

Quantum Chemistry and Molecular Modeling

Researchers:

- [Francisco J. Olivares del Valle](#) [1]. Grupo de investigación [Quantum Chemistry And Molecular Modelling](#) [2] de la [Universidad de Extremadura](#) [3].

Language Undefined

Objectives:

- Estudio cuántico de las interacciones moleculares, fenómenos y procesos reactivos y no reactivos en fase condensada, tránsitos electrónicos y espectroscopía molecular, procesos de interés biofísico y bioquímico.
- Modelización y simulación molecular.

Methodology:

- Metodología y aplicaciones de la Mecánica Cuántica al estudio de procesos moleculares interactivos, sin y con absorción de radiación electromagnética.
- Química Cuántica y Química Computacional.
- Elaboración y desarrollo de códigos y programas computacionales.

Journals and conferences:

- THEORETICAL STUDY OF THE ROLE OF SOLVENT STARK EFFECT IN ELECTRON TRANSITIONS (Theoretical Chemistry Accounts, 128(4-6), 783-793 (2011)).
- ON THE ABSORPTION PROPERTIES OF THE EXCITED STATES OF DMABN (Chemical Physics Letters, 499(1-3), 100-102 (2010)).
- QUANTUM MECHANICAL APPROACH TO SOLVENT EFFECTS ON THE OPTICAL PROPERTIES OF METAL NANOPARTICLES AND THEIR EFFICIENCY AS EXCITATION ENERGY TRANSFER ACCEPTORS (Journal of Physical Chemistry C; 114(3), 1553-1561 (2010))
- THEORETICAL STUDY OF THE COMPETITION BETWEEN INTRAMOLECULAR HYDROGEN BONDS AND SOLVATION IN THE CYS-ASN-SER TRIPEPTIDE (Journal of Physical Chemistry B, 114(27), 8961-8970 (2010)).

Funding sources:

- [Ministerio de Educación y Ciencia](#) [4].
- [Junta de Extremadura](#) [5].

Source URL: <https://www.cenits.es/en/proyectos/quantum-chemistry-and-molecular-modeling>

Links

- [1] http://www.unex.es/investigacion/grupos/qcamm/estructura/personal/pagina_personal?listado_lineas=1&idpersonal=977
[2] <http://www.unex.es/investigacion/grupos/qcamm>
[3] <http://www.unex.es>
[4] <http://www.educacion.gob.es/portada.html>
[5] <http://www.juntaex.es/juntaex/>