

PROPIEDADES FOTOFÍSICAS Y FOTOQUÍMICAS DE ALCALOIDES DE ORIGEN NATURAL DENOMINADOS γ -CARBOLINAS. APLICACIÓN DE MÉTODOS QUIMIOMÉTRICOS PARA EL ANÁLISIS DE RESULTADOS ESPECTROSCÓPICOS

Rasse Suriani Federico A. O.

García Einschlag Fernando S. (Dir.), Erra-Balsells Rosa (Codir.)

Instituto de Investigaciones Físicoquímicas Teóricas y Aplicadas (INIFTA), Facultad de Ciencias Exactas, UNLP-CONICET.

federasse@inifta.unlp.edu.ar

PALABRAS CLAVE: Métodos Quimiométricos, Espectroscopías, γ -carbolidas

Propiedades fotofísicas y fotoquímicas de alcaloides de origen natural

denominados γ -carbolidas. Aplicación de métodos quimiométricos para el análisis de resultados espectroscópicos.

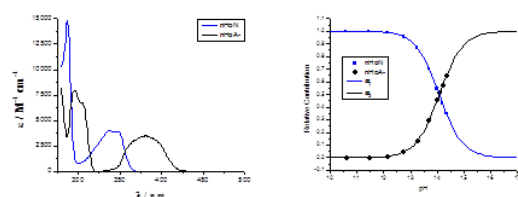


Figura 1. Contribución relativa vs pH (derecha) y absorptividad molar optimizada (izquierda) de las especies deconvolucionadas presentes en el equilibrio de disociación ácida (K_a) del nitrógeno indólico (N-9) de nHo, obtenido por la metodología de modelado MCR-ALS híbrida (duro blando).

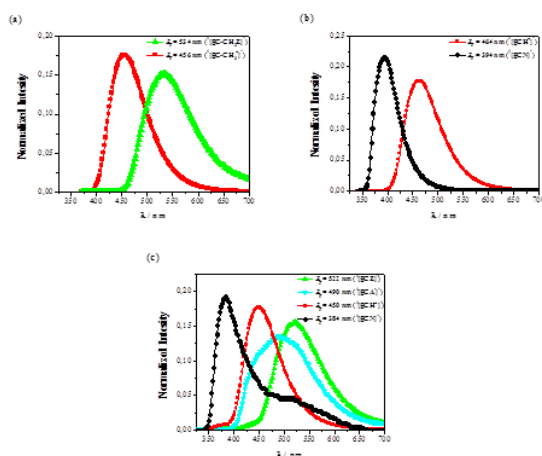
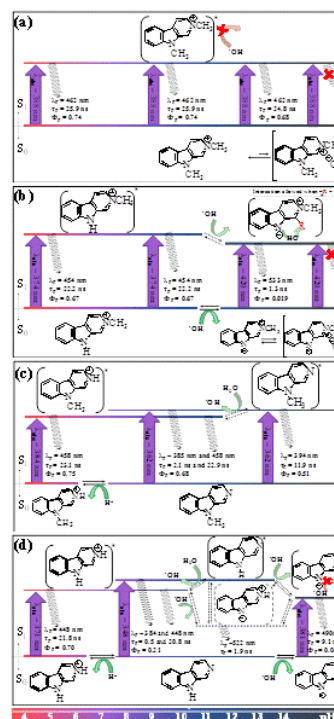


Figura 2. Intensidad de emisión de fluorescencia normalizada de los espectros obtenidos con el análisis paralelo de factores (PARAFAC) de la titulación ácido-base de una solución acuosa alcalina de: (a) 2-Ma-nHo, (b) 9-Ma-nHo, y (c) nHo.



Esquema 1. Estructuras moleculares, equilibrios ácido-base y principales propiedades fotofísicas de las distintas especies presentes en solución acuosa en función del pH de (a) 2,9-diMa-nHo (b) 2-Ma-nHo (c) 9-Ma-nHo y (d) nHo. Las flechas verdes y rojas hacen mención, respectivamente, a procesos relevantes o insignificantes para cada especie en cada condición de pH. Las flechas negras sólidas y punteadas señalan los procesos o equilibrios que tienen lugar en el estado fundamental (S_0) y en el primer estado de excitación electrónica (S_1), respectivamente.

ESTUDIO TEÓRICO Y EXPERIMENTAL DE MATERIALES ACTIVOS PARA BATERÍAS DE ION-LITIO Recupero Francisco

Visintin Arnaldo (Dir.), Thomas, Jorge Enrique (Codir.)

Instituto de Investigaciones Físicoquímicas Teóricas y Aplicadas (INIFTA), Facultad de Ciencias Exactas, UNLP-CONICET.

francisco.recupero@hotmail.com

PALABRAS CLAVE: Electroquímica, DFT, Modelado.

El plan de tesis consiste en sintetizar nuevos materiales activos (catódicos y anódicos) y desarrollar modelos teóricos de distinto nivel (en el

comienzo, DFT, posteriormente puede incluir dinámica molecular, Monte Carlo, etc.) para estudiar el comportamiento.