

Projecte per beques d'estiu 2019

Dades del projecte:

Títol:	Estabilitat i propietats fotofísiques de metal·loporfirines i anàlegs
Supervisor:	Dr. Lluís Blancafort
E-mail supervisor:	lluis.blancafort@udg.edu
Grup de recerca:	QTMEM
Destinat a estudiants:	3r i 4rt any
Lloc de treball:	Fac. Ciències
Places ofertes:	1 (3r any) i 1 (4rt any)
Data d'inici:	als voltants del 01/06/2019 (a concretar amb l'estudiant)
Data d'acabament:	als voltants del 30/07/2019 (a concretar amb l'estudiant)
Seguiment:	Diari

Coneixements específics que ha de tenir l'estudiant:

Assignatures química física: espectroscòpia, cinètica

Estudis en curs requerits: química

Formació que adquirirà l'estudiant en realitzar aquesta activitat:

- Estudiar un problema bioquímic a nivell fonamental amb eines de la química computacional
- Programa Gaussian (química quàntica)

Descripció de l'activitat que ha de fer l'estudiant:

Contribuir al disseny de nous fotosensibilitzadors amb activitat potencialment anticancerígena mitjançant:

- Càlculs de l'estabilitat dels fotosensibilitzadors
- Modelització de les seves propietats fotofísiques

Bibliografia

- "Computational Study of Absorption Spectra of Eumelanin Constituents: Key Role of Oxidized Species in the Red Edge Absorption" Casademont, A.; Riesco, G.; Blancafort, L. *ChemRxiv* **2019**, <http://doi.org/10.26434/chemrxiv.7834907.v1>