

7.1 Instrumentación y experimental

7.1.1 Instrumentación

Los *puntos de fusión* se han medido en un Gallenkamp.

Los *espectros de IR* se han llevado a cabo en un espectrofotómetro Perkin Elmer 1600FT en suspensión de Nujol o pastilla de KBr. Las vibraciones se expresan en número de ondas (cm^{-1}).

Los *espectros de resonancia magnética nuclear* se han registrado en un Bruker AV-300, a 300 MHz para ^1H -RMN y a 75 MHz para ^{13}C -RMN, o en un Bruker ARX-300, a 300 MHz para ^1H -RMN y a 75 MHz para ^{13}C -RMN; o en un Bruker AV-400, a 400 MHz para ^1H -RMN y a 100 MHz para ^{13}C -RMN.

Los *espectros MALDI⁺* se registraron en un Bruker MicroFlex que utiliza un láser de nitrógeno (3,68 eV) empleando ditranol (1,8,9-antracenotriol) como matriz y operando el analizador en modo reflector o lineal.

Los *espectros de HRMS-ESI⁺* se registraron en un Bruker MicroTOF-Q, usando formiato de sodio como referencia externa.

Los *espectros ESI⁺ de baja resolución* se registraron en un esquire 3000⁺.

La purificación de los productos finales por *cromatografía en columna* se ha llevado a cabo empleando una bomba de media presión, modelo Buchi C-605 con controlador C-615 y columnas Omnifit de diferentes diámetros.

Los *espectros de absorción UV-visible* se han realizado en un espectrofotómetro UNICAM UV4. Los resultados se expresan en nm.

Los *espectros de Voltametría de Pulso Diferencial* se han llevado a cabo en un potenciostato μ -Autolab ECO-Chemie, utilizando como electrodo de trabajo uno de grafito, electrodo de referencia Ag/AgCl y un electrodo de platino como contraelectrodo. La medida de las *curvas J/V* de las celdas y de la *eficiencia* se llevó a cabo utilizando un simulador solar (Abet Technologies model 10500) equipado con una lámpara de xenón de 150W. La intensidad de la iluminación se ajustó a 100mW cm^{-2} con una celda de referencia de silicio calibrada (por ReRa) equipada con un filtro KG5. El potencial aplicado y la corriente de la celda se midió utilizando un potenciostato digital Keithley 2401. El IPCE (incident photon to current conversion efficiency) se midió empleando un

equipo artesanal consistente en una lámpara de xenón de 150W, un monocromador motorizado Cornerstone 130 (Oriel) y un potencióstato digital Keithley 2401.

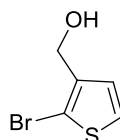
Los *ánodos* ($\approx 4 \mu\text{m}$ de espesor) fueron fabricados mediante “screen printing” con pasta de TiO_2 (Dyesol 18NR-AO, GIT screen) en un sustrato de vidrio conductor de óxido de estaño dopado con flúor (FTO, con $15 \Omega \text{ sq}^{-1}$ de resistividad).

Previo a la deposición de la pasta del TiO_2 , los sustratos de vidrio conductor fueron sumergidos en una disolución de TiCl_4 (40 mM) a 90°C durante 30 minutos y secados posteriormente. Los electrodos de TiO_2 fueron gradualmente calentados a 325°C durante 5 min, 375°C durante 5 min, 450°C durante 15 min y 500°C durante 15 min. Los electrodos calentados se sumergieron nuevamente en una disolución de TiCl_4 a 90°C durante 30 min y lavados posteriormente con etanol. Los electrodos se calentaron nuevamente a 500°C durante 30 min y enfriados antes de la adsorción del colorante. El área activa del dispositivo fue de 0.25cm^2 . El contraelectrodo fue hecho mediante “screen printing” de una pasta de platino PT1 Dyesol sobre un sustrato de vidrio conductor (FTO, con $7 \Omega \text{ sq}^{-1}$ de resistividad) donde se realizó un pequeño orificio para permitir la introducción del electrolito líquido empleando vacío, seguido de un calentamiento a 390°C durante 15 min.

Los electrodos de titanio fueron sensibilizados en disoluciones 0.1mM de colorante en diclorometano durante 5 y 24 horas a temperatura ambiente. Los electrodos sensibilizados fueron lavados con diclorometano y secados con aire. Finalmente, el electrodo de trabajo y el contraelectrodo se unieron utilizando una lámina de termoplástico (Meltonix 1170-60, by Solaronix) como agente sellante que funde a 100°C . El electrolito empleado fue LP1 (0.53M yoduro de 1-butil-3-metilimidazolio (BMII), 0.1 M yoduro de litio, 0.05 M Iodo and 0.52 M *terc*-butilpiridina en acetonitrilo anhidro).

7.2 Experimental

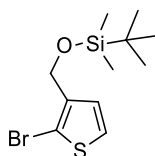
(2-bromotiofen-3-il) metanol (1)



Sobre una disolución de 1,7 mL (18,4 mmol) de 3-tiofenmetanol en 40 mL de THF se añaden 2,5 mL de H₂O y a continuación 3,76 g (21,2 mmol) de *N*-bromosuccinimida. Se deja reaccionar con agitación durante 1h a temperatura ambiente. Transcurrido este tiempo se evapora el disolvente en el rotavapor y el residuo se redissuelve en AcOEt y se lava con una disolución saturada de NaCl y con H₂O. La fase orgánica resultante se seca con sulfato de magnesio anhidro, se filtra y se evapora el disolvente a presión reducida. El residuo se purifica mediante cromatografía en columna de silicagel empleando como eluyente hexano/AcOEt (85:15). Se obtienen 1,52 g de un aceite amarillo. (**Rdto: 42%**)

Peso molecular (g/mol): 193,06 **¹H-RMN** (300 MHz, CDCl₃) δ (ppm): 4,64 (s, 2H), 7,03 (d, *J*=5,6 Hz, 1H), 7,27 (d, *J*=5,6 Hz, 1H).

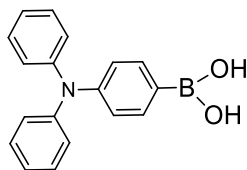
((2-bromotiofen-3-il) metoxi) (tert-butil) dimetilsilano (2)



Sobre una disolución a 0°C de 1,52 g (7,8 mmol) del alcohol (1) en 5 mL de DMF anhidro bajo atmósfera inerte se añaden 1,05g (15,6 mmol) de imidazol y 1,18 g (12 mmol) de cloruro de *tert*-butildimetilsililo. Se deja reaccionar con agitación durante 30 minutos al cabo de los cuales se calienta hasta temperatura ambiente y se deja reaccionar durante 20h. Transcurrido este tiempo el crudo de reacción se disuelve en éter y se lava repetidas veces con H₂O y disolución saturada de NaCl. La fase orgánica resultante se seca con sulfato de magnesio anhidro, se filtra y se evapora a presión reducida. El residuo obtenido se purifica mediante cromatografía en columna de silicagel empleando como eluyente hexano/éter (98:2). Se obtienen 1,1 g de un aceite de color amarillo muy claro. (**Rdto: 46%**).

Peso molecular (g/mol): 307,32. **¹H-RMN** (300 MHz, CDCl₃) δ (ppm): 0,11 (s, 6H), 0,94 (s, 9H), 4,65 (s, 2H), 7,02 (d, *J*=5,7 Hz, 1H), 7,24 (d, *J*=5,7 Hz, 1H).

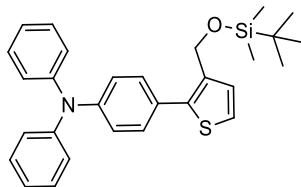
Ácido 4-fenil(N,N'-difenilamino) borónico (3)



Sobre una disolución de 4-bromofenil-(N,N'difenilamina) de 1,7g (5,2mmol) en 10mL de THF anhidro a -78°C en atmósfera inerte, se añaden lentamente 3,8mL de BuLi (1,6M en hexano, 6,24mmol). Se mantiene con agitación 1h y media y posteriormente se adicionan 2,44mL (10,49mmol) de B(iPrO)₃. Se deja alcanzar temperatura ambiente y se deja reaccionar 2h y media. Posteriormente se adiciona una disolución de HCl 1M hasta que se alcance pH 2-3 y se deja con agitación durante 10 min. El producto se lava repetidas veces con hexano. Se obtienen 1,1g de un sólido blanco.

Peso molecular (g/mol): 307,32 **¹H-RMN** (300 MHz, CDCl₃) δ (ppm) 6,99-7,03 (m, 5H), 7,07-7,10 (m, 4H), 7,20-7,34 (m, 5H), 7,93-7,95 (m, 2H).

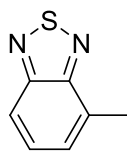
((2-(3-(difenilamino)fenil)tiofen-3-il) metoxi) (tert-butil) dimetilsilano (4)



Una disolución de 1g (3,5mmol) del borano (**3**), 1,1g (3,5mmol) del bromuro (**2**) y 0,86g (6mmol) de K₂CO₃ en 18mL de una mezcla DMF/H₂O (5:1) se desgasifica borboteando una corriente de argón durante 15 min y se añaden posteriormente 46 mg (0,04 mmol) de Pd(PPh₃)₄. Se calienta a reflujo y se deja toda la noche. Al día siguiente se detiene la reacción, se extrae con diclorometano, se seca con MgSO₄ anhidro y se evapora a presión reducida. Posteriormente, el residuo obtenido se redissuelve en Et₂O, se lava repetidas veces con H₂O, se vuelve a secar con MgSO₄ y se evapora a presión reducida. Se obtienen 1,35g de un aceite amarillo pálido. (**Rdto. 82%**)

Peso molecular (g/mol): 289,14 **¹H-RMN** (300 MHz, CDCl₃) δ (ppm): 0,07 (s, 6H), 0,92 (s, 9H), 4,72 (s, 2H), 7,04-7,21 (m, 10H), 7,27 (m, 1H), 7,30-7,38 (m, 5H).

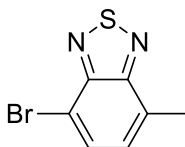
4-metilbenzo[c][1,2,5]tiadiazol (5)



Se disuelven 2,50 g (20,5 mmol) de 2,3-diaminotolueno en 100 mL de CH₂Cl₂ seco, enfriando a 0 °C con baño de hielo. Se añaden 11,5 mL (81 mmol) de trietilamina gota a gota y se deja agitar 15 minutos a 0 °C. Tras ello, se añaden 2,97 mL (41 mmol) de cloruro de tionilo disueltos en 34 mL de CH₂Cl₂ seco gota a gota durante 25 minutos. Se deja una hora con agitación a 0 °C y después se calienta a 40 °C durante 18 horas, obteniendo una disolución marrón-rojiza y un sólido amarillo. Se añaden 140 mL de HCl 2N, se separa la fase orgánica, se seca con MgSO₄ anhidro y se evapora el disolvente. El producto se purifica por cromatografía en columna utilizando como eluyente una mezcla de hexano/CH₂Cl₂ (8:2). Se obtienen 2,5 g de un líquido amarillento. (**Rdto. 81%**)

Peso molecular (g/mol): 150,2. **¹H-RMN** (300 MHz, CDCl₃) δ (ppm): 2,73 (s, 3H), 7,43-7,48 (m, 1H), 7,29-7,32 (m, 1H), 7,80 (d, *J* = 8,8 Hz, 1H). **¹³C-RMN** (100 MHz, CDCl₃) δ (ppm): 17,8, 118,8, 127,8, 129,4, 131,5, 154,8, 155,3.

4-bromo-7-metilbenzo[c][1,2,5]tiadiazol (6)

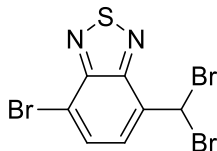


Se disuelven 2,39 g (16,7 mmol) de compuesto (5) en 55 mL de HBr (48% en agua) y se añaden gota a gota 0,9 mL (17,5 mmol) de Br₂ disueltos en 55 mL de HBr (48% en agua). Se va formando una mezcla roja con restos sólidos de color granate que se calienta a reflujo durante 18 horas. Pasado ese tiempo la mezcla de reacción es naranja con cristales blancos. Se enfría a temperatura ambiente, se añaden 100 mL de NaHSO₃ saturado y se deja agitando durante 1 hora. Se extrae el producto con CH₂Cl₂ (2 x 70 mL), se seca la fase orgánica con MgSO₄ anhidro y se evapora el disolvente. Se obtienen 2,86 g de un sólido blanco que contiene una mezcla del compuesto (6) y 4-bromo-7-bromometilbenzo[c][1,2,5]tiadiazol. Este producto se utiliza en la siguiente reacción sin mayor purificación.

Peso molecular (g/mol): 229,1. **¹H-RMN** (300 MHz, CD₂Cl₂) δ (ppm): 2,69 (d, *J* = 1,1 Hz, 3H), 7,24-7,27 (m, 1H), 7,75 (d, *J* = 7,3 Hz, 1H). **HRMS** (ESI⁺) calculado para C₇H₅BrN₂S:

227,9351, encontrado: 227,9358 $[M]^+$; calculado para $C_7H_6BrN_2S$: 228,9430, encontrado: 228,9437 $[M+H]^+$.

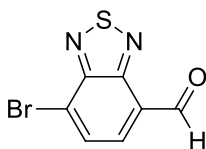
4-bromo-7-(dibromometil)benzo[c][1,2,5]tiadiazol (7)



Se disuelven 2,86 g (12,5 mmol) del compuesto **(6)**, 6,7g (37,5 mmol) de *N*-bromosuccinimida (NBS) y 407 mg (2,5 mmol) de AIBN (azobisisobutironitrilo) en 25 mL de clorobenceno. La disolución se calienta bajo atmósfera de argón a 80 °C durante 4 horas. Se evapora el disolvente y el crudo se redissuelve en 50 mL de CH_2Cl_2 . La fase orgánica se lava con disolución saturada de NaCl (2 x 30 mL) y agua (2 x 30 mL), se seca con $MgSO_4$ anhidro y se evapora el disolvente. El producto se purifica por cromatografía en columna con una mezcla hexano/ CH_2Cl_2 (3:1). Se obtienen 2,25 g un sólido anaranjado. (**Rdto. 47%**).

Peso molecular (g/mol): 386,9. **P. fusión:** (°C) 102-105. **1H -RMN** (300 MHz, $CDCl_3$) δ (ppm): 7,43 (s, 1 H), 7,92-8,00 (m, 2H). **^{13}C -RMN** (100 MHz, CD_2Cl_2) δ (ppm): 34,8, 116,4, 130,0, 132,6, 134,0, 150,4, 153,6.

