



Institut Ruđer Bošković

CXVII. Kolokvij Zavoda za organsku kemiju i biokemiju i  
Sekcije za organsku kemiju Hrvatskog kemijskog društva



**Dipl. ing. Momir Mališ**  
Zavod za fizičku kemiju  
Institut Ruđer Bošković  
e-mail: Momir.Malis@irb.hr

ponedjeljak, 25. 05. 2015.  
predavaonica III. krila IRB  
14:30-16:30 sati

## NERADIJATIVNI DEAKTIVACIJSKI MEHANIZMI ELEKTRONSKI POBUĐENOG FENILALANINA U MODELNIM PEPTIDIMA

Provedeno je sustavno istraživanje neradijativnih deaktivacijskih mehanizama odgovornih za eksperimentalno opaženu konformacijsku ovisnost vremena života vibracijski osnovnog pobuđenog fenilnog  $^1\pi\pi^*$  elektronskog stanja u tri konformera *N*-acetilfenilalanilamida. Simulacije metodom neadijabatske molekulske dinamike, s preskokom među plohama elektronske potencijalne energije dobivenih vremenski ovisnom teorijom funkcionala gustoće, ukazale su na nekoliko mehanizama prijenosa ekscitacije iz  $^1\pi\pi^*$  u  $^1n\pi^*$  stanja locirana na pojedinim amidnim grupama. Pronađeni mehanizmi potom su utočnjeni pripadajućim vrijednostima energijama barijera koničnih presjecišta dobivenih iz reakcijskih puteva izračunatim na razini teorije spregnutih grozdova (CC2). Konačno, iz poluklasičnog razmatranja dostupnosti koničnog presjecišta samo na temelju nuklearne vibracijske energije nulte točke te iz povećanja rigidnosti druge peptidne skupine naspram njene deformacije usljed metilacije, određeno je kako je klasično dostupan dio šava koničnog presjecišta za prijenos populacije u  $^1n\pi^*$  stanje druge peptidne skupine najveći u konformeru s najkraćim vremenom života pobuđenog  $^1\pi\pi^*$  stanja.