

# Fotoquímica y espectroscopia *in silico*: conectando teoría y experimento

Javier Segarra-Martí<sup>1,\*</sup>

<sup>1</sup>*Instituto de Ciencia Molecular, Universitat de Valencia, C/ Catedrático José Beltrán 2, 46980 Paterna, España*

\*javier.segarra@uv.es

La simulación de procesos moleculares en el estado electrónico excitado ha suscitado un gran interés debido a su papel central en procesos de relevancia biológica y nanotecnológica, como pueden ser las reacciones que dan lugar lesiones en el ADN o a los procesos de transferencia de energía y carga de gran interés para la tecnología fotovoltaica. Estas simulaciones han avanzado a pasos agigantados durante las últimas dos décadas, yendo de la caracterización de pequeñas superficies de energía potencial restringidas a un puñado de grados de libertad a dinámicas no adiabáticas resueltas en el tiempo y que incluyen todos los grados de libertad del sistema, y de representaciones espectroscópicas basadas en líneas discretas a la modelización de ensanchamientos espectrales que son comparables con el experimento.[1]

En este seminario se describen de forma breve diferentes modelos teóricos y cómo pueden ser usados éstos para simular los observables obtenidos en espectroscopia lineal y no lineal,[2,3] así como también de fotoelectrón. Como ejemplos se mostrará la caracterización de la fotofísica y fotoquímica de diferentes sistemas de ADN,[4] incluyendo tanto foto-excitación[4-6] como foto-ionización,[7,8] siendo éstos relevantes para entender cómo la fotoestabilidad de nuestro material genético contribuye a asegurar el proceso de replicación. Se analizarán también sistemas químicos basados en el grupo nitro, conocidos por ser grandes contaminantes en la combustión de carburantes y que están caracterizados por ser de los únicos sistemas orgánicos capaces de poblar estados electrónicos triplete en tiempos por debajo del picrosegundo ( $10^{-12}$  s), centrándose en los mecanismos moleculares que permiten dicho proceso y en su espectroscopia. Los diferentes modelos serán puestos en contexto dentro de su complejidad y coste, dando lugar a una serie de reglas generales que permitan su elección para diferentes problemas.

---

[1] J. Segarra-Martí et al., *Top. Curr. Chem.* 2018, 376, 24–72.

[2] O. Weingart et al., *J. Mol. Model.* 2018, 24, 1–30.

[3] J. Segarra-Martí et al., *Faraday Discuss.* 2020, 221, 219–244.

[4] A. J. Pepino et al., *J. Phys. Chem. Lett.* 2017, 8, 1777–1783.

[5] L. Martínez-Fernández et al., *J. Am. Chem. Soc.* 2017, 139, 7780–7791.

[6] A. J. Pepino et al., *Phys. Chem. Chem. Phys.* 2018, 20, 6877–6890.

[7] J. Segarra-Martí et al., *Phys. Chem. Chem. Phys.* 2019, 21, 14322–14330.

[8] J. Segarra-Martí et al., *ChemPhotoChem* 2019, 3, 856–865.