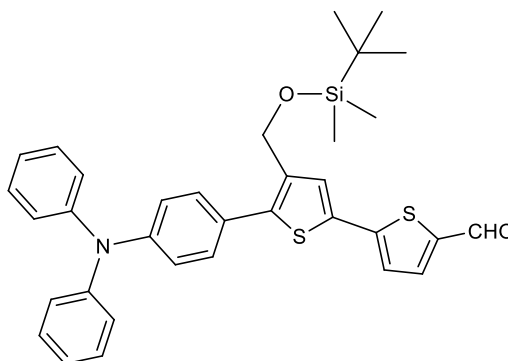
7-bromobenzo[c][1,2,5]tiadiazol-4-carbaldehído (8)



Se disuelven 2,25 g (5,8 mmol) del bromuro **(7)** en 26 mL (58 mmol) de ácido fórmico (>95%) y se calienta a 110 °C durante 2 horas bajo atmósfera de argón. Tras este tiempo la mezcla se deja enfriar y se añade agua, observándose la aparición de un precipitado marrón, que se filtra y lava repetidas veces con agua, hasta pH neutro. Se obtienen 1,26 g de un sólido marrón claro. (**Rdto. 94%**).

Peso molecular (g/mol): 243,1. **P. Fusión:** (°C) 193-197. **1H -RMN** (300 MHz, $CDCl_3$) δ (ppm): 8,05-8,14 (m, 2H), 10,76 (s, 1H). **^{13}C -RMN** (100 MHz, $CDCl_3$) δ (ppm): 122,1, 127,5, 132,3, 132,4, 153,0, 154,6, 188,8. **HRMS** (ESI^+): Calculado para $C_7H_3BrN_2NaOS$: 264,9042, encontrado: 264,9037 $[M+Na]^+$.

4'-(((*tert*-butildimetilsilil)oxi)metil)-5'-(4-(difenilamino)fenil)-[2,2'-bitiofeno]-5-carbaldehído (9)



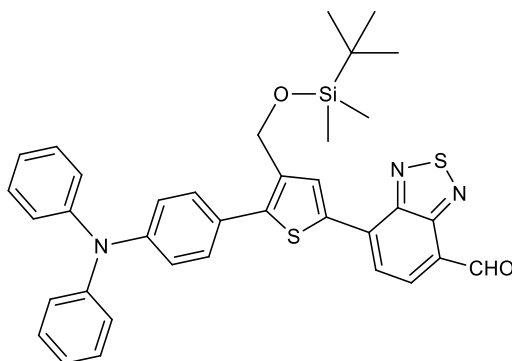
Sobre una disolución de 400 g (0,85 mmol) del compuesto (4) en 30 mL de THF anhidro bajo atmósfera inerte y a -78°C se añaden gota a gota 0,68 mL (1,08 mmol) de *n*-BuLi (1,6M en hexano). Se eleva la temperatura a -50°C y se deja reaccionar con agitación durante una hora, al cabo de la cual se añaden 0,28 mL (0,96 mmol) de cloruro de tributilestaño. Finalizada la adición, se eleva a temperatura ambiente el matraz de reacción y se deja reaccionar otras dos horas. Transcurrido este tiempo se detiene la reacción mediante la adición de 30 mL de éter etílico. La fase orgánica se lava con disolución saturada de NaCl y H_2O , se seca con sulfato de magnesio anhidro, se filtra y se evapora a presión reducida. Se obtiene un aceite de color amarillo que debido a su inestabilidad se emplea sin purificar en la siguiente reacción.

En un matraz que contiene el crudo de la reacción anterior disuelto en 8 mL de tolueno anhidro se añaden 0,01 mL (0,8 mmol) de 2-bromotiofen-5-carboxaldehído. La mezcla resultante se borbotea con argón durante 15 minutos. A continuación, se añaden 56 mg (0,03 mmol) de $\text{Pd}(\text{PPh}_3)_4$ y se deja reaccionar calentando a reflujo durante 15h. Transcurrido este tiempo se detiene la reacción mediante la adición de 40 mL de H_2O . Se extrae la mezcla con tolueno. La fase orgánica resultante se lava con disolución saturada de NH_4Cl y H_2O , se seca con sulfato de magnesio anhidro, se filtra y se evapora a presión reducida. El residuo obtenido se purifica mediante cromatografía en columna de silicagel empleando como eluyente hexano/ CH_2Cl_2 (1:1). Se obtienen 310 mg de un aceite amarillo-naranja. (**Rdto global: 63%**).

Peso molecular (g/mol): 581,86. **^1H -RMN** (300 MHz, CD_2Cl_2) δ (ppm): 0,12 (s, 6H), 0,95 (s, 9H), 4,73 (s, 2H), 7,09-7,18 (m, 9H), 7,30-7,36 (m, 4H), 7,39-7,42 (m, 2H), 7,46 (s, 1H), 7,72 (d, $J=7,7$ Hz, 1H), 9,88 (s, 1H). **^{13}C -RMN** (75 MHz, CD_2Cl_2) δ (ppm): -5,6,

25,6 29,7 59,3,122,7, 123,5, 123,9, 124,9, 126,5, 128,7, 133,1, 137,5, 138,5, 141,5, 141,7, 146,9, 147,3, 148,0, 182,4. **IR** (KBr, cm^{-1}): 1665 (C=O), 1595 (C=C) **HRMS** (ESI⁺): calculado para $\text{C}_{34}\text{H}_{35}\text{O}_2\text{NS}_2\text{Si}$ 581,1873, encontrada: 581,1880 $[\text{M}]^+$.

7-(4-(((*tert*-butildimetilsilil)oxi)metil)-5-(4-(difenilamino)fenil)tiofen-2-il)benzo[c][1,2,5]tiadiazol-4-carbaldehído (10)



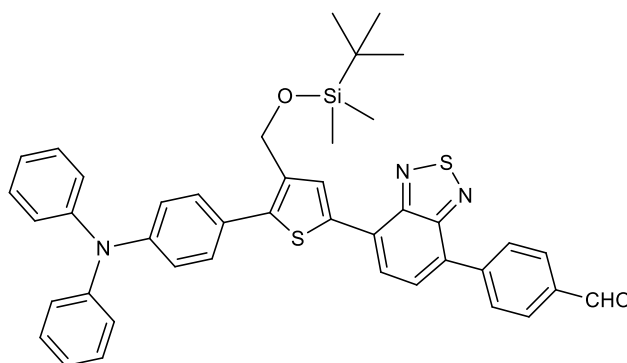
Sobre una disolución de 400 g (0,85 mmol) del compuesto (**4**) en 30 mL de THF anhidro bajo atmósfera inerte y a -78°C se añaden gota a gota 0,68 mL (1,08 mmol) de *n*-BuLi (1,6 M en hexano). Se eleva la temperatura a -50°C y se deja reaccionar con agitación durante una hora, al cabo de la cual se añaden 0,28 mL (0,96 mmol) de cloruro de tributilestaño. Finalizada la adición, se eleva a temperatura ambiente el matraz de reacción y se deja reaccionar otras dos horas. Transcurrido este tiempo se detiene la reacción mediante la adición de 30 mL de éter etílico. La fase orgánica se lava con disolución saturada de NaCl y H_2O , se seca con sulfato de magnesio anhidro, se filtra y se evapora a presión reducida. Se obtiene un aceite de color amarillo que debido a su inestabilidad se emplea sin purificar en la siguiente reacción.

En un matraz que contiene el crudo de la reacción anterior disuelto en 8 mL de tolueno anhidro se añaden 175 mg (0,8 mmol) del bromuro (**8**). La mezcla resultante se borbotea con argón durante 15 minutos. A continuación, se añaden 56 mg (0,03 mmol) de $\text{Pd}(\text{PPh}_3)_4$ y se deja reaccionar calentando a reflujo durante 15h. Transcurrido este tiempo se detiene la reacción mediante la adición de 40 mL de H_2O . Se extrae la mezcla con tolueno. La fase orgánica resultante se lava con disolución saturada de NH_4Cl y H_2O , se seca con sulfato de magnesio anhidro, se filtra y se evapora a presión reducida. El residuo obtenido se purifica mediante cromatografía en columna de silicagel empleando como

eluyente hexano/CH₂Cl₂ (1:9). Se obtienen 360 mg de un sólido rojo. (**Rdto global: 67%**).

Peso molecular (g/mol): 633,90 **P. Fusión** (°C): 184-186 **¹H-RMN** (300 MHz, CD₂Cl₂) δ (ppm): 0,00 (s, 6H), 0,81 (s, 9H), 4,67 (s, 2H), 6,96-7,03 (m, 8H), 7,16-7,18 (m, 4H), 7,33-7,36 (m, 2H), 7,89 (d, $J=7,6$ Hz, 1H), 8,09 (d, $J=7,6$ Hz, 1H), 8,24 (s, 1H), 10,58 (s, 1H) **¹³C{¹H}APT** (75 MHz, CD₂Cl₂) δ (ppm): -5,1, 26,1, 28,2, 59,9, 123,1, 123,9, 123,9, 125,3, 125,8, 127,1, 129,8, 130,1, 132,7, 133,2, 133,4, 136,0, 139,0, 144,9, 147,7, 148,5, 152,8, 154,3, 188,7. **IR** (KBr, cm⁻¹): 1692 (C=O), 1584 (C=C). **HRMS** (ESI⁺) calculado para C₃₆H₃₅O₂N₃NaS₂Si 656,1832, encontrada: 656,1820 [M+Na]⁺.

4-(7-(4-(((*tert*-butildimetilsilil)oxi)metil)-5-(4-(difenilamino)fenil)tiofen-2-il)benzo[c][1,2,5]tiadiazol-4-il)benzaldehído (11)



Sobre una disolución de 337 g (0,72 mmol) del compuesto (**4**) en 25 mL de THF anhidro bajo atmósfera inerte y a -78°C se añaden gota a gota 0,58 mL (0,93 mmol) de *n*-BuLi (1,6M en hexano). Se eleva la temperatura a -50°C y se deja reaccionar con agitación durante una hora, al cabo de la cual se añaden 0,24 mL (0,86 mmol) de cloruro de tributilestaño. Finalizada la adición, se eleva a temperatura ambiente el matraz de reacción y se deja reaccionar otras dos horas. Transcurrido este tiempo se detiene la reacción mediante la adición de 25 mL de éter etílico. La fase orgánica se lava con disolución saturada de NaCl y H₂O, se seca con sulfato de magnesio anhidro, se filtra y se evapora a presión reducida. Se obtiene un aceite de color amarillo que debido a su inestabilidad se emplea sin purificar en la siguiente reacción.

En un matraz que contiene el crudo de la reacción anterior disuelto en 8 mL de tolueno anhidro se añaden 175 mg (0,8 mmol) de 4-(7-bromobenzo[c][1,2,5]tiadiazol-4-il)-

benzaldehído. La mezcla resultante se borbotea con argón durante 15 minutos. A continuación, se añaden 47 mg (0,025 mmol) de $\text{Pd(PPh}_3)_4$ y se deja reaccionar calentando a reflujo durante 15h. Transcurrido este tiempo se detiene la reacción mediante la adición de 30 mL de H_2O . Se extrae la mezcla con tolueno. La fase orgánica resultante se lava con disolución saturada de NH_4Cl y H_2O , se seca con sulfato de magnesio anhidro, se filtra y se evapora a presión reducida. El residuo obtenido se purifica mediante cromatografía en columna de silicagel empleando como eluyente hexano/ CH_2Cl_2 (1:1). Se obtienen 342 mg de un sólido rojo. El producto obtenido contiene 4-(7-bromobenzo[c][1,2,5]tiadiazol-4-il)-benzaldehído que no pudo ser separado ya que la polaridad de ambos productos era idéntica en todos los eluyentes probados. No obstante, dado que la siguiente reacción era la desprotección del grupo sililado con TBAF, se decidió utilizar el producto impuro en la siguiente reacción, donde se consiguió separar la impureza sin mayores dificultades.

Peso molecular (g/mol): 709,99 **^1H -RMN** (300 MHz, CD_2Cl_2) δ (ppm): 0,15 (s, 6H), 0,97 (s, 9H), 4,83 (s, 2H), 7,09-7,19 (m, 8H), 7,29-7,32 (m, 4H), 7,46-7,49 (m, 2H), 7,84 (d, $J=7,6$ Hz, 1H), 8,05-8,09 (m, 3H), 8,17-8,19 (m, 2H), 8,25 (s, 1H), 10,58 (sa, 1H). **IR** (KBr, cm^{-1}): 1694 (C=O), 1583 (C=C), **HRMS** (ESI⁺): calculado para $\text{C}_{42}\text{H}_{39}\text{O}_2\text{N}_3\text{NaS}_2\text{Si}$ 732,2145, encontrada: 732,2152 $[\text{M}+\text{Na}]^+$.

7.2.- Espectros y gráficos

Referencia	Espectros	Figura
(1)	^1H -RMN	7.2.1
(2)	^1H -RMN	7.2.2
(3)	^1H -RMN	7.2.3
(4)	^1H -RMN	7.2.4
(5)	^1H -RMN	7.2.5
	^{13}C -RMN (APT)	7.2.6
(6)	^1H -RMN	7.2.7
(7)	^1H -RMN	7.2.8
	^{13}C -RMN (APT)	7.2.9
(8)	^1H -RMN	7.2.10
	^{13}C -RMN	7.2.11
	HRMS (ESI ⁺)	7.2.12
(9)	^1H -RMN	7.2.13
	^{13}C -RMN (APT)	7.2.14
	IR	7.2.15
	HRMS (ESI ⁺)	7.2.16
(10)	^1H -RMN	7.2.17
	^{13}C -RMN (APT)	7.2.18
	IR	7.2.19
	HRMS (ESI ⁺)	7.2.20
(11)	^1H -RMN	7.2.21
	IR	7.2.22
	Masas	7.2.23
(12)	^1H -RMN	7.2.24
	^{13}C -RMN (APT)	7.2.25
	IR	7.2.26
	Masas	7.2.27
(13)	^1H -RMN	7.2.28
	^{13}C -RMN (APT)	7.2.29
	IR	7.2.30
	Masas	7.2.31
(14)	^1H -RMN	7.2.32
	^{13}C -RMN (APT)	7.2.33
	IR	7.2.34
	Masas	7.2.35
(15)	^1H -RMN	7.2.36
	^{13}C -RMN	7.2.37
	HMBC	7.2.38
	IR	7.2.39
	Masas	7.2.40
(16)	^1H -RMN	7.2.41
	^{13}C -RMN	7.2.42

	COSY	7.2.43
	HSQC	7.2.44
	IR	7.2.45
	Masas	7.2.46
(17)	¹ H-RMN	7.2.47
	¹³ C-RMN	7.2.48
	COSY	7.2.49
	HSQC	7.2.50
	HMBC	7.2.51
	IR	7.2.52
	Masas	7.2.53
(18)	¹ H-RMN	7.2.54
	FID (¹ H-RMN)	7.2.55
	IR	7.2.56
	Masas	7.2.57
	UV	7.2.58
	DPV	7.2.59
(19)	¹ H-RMN	7.2.60
	FID (¹ H-RMN)	7.2.61
	IR	7.2.62
	Masas	7.2.63
	UV	7.2.64
(20)	¹ H-RMN	7.2.65
	FID (¹ H-RMN)	7.2.66
	IR	7.2.67
	Masas	7.2.68
	UV	7.2.69
	DPV	7.2.70

