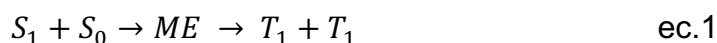


IMPORTANCIA DEL USO DEL FORMALISMORAS-2SF EN LA DESCRIPCIÓN DEL MECANISMO DE FISIÓN DE SINGULETES

María Eugenia Sandoval Salinas¹, Gustavo Israel Mondragón Solorzano¹, Joaquín Barroso Flores¹

¹Centro Conjunto de Investigación en Química Sustentable UAEM-UNAM, Carretera Toluca-Atlacomulco Km 14.5, Unidad San Cayetano, Toluca, Estado de México, C.P. 50200; México
e-mail: me.sandoval@comunidad.unam.mx

Previamente, hemos encontrado que las bacterioclorofilas-a, BChl-a, en el complejo FMO cumplen con la condición energética para realizar la fisión de singuletes (ec. 1), que si bien es necesaria no es suficiente. También, es importante describir todos los estados que participan en el proceso, siendo $^1(T_1T_1)$ el más importante¹. Debido a que DFT no puede reproducir dicho estado se efectuaron cálculos RAS-2SF², donde se promueven electrones con spin a de orbitales ocupados o semiocupados a orbitales disponibles donde tendrán spin b. Además, utilizamos las aproximaciones C-DFT y TD-DFT.



Dado que en sistemas fotosintéticos como los β -carotenos³ se ha observado la SF hemos decidido explorar la posibilidad de que los sistemas de BChl, naturales y artificiales, la realicen. Como sistemas de estudio usamos 6 dímeros de BChl-a artificiales y los presentes en el complejo FMO⁴. Así como, los dímeros de BChl-d del clorosoma de la *bchQRU C. tepidium* mutante⁵.

Referencias:

- (1) Smith, M. B.; Michl, J. *Chem. Rev.* **2010**, *110* (11), 6891–6936.
- (2) Casanova, D.; Head-Gordon, M. *Phys. Chem. Chem. Phys.* **2009**, *11* (42), 9779–9790.
- (3) Liebel, M.; Schnedermann, C.; Kukura, P. *Phys. Rev. Lett.* **2014**, *112* (19), 1–5.
- (4) Olson, J. M. *Photosynth. Res.* **2004**, *80*, 181–187.
- (5) Ganapathy, S.; Oostergetel, G. T.; Wawrzyniak, P. K.; Reus, M.; Gomez Maqueo Chew, A.; Buda, F.; Boekema, E. J.; Bryant, D. A.; Holzwarth, A. R.; de Groot, H. J. M. *Proc. Natl. Acad. Sci.* **2009**, *106* (21), 8525–8530.