

“Influència de l’entorn sobre les transferències protòniques en sistemes en estat excitat. Estudi de llur reactivitat fotoinduïda.” Ricard Casadesús Castro

RESUM TESI DOCTORAL

En aquesta tesi doctoral s’han desenvolupat diversos estudis teòrics centrats en les transferències protòniques fotoinduïdes (PIPT, *PhotoInduced Proton Transfer*), estudiant-les, fonamentalment, en estats electrònics excitats, un tema de gran debat actualment en el camp dels càlculs quàntics electrònics.

En general, s’ha aprofundit en el coneixement dels factors que governen les reaccions químiques per entendre les bases teòriques amb l’objectiu de poder controlar els processos químics coneguts i dissenyar-ne de nous. En aquest sentit, aquest estudi pretén, justament, demostrar l’efecte de l’entorn sobre les reaccions de transferència protònica intra i intermolecular en estats electrònics excitats.

La possibilitat d’estudiar aquest tipus de reaccions obre la porta al disseny d’entorns supramoleculars que afavoreixin o dificultin aquestes transferències d’hidrogen. Dites reaccions formen part de quasi qualsevol procés químic complex, incloent quasi tots els cicles biològics. Això explica el gran interès que han atret en els últims anys.

S’ha realitzat també un estudi teòric de l’efecte cinètic d’isòtop (KIE, *Kinetic Isotope Effect*) a l’estat excitat mitjançant la deuteració d’alguns protons, calculant les respectives constants de velocitat a partir de la teoria microcanònica de l’estat de transició, prèvia elaboració d’un programa informàtic.

ABSTRACT DOCTORAL THESIS

In this doctoral thesis different theoretical studies on photoinduced proton-transfer reactions (PIPT) have been done. PIPT implies to study electronic excited states, what is nowadays a topic on the electronic quantum chemistry field.

We focussed on the factors which drive the chemical reactions in order to understand the theoretical bases that control the known chemical processes and to design in a future new ones. In this sense, the aim of our research is to show the effect of the environment on the intra and intermolecular proton-transfer reactions in electronic excited states.

Studying this kind of reactions allows to design supramolecular environments that make favorable or difficult these hydrogen transfers. These reactions take place in almost all complex chemical processes, included nearly all the biological cycles. This explains the great interest that they provoked in the last years.

It has also been done a theoretical study of kinetic isotope effect (KIE) in the excited state, changing some protium by deuterium atoms and calculating the corresponding rate constants by microcanonical transition state theory with a program performed previously.