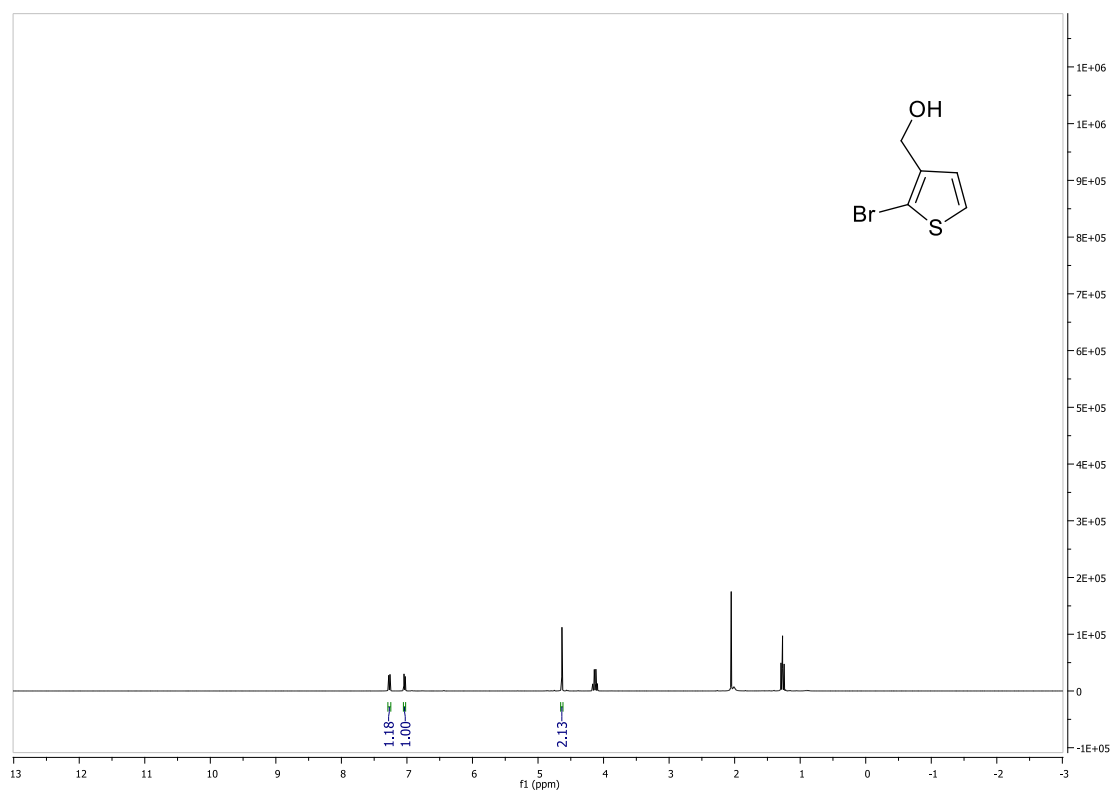


Figura 7.2.1. Espectro ¹H-RMN de (1).

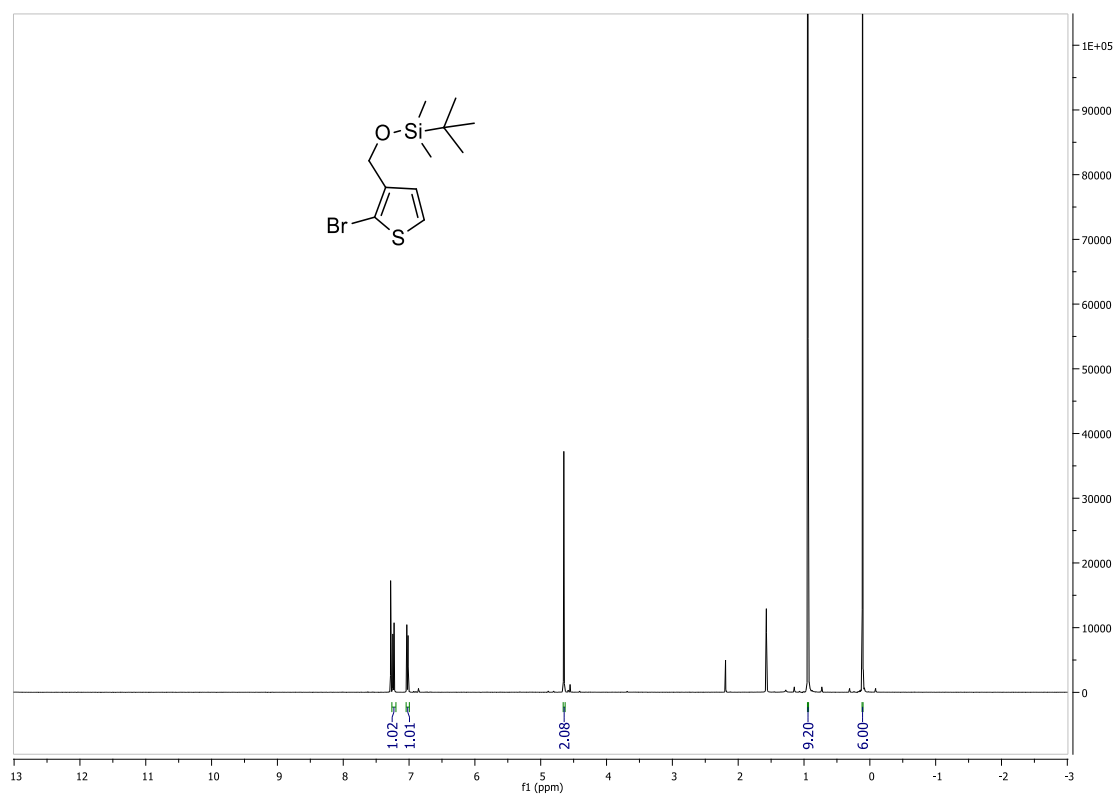


Figura 7.2.2. Espectro ¹H-RMN de (2).

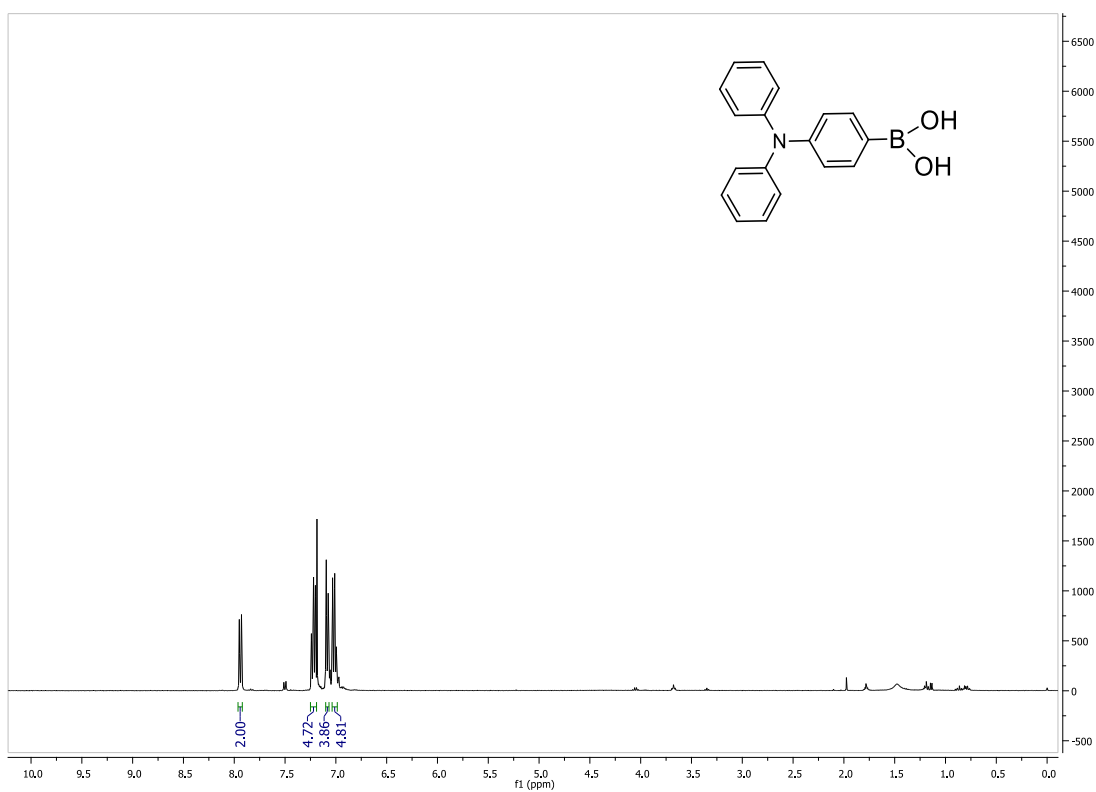


Figura 7.2.3. Espectro ^1H -RMN de **(3)**.

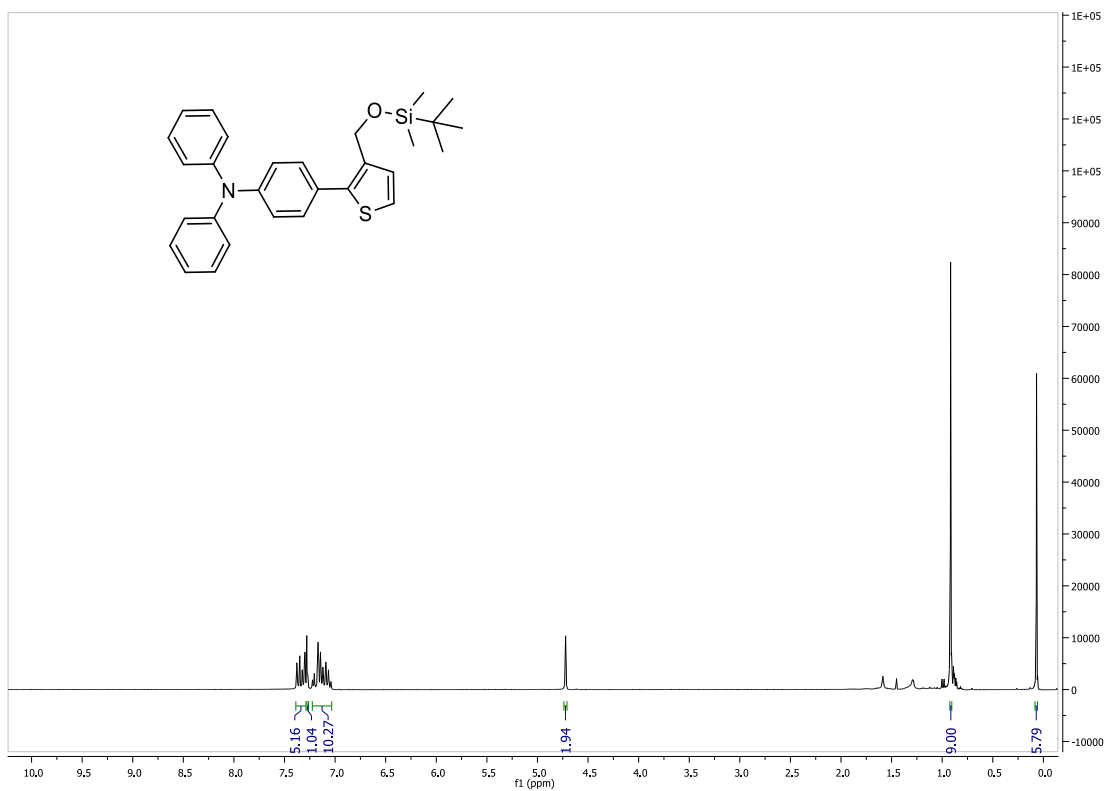


Figura 7.2.4. Espectro ^1H -RMN de **(4)**.

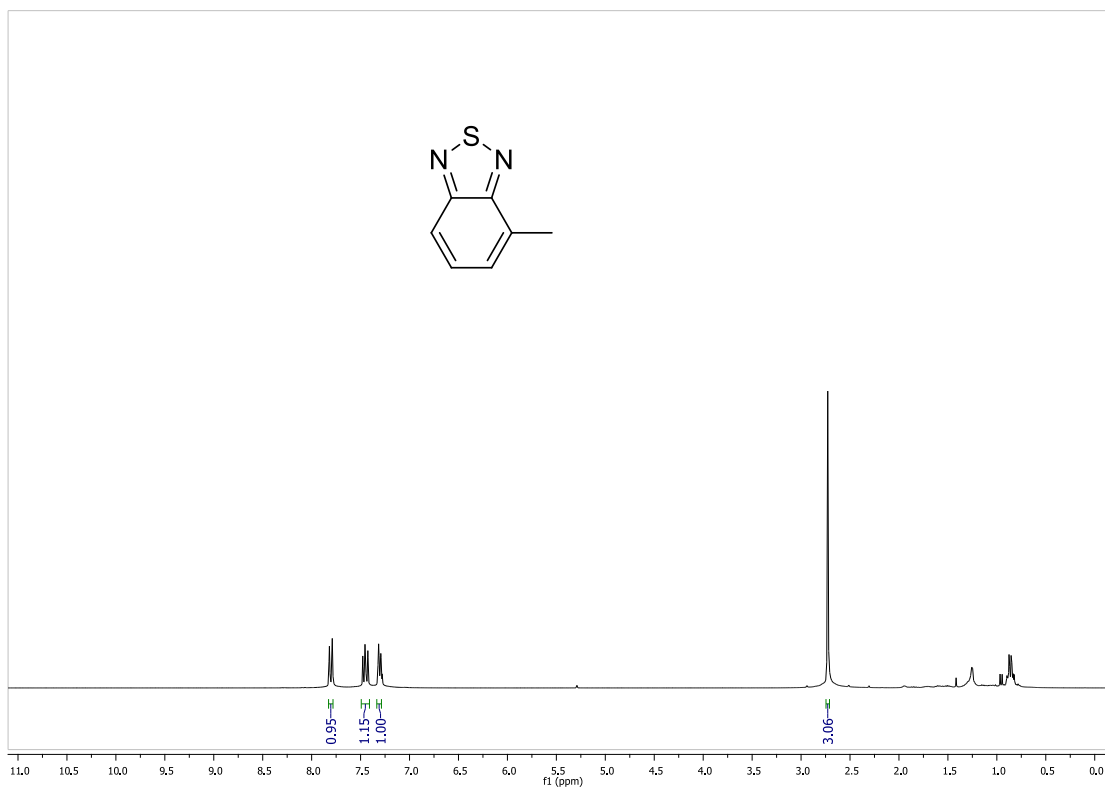


Figura 7.2.5. Espectro ^1H -RMN de (5).

