martín, Aurora Muñoz-Losa, Manuel A. Aguilar: Dual Fluorescence of Fluorazene in Solution: A Computational Study. *J. Chem. Theory Comput.* 7 (2011) 3694-3701.
- Francisco F. García-Prieto, Ignacio Fdez. Galván, Manuel A. Aguilar, M. Elena Martín: Study on the Conformational Equilibrium of the Alanine Dipeptide in Water Solution by Using the Averaged Solvent Electrostatic Potential from Molecular Dynamics Methodology. *J. Chem. Phys.* 135 (2011) 194502(1-9).
- Aurora Muñoz-Losa, M. Elena Martín, Ignacio Fdez. Galván, M. Luz Sánchez Manuel A. Aguilar: Solvent Effects on the Radiative and Non-Radiative Decay of a Model of the Rhodopsin Chromophore. *J. Chem. Theory Comput.* (2011)
- WATOC 2011 (Ninth Triennial Congress of the World Association of Theoretical and Computational Chemists). Santiago de Compostela, 17-22 de julio de 2011. Presentación de 5 pósters.

Funding sources:

-
- [Ministerio de Ciencia e Innovación](#) [3]
 - [Vicepresidencia Segunda y Consejería de Economía, Comercio e Innovación](#) [4]

Source

URL:<https://web.computaex.es/en/proyectos/efecto-del-disolvente-sobre-desexcitacion-radiante-y-no-radiante-estados-excitados-en-mole>

Links

[1] <http://www.unex.es/unex/grupos/grupos/qcamm> [2] <http://www.unex.es> [3] <http://www.micinn.es/> [4] <http://eci.juntaextremadura.net/>