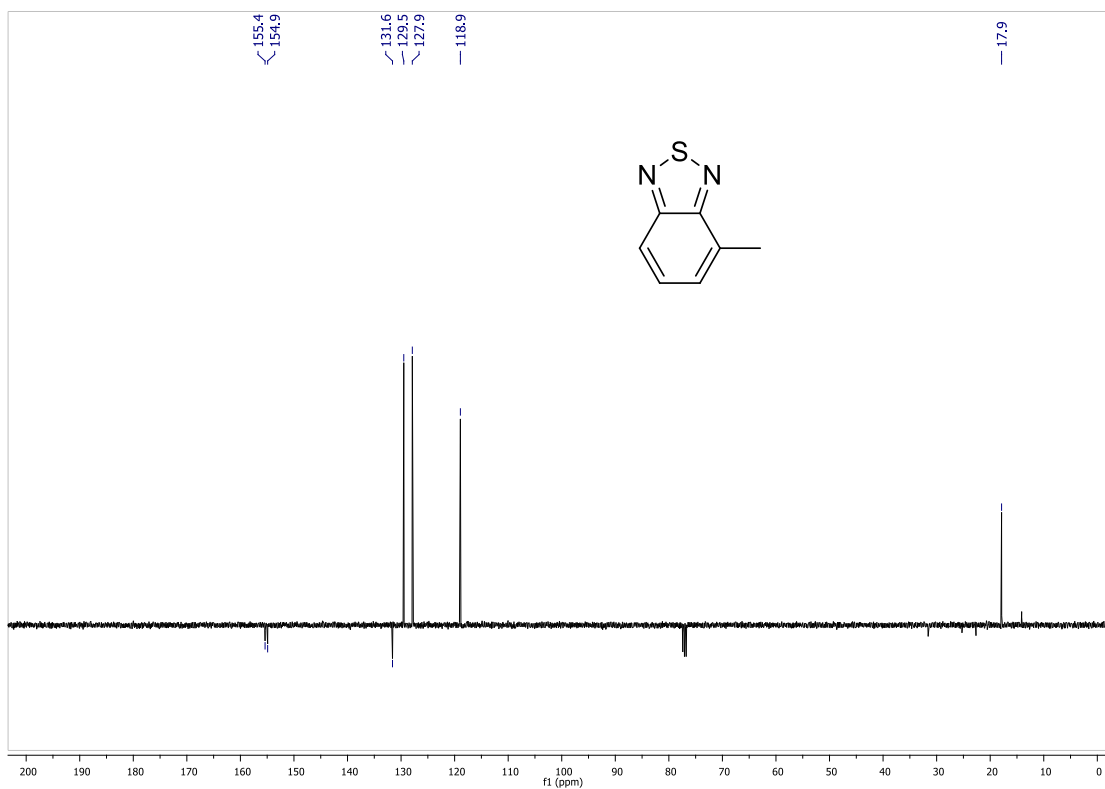


Figura 7.2.6. Espectro ^{13}C -RMN (APT) de (5).

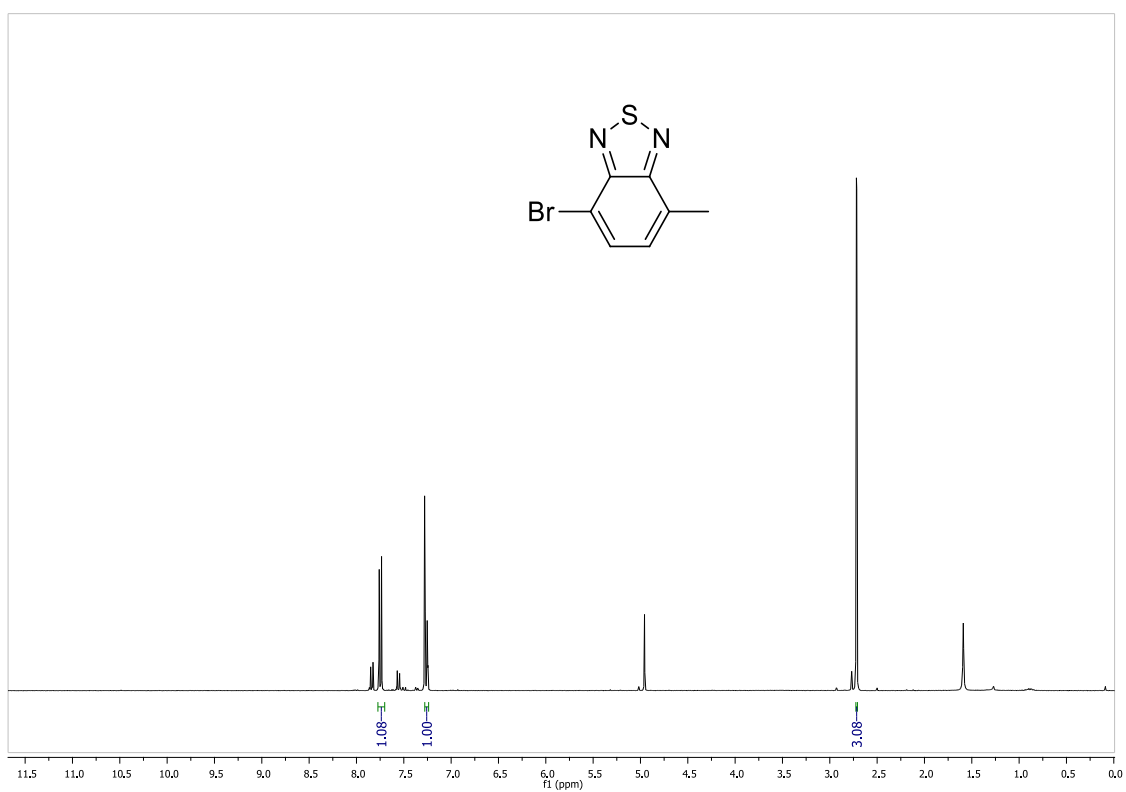


Figura 7.2.7. Espectro ^1H -RMN de (6).

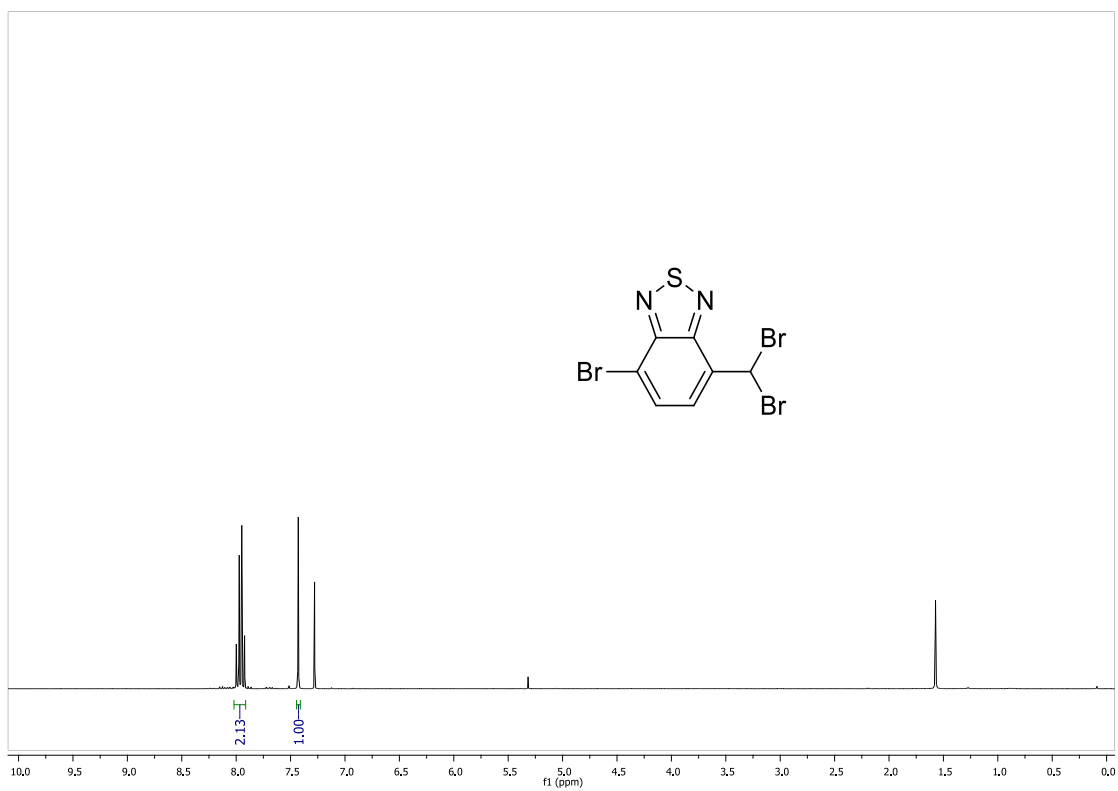


Figura 7.2.8. Espectro ^1H -RMN de (7).

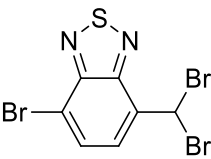


Figura 7.2.9. Espectro ^{13}C -RMN de (7).

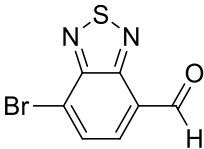


Figura 7.2.10. Espectro ^1H -RMN de **(8)**.

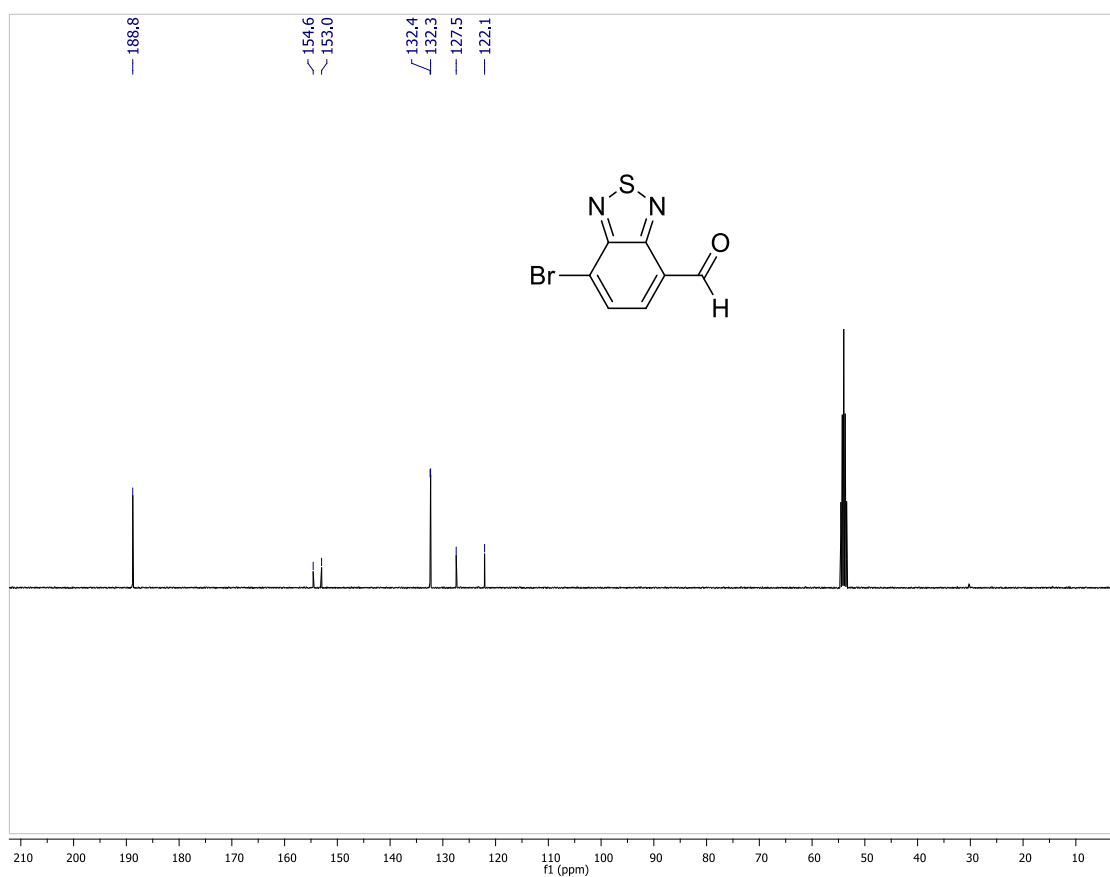


Figura 7.2.11. Espectro ^{13}C -RMN de **(8)**.

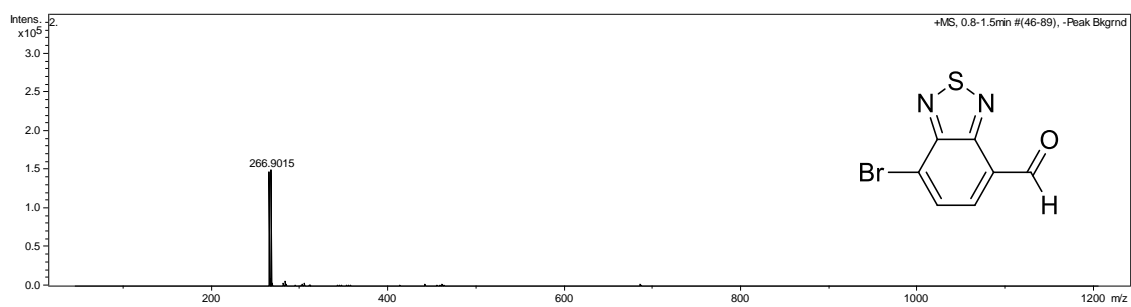
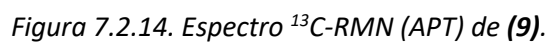


Figura 7.2.12. Espectro HRMS (ESI^+) de **(8)**.



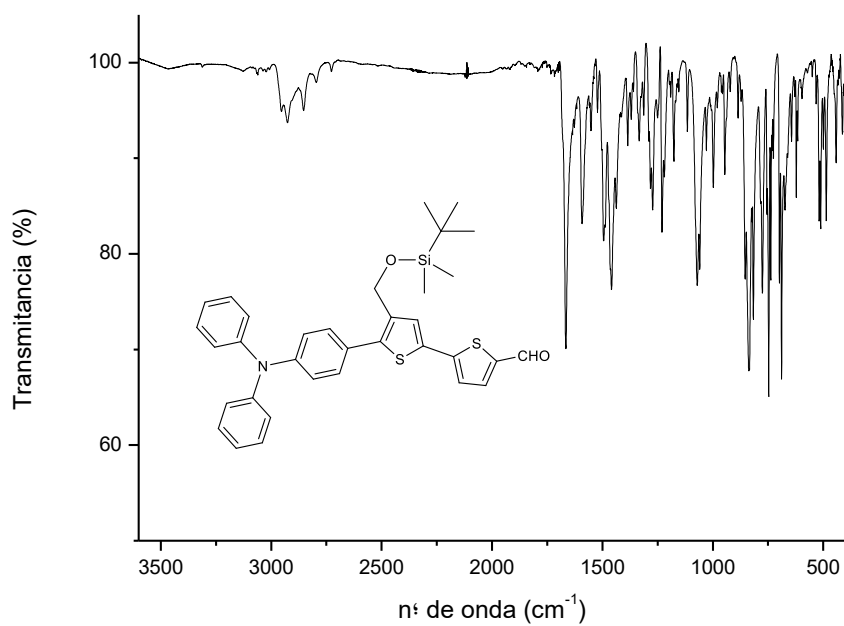


Figura 7.2.15. Espectro IR de **(9)**.

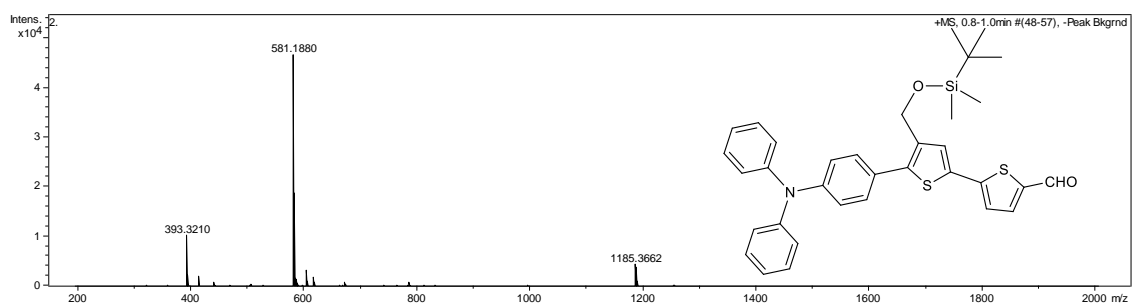


Figura 7.2.16. Espectro HRMS (ESI⁺) de **(9)**.

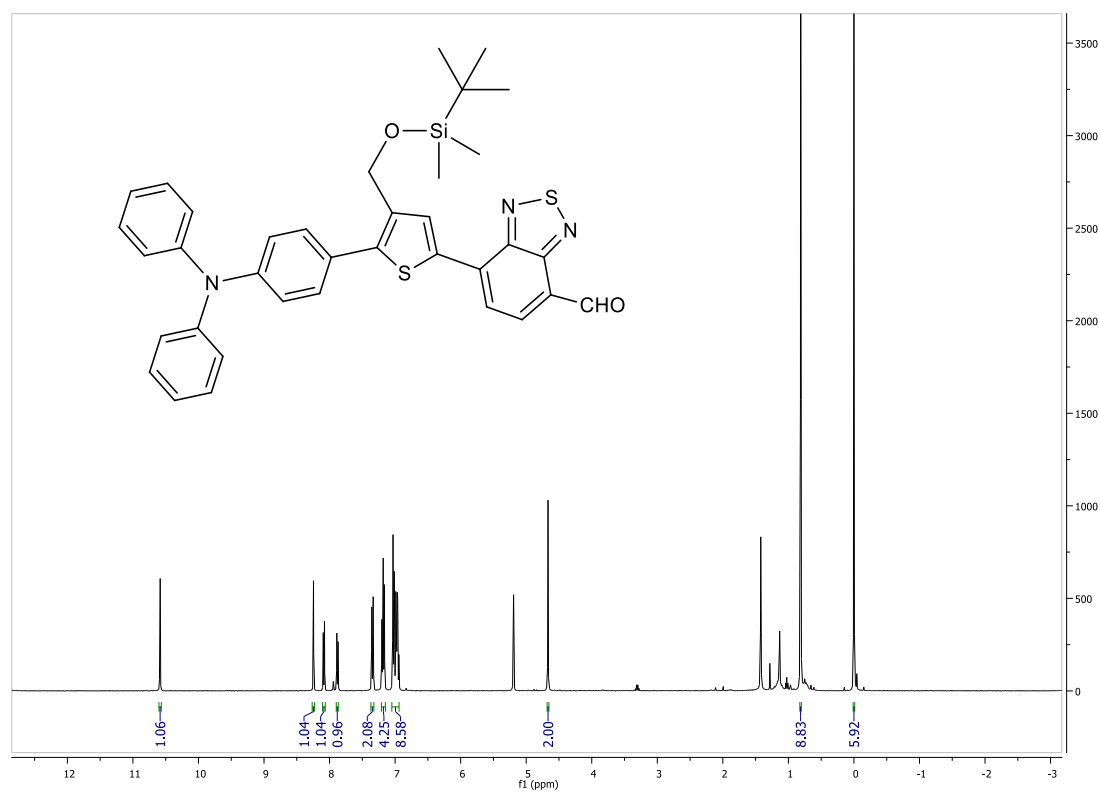


Figura 7.2.17. Espectro ¹H-RMN de (10).

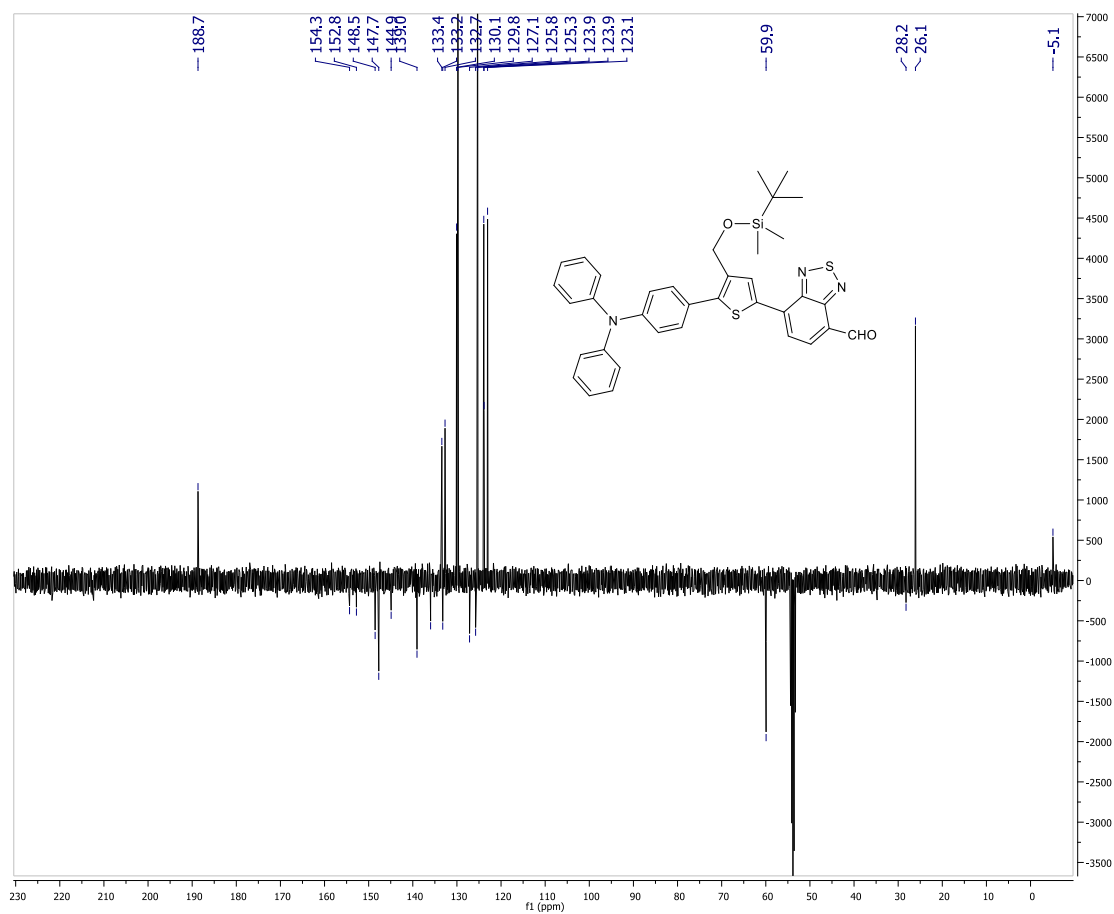


Figura 7.2.18. Espectro ¹³C-RMN (APT) de (10).

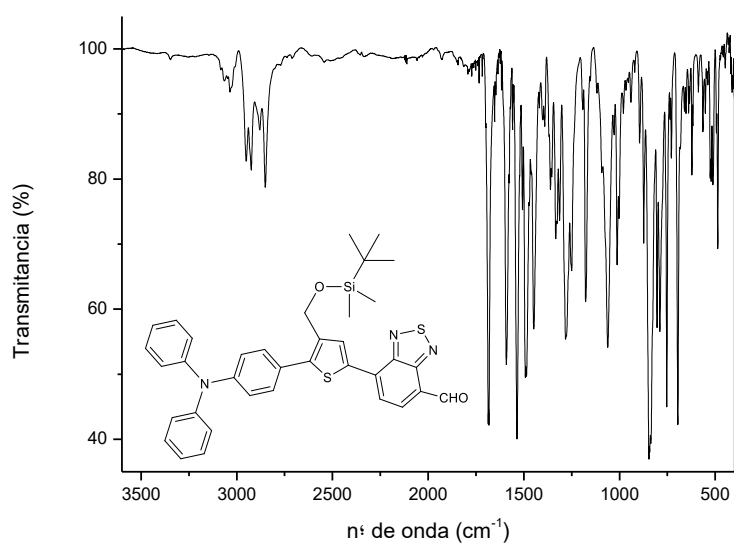


Figura 7.2.19. Espectro IR de **(10)**.

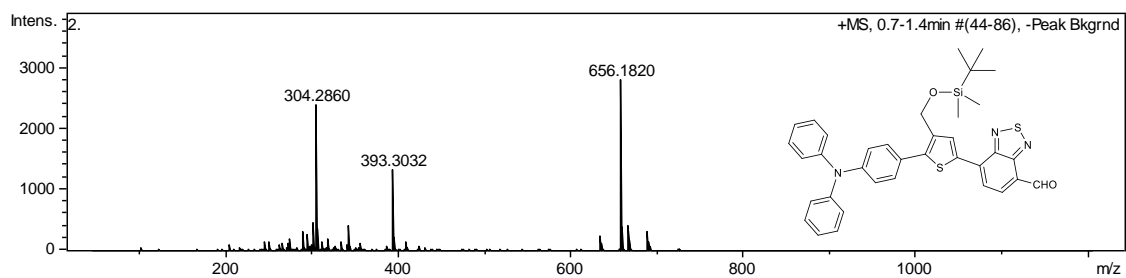


Figura 7.2.20. Espectro HRMS (ESI⁺) de **(10)**.

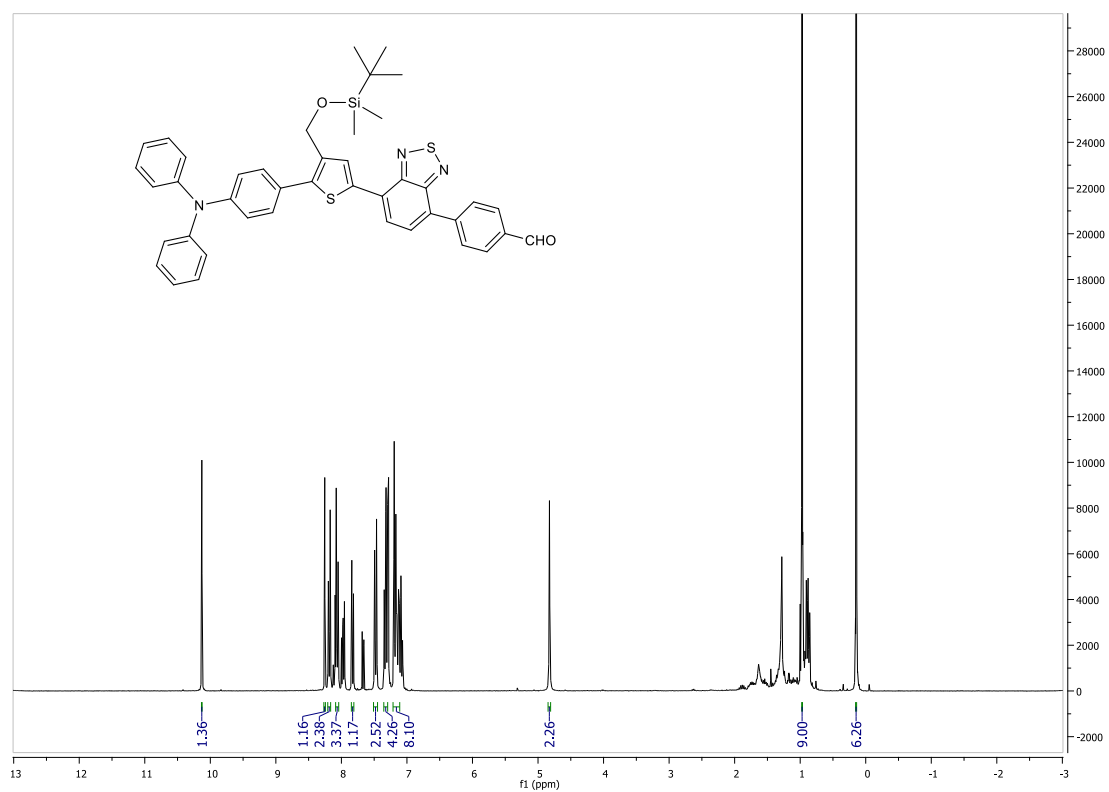


Figura 7.2.21. Espectro ¹H-RMN de **(11)**.

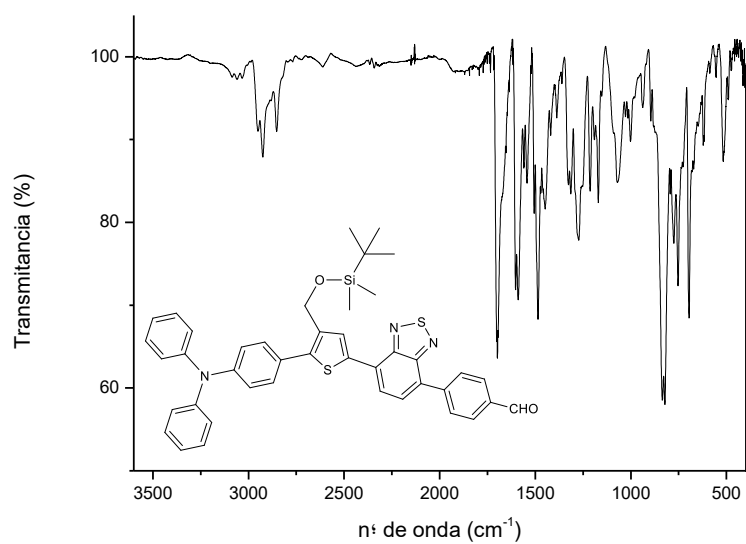


Figura 7.2.22. Espectro IR de **(11)**.

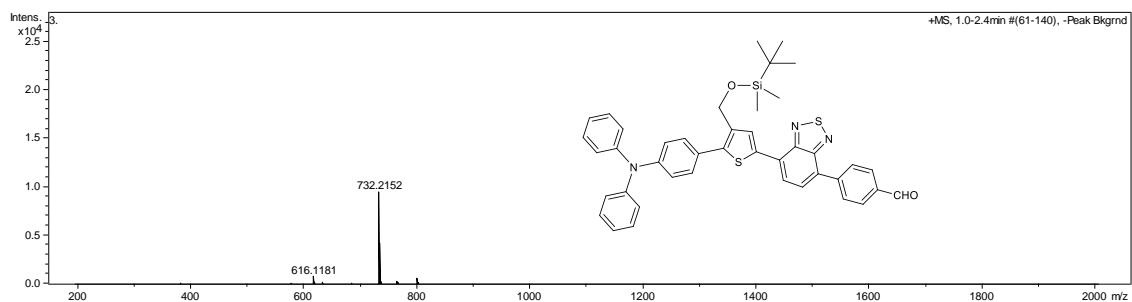


Figura 7.2.23. Espectro HRMS (ESI⁺) de **(11)**.

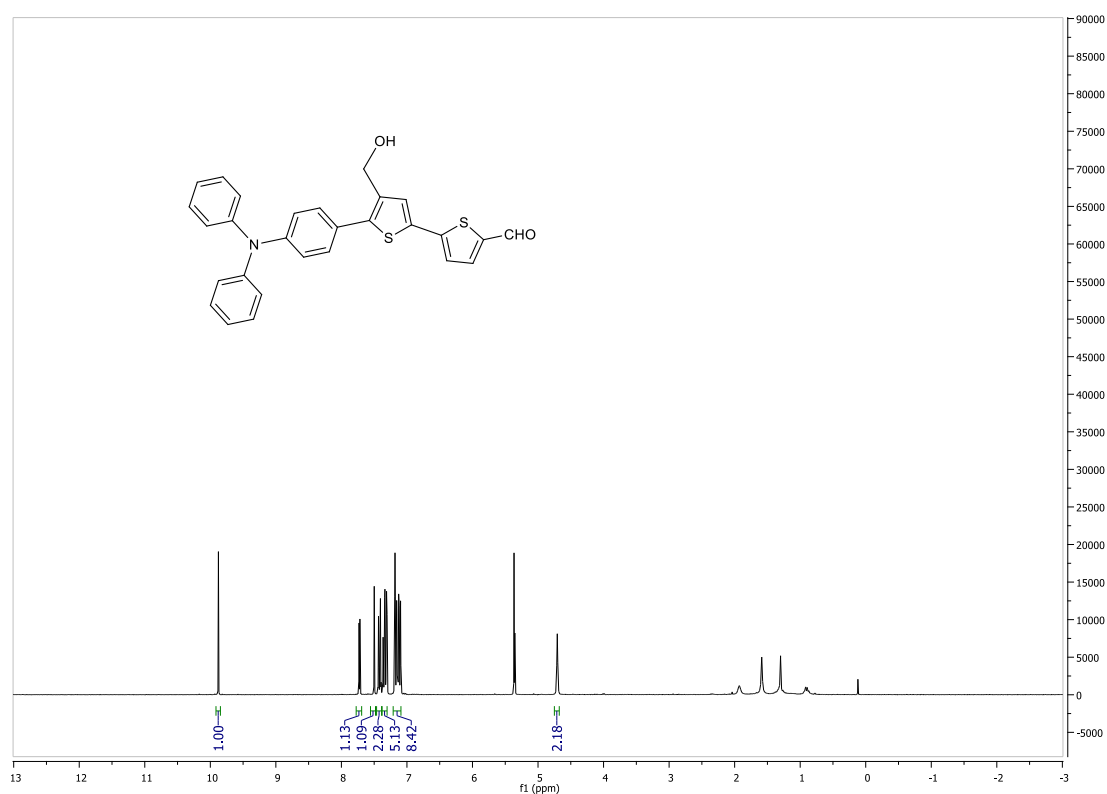


Figura 7.2.24. Espectro ¹H-RMN de **(12)**.

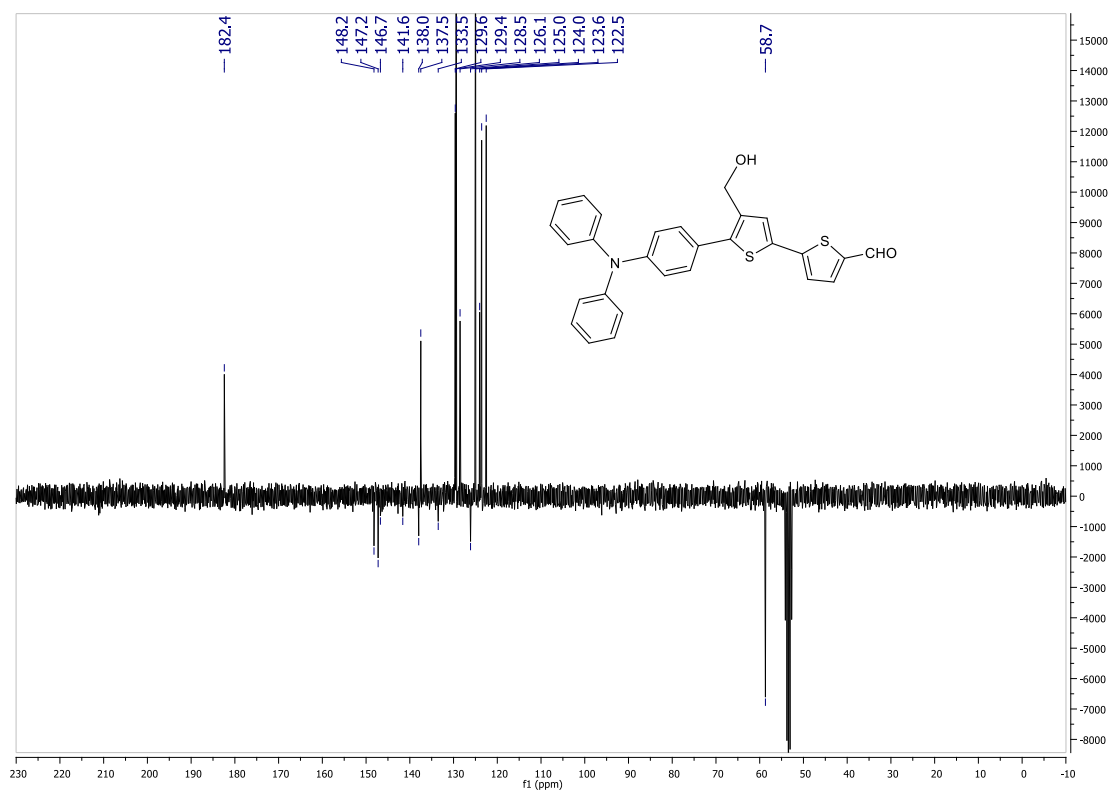


Figura 7.2.25. Espectro ^{13}C -RMN (APT) de (**12**).

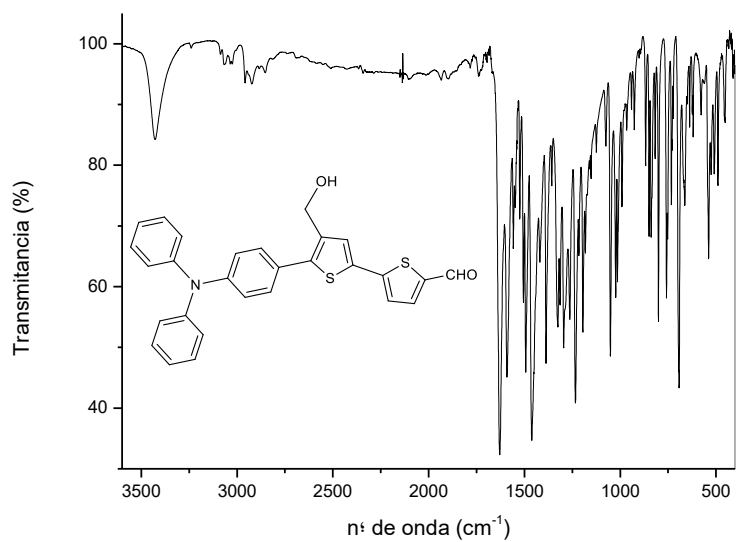


Figura 7.2.26. Espectro IR de (**12**).

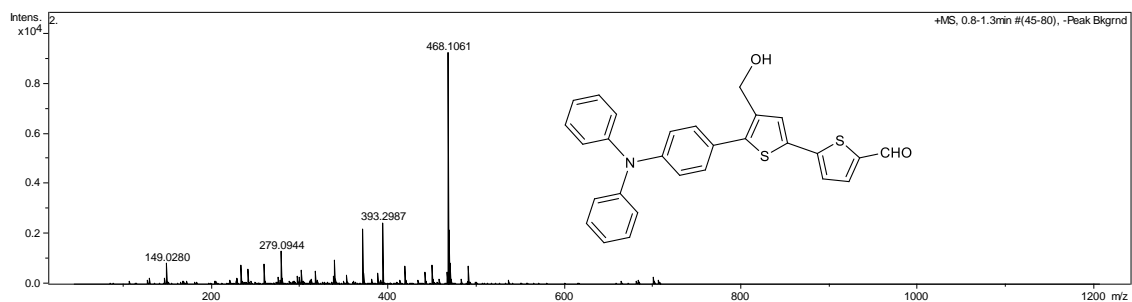


Figura 7.2.27. Espectro HRMS (ESI⁺) de **(12)**.

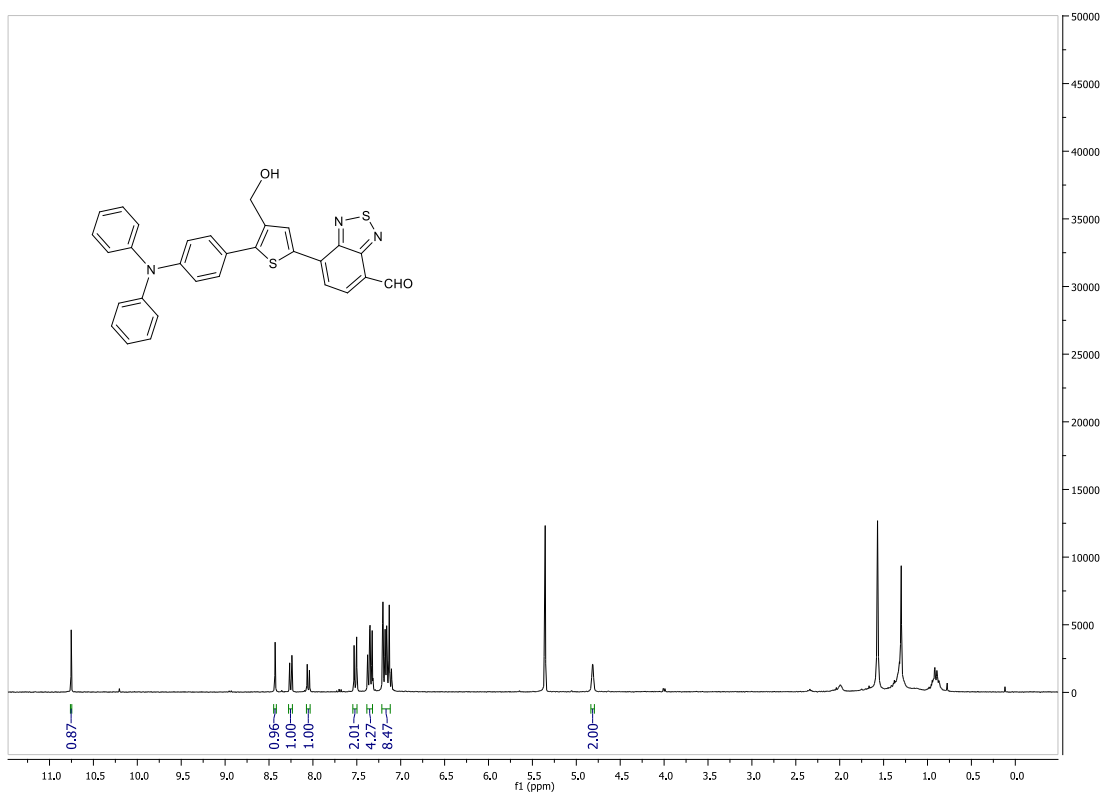


Figura 7.2.28. Espectro ¹H-RMN de **(13)**.

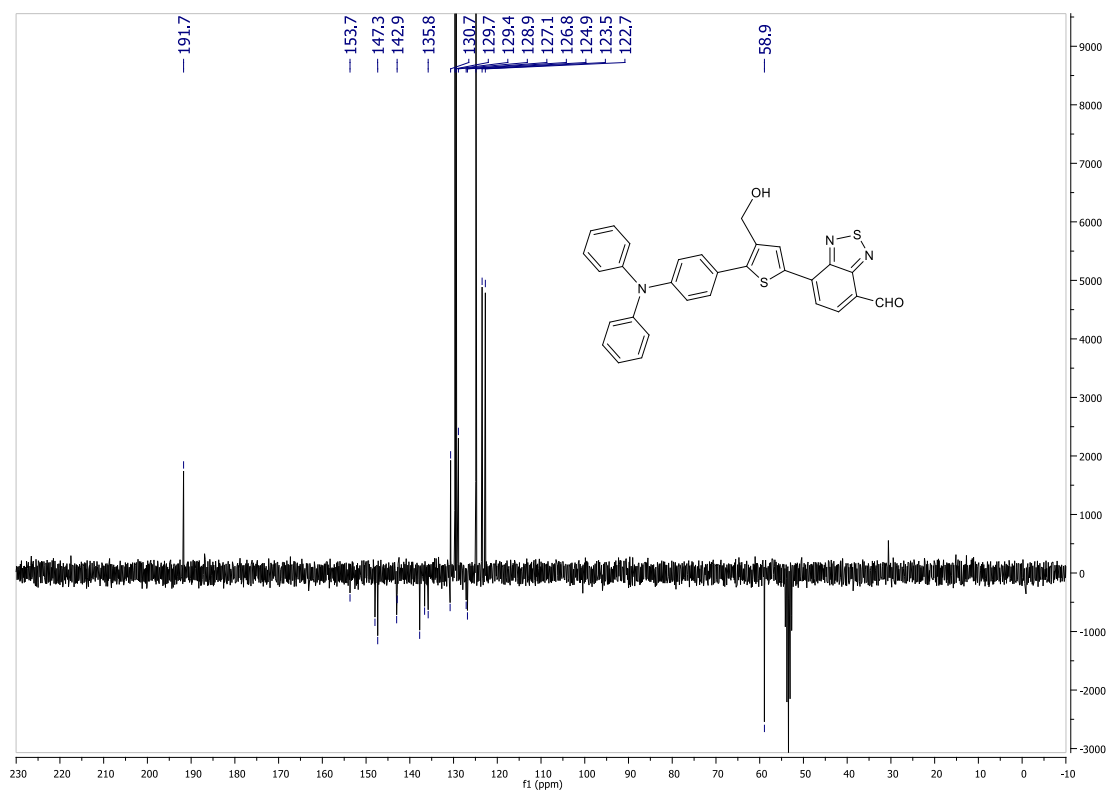


Figura 7.2.29. Espectro ^{13}C -RMN (APT) de (**13**).

IR

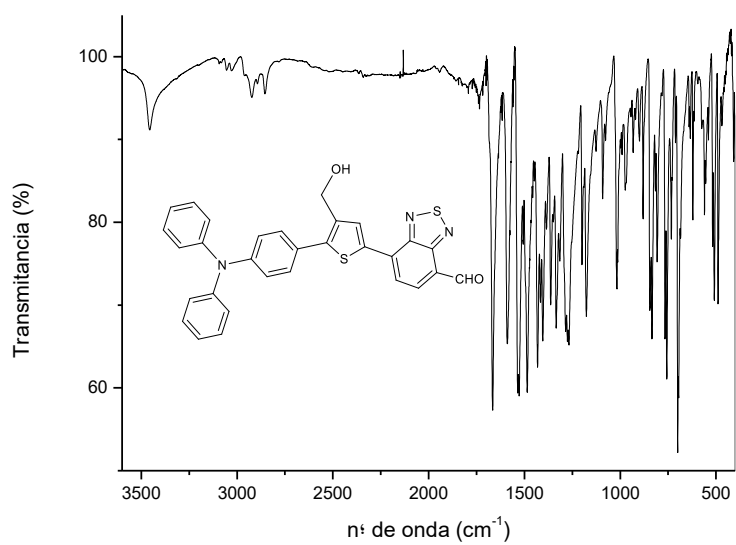


Figura 7.2.30. Espectro IR de (**13**).

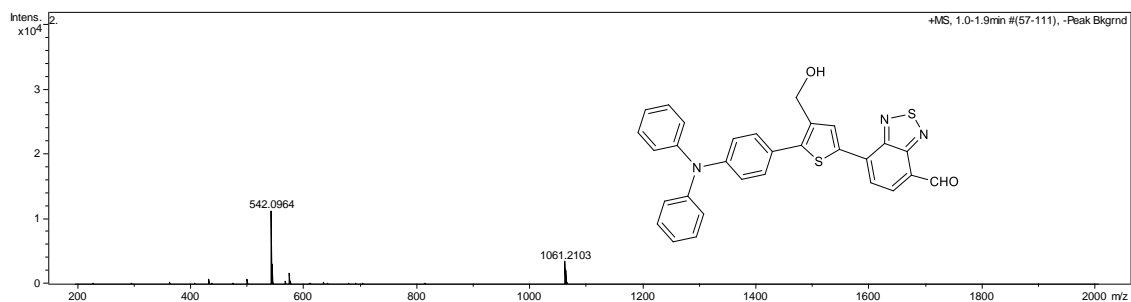


Figura 7.2.31. Espectro HRMS (ESI⁺) de **(13)**.

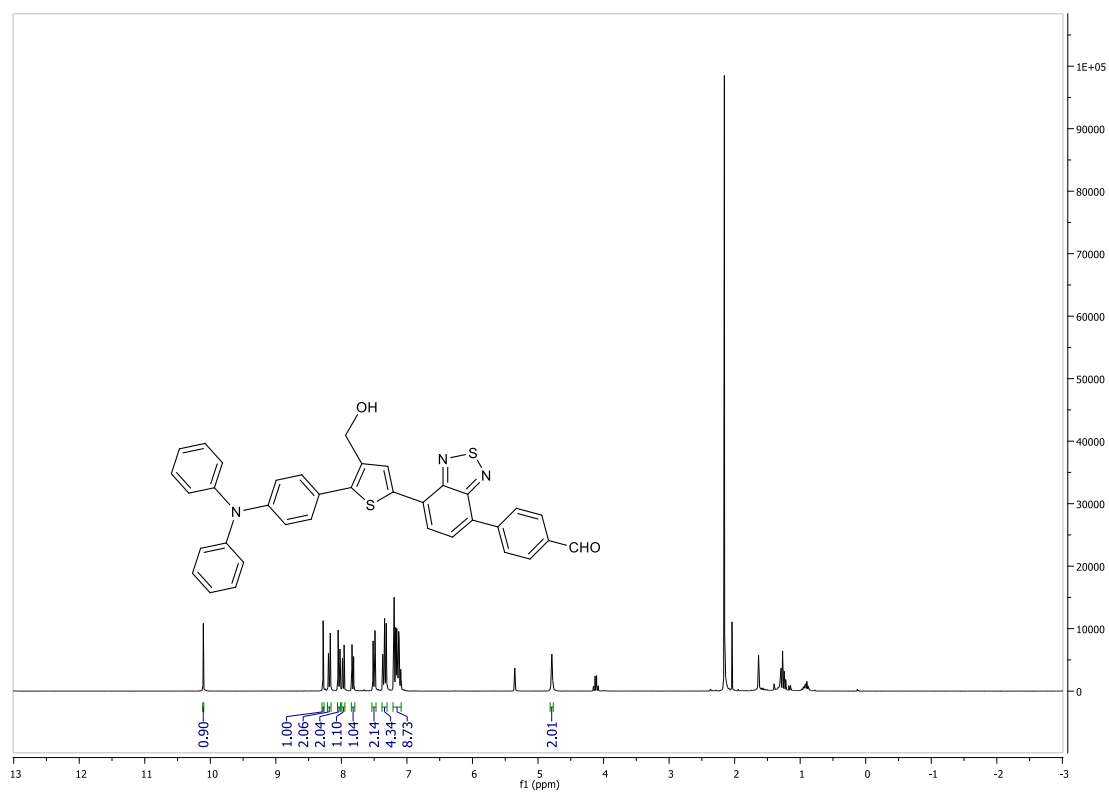


Figura 7.2.32. Espectro ¹H-RMN de **(14)**.

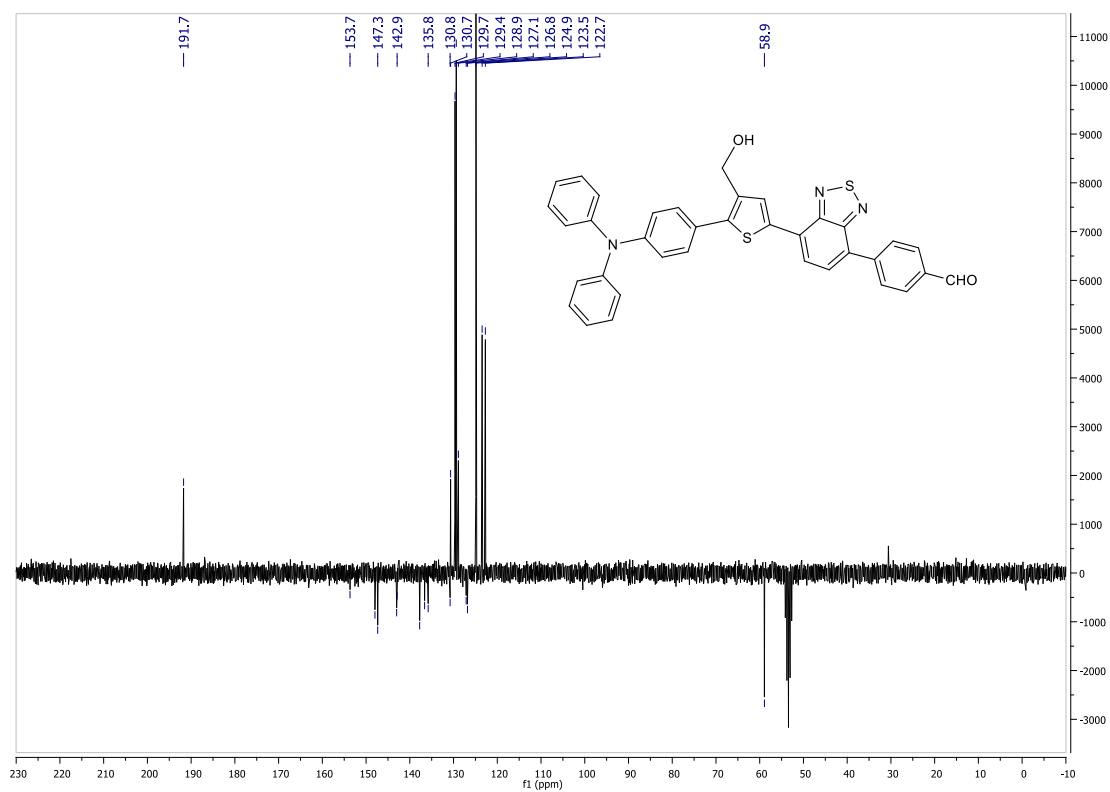


Figura 7.2.33. Espectro ^{13}C -RMN (APT) de (**14**).

IR

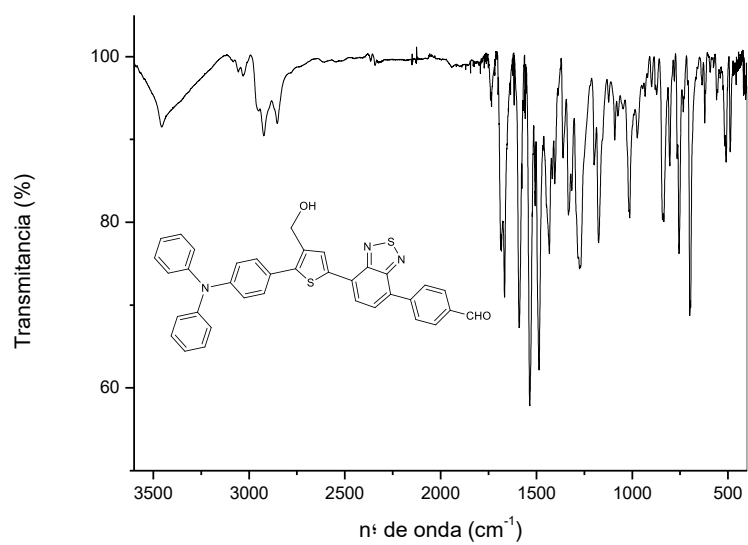


Figura 7.2.34. Espectro IR de (**14**).

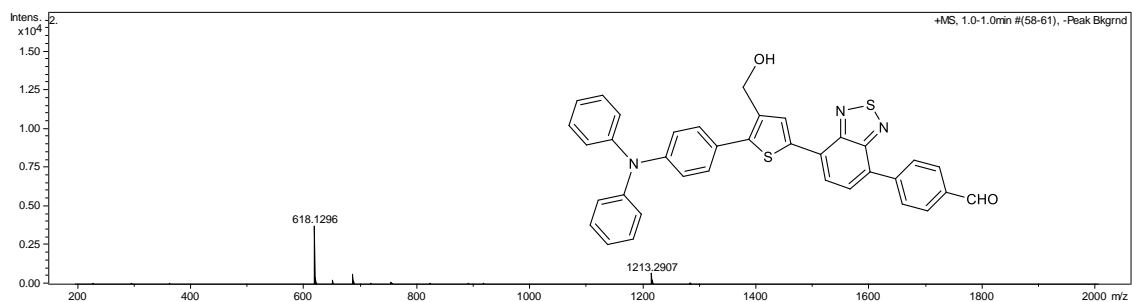


Figura 7.2.35. Espectro HRMS (ESI⁺) de **(14)**.

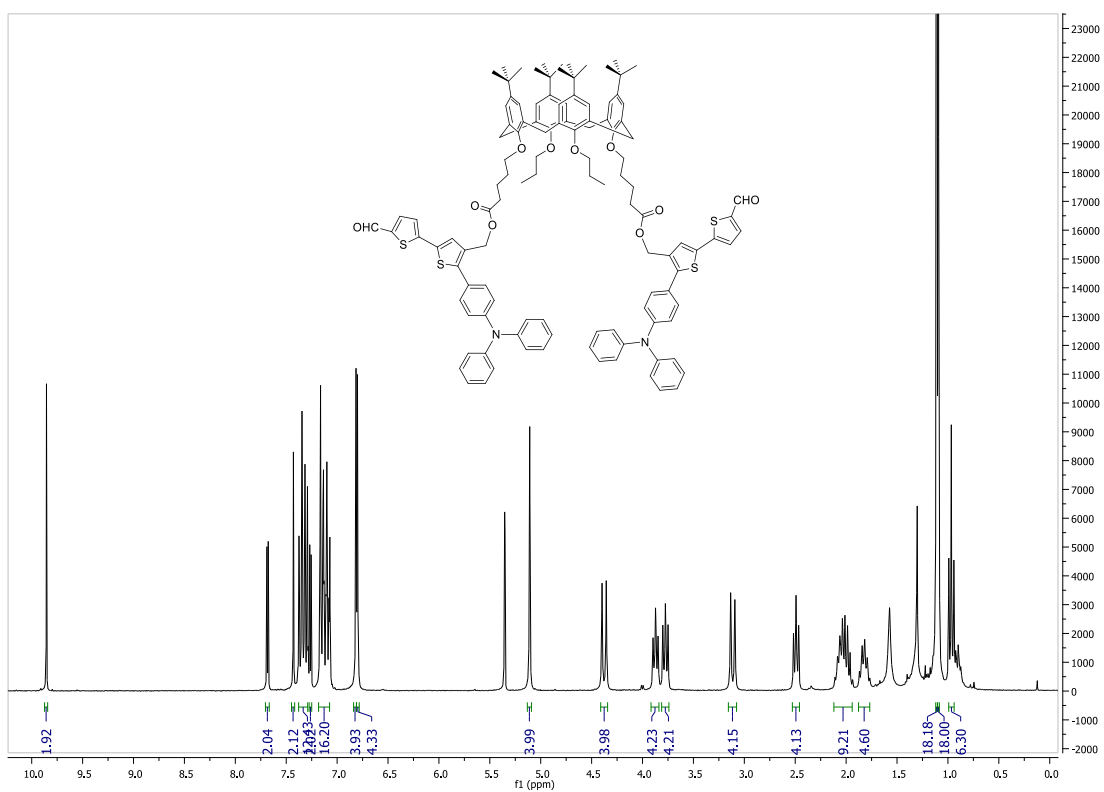


Figura 7.2.36. Espectro ¹H-RMN de **(15)**.

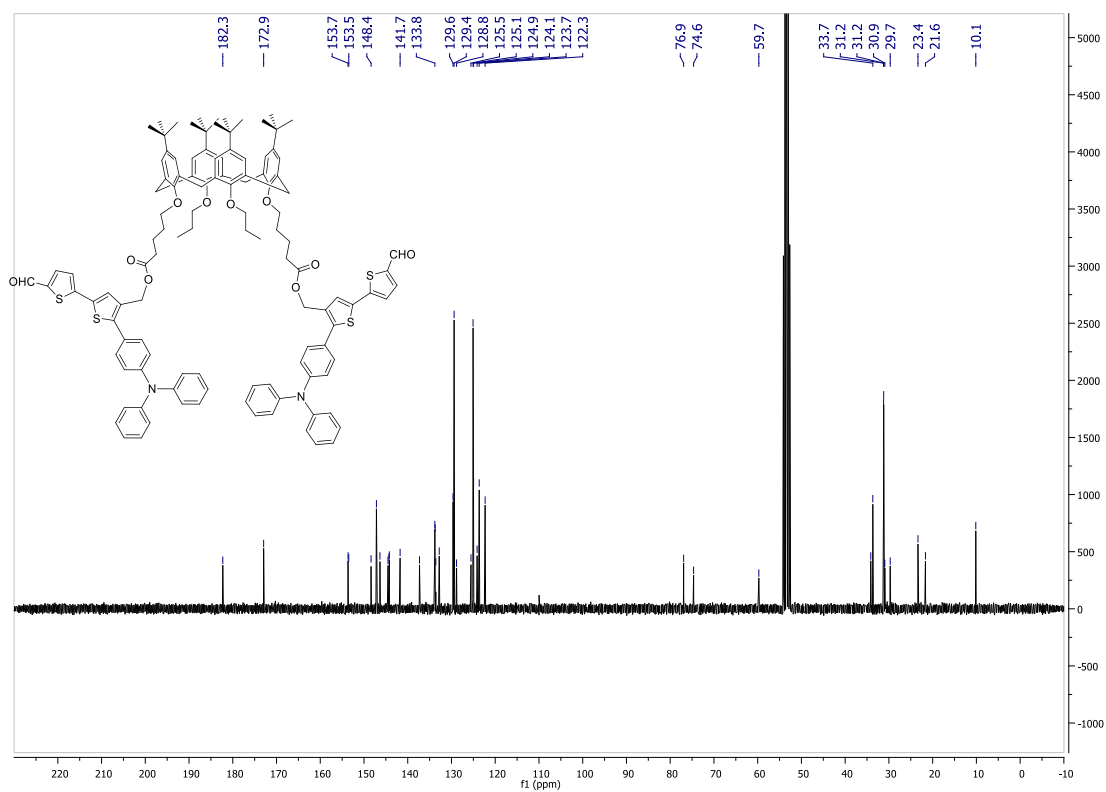


Figura 7.2.37. Espectro ^{13}C -RMN de (15).

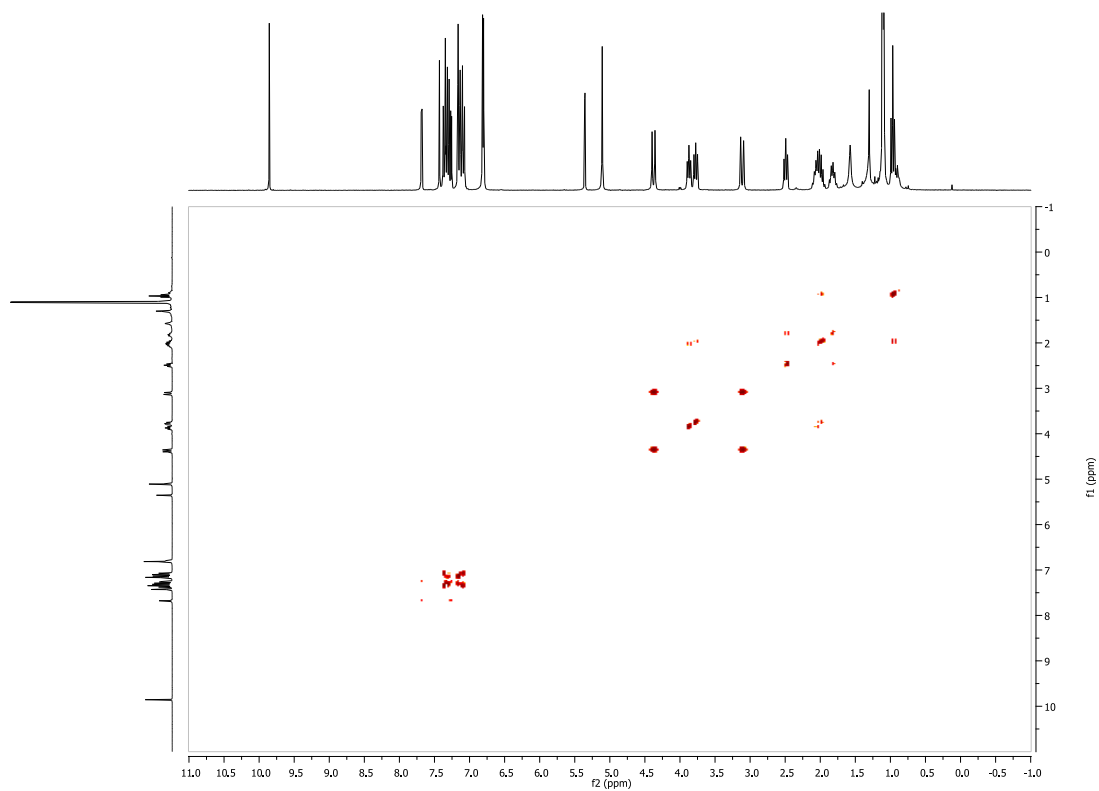


Figura 7.2.37. Espectro COSY ^1H - ^1H de (15).

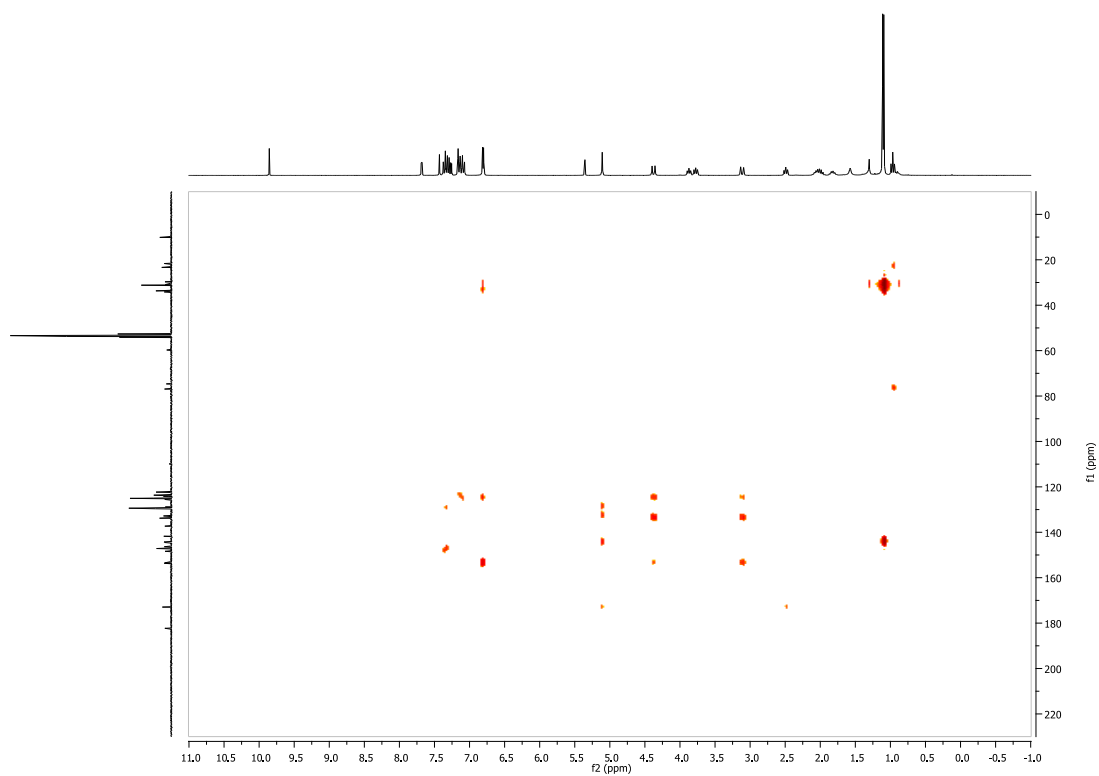


Figura 7.2.38. Espectro HMBC de **(15)**.

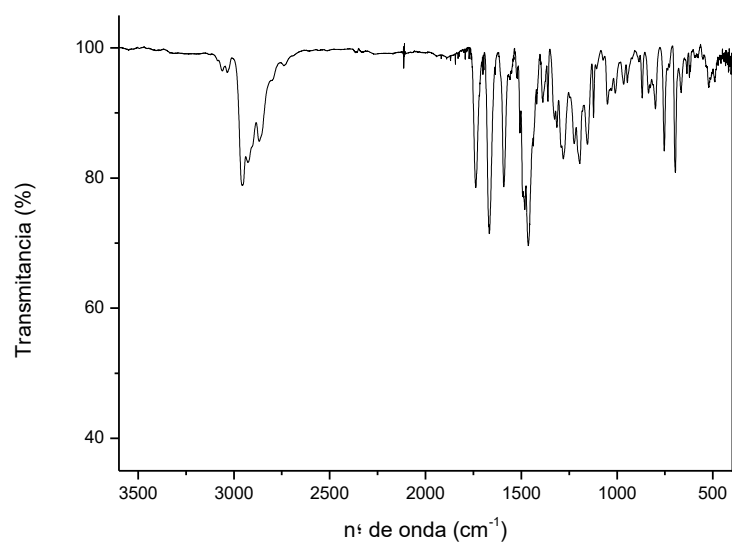


Figura 7.2.39. Espectro IR de **(15)**.

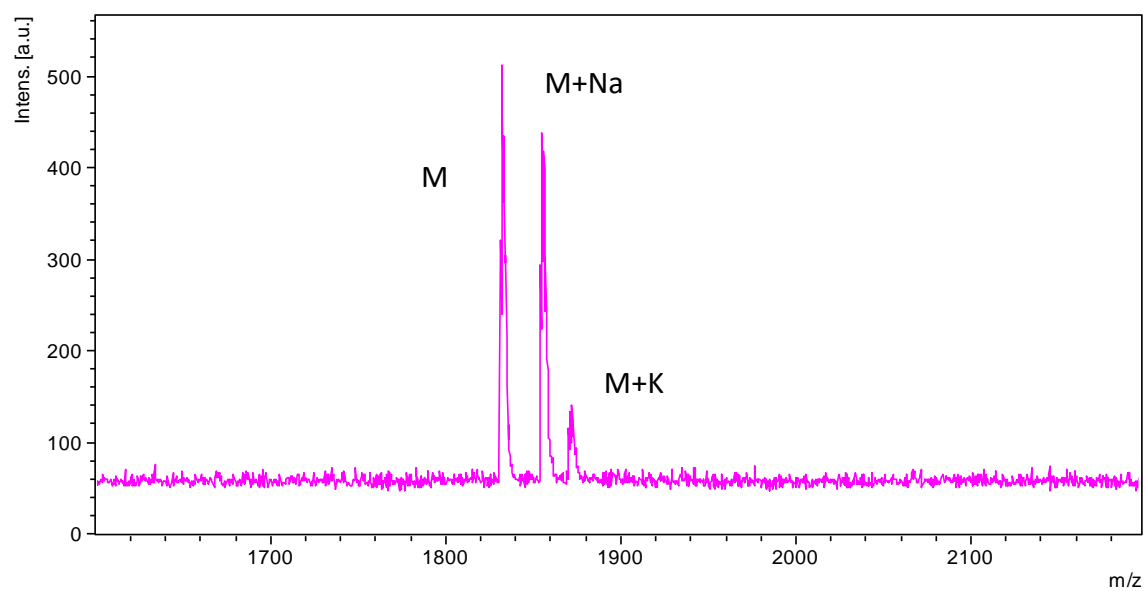
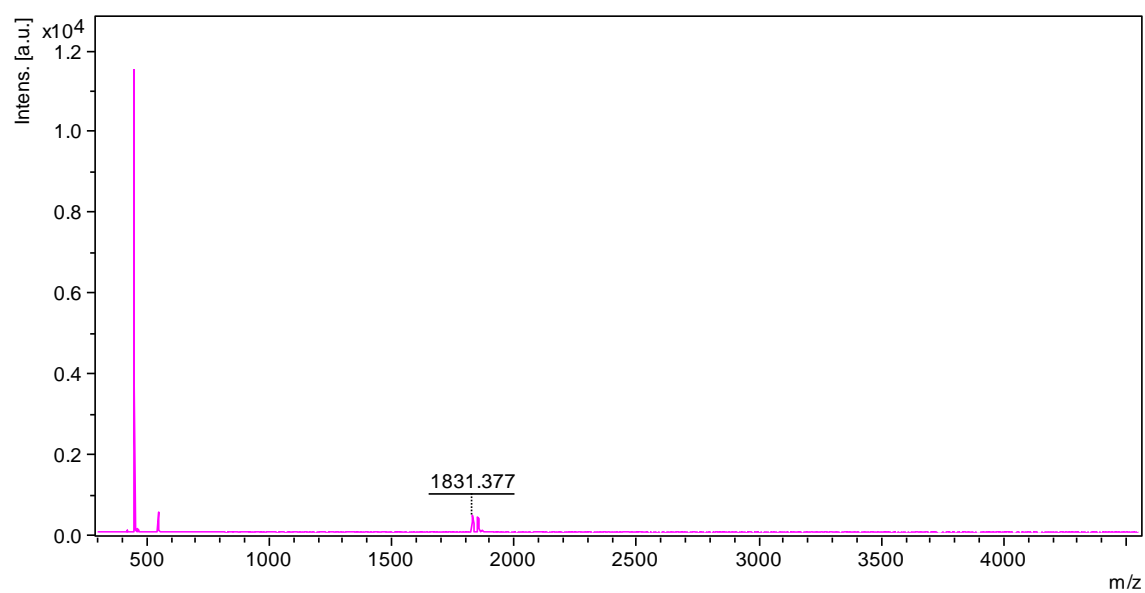


Figura 7.2.40. Espectro MALDI⁺ de **(15)**.

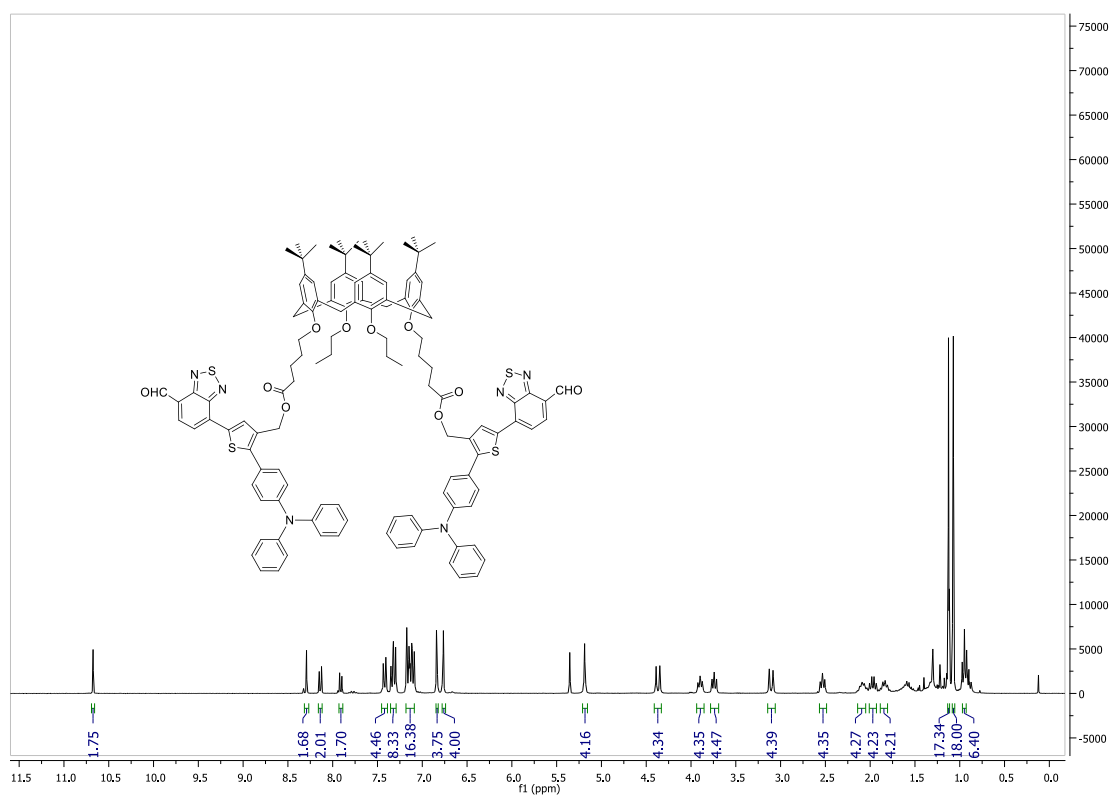


Figura 7.2.41. Espectro ^1H -RMN de (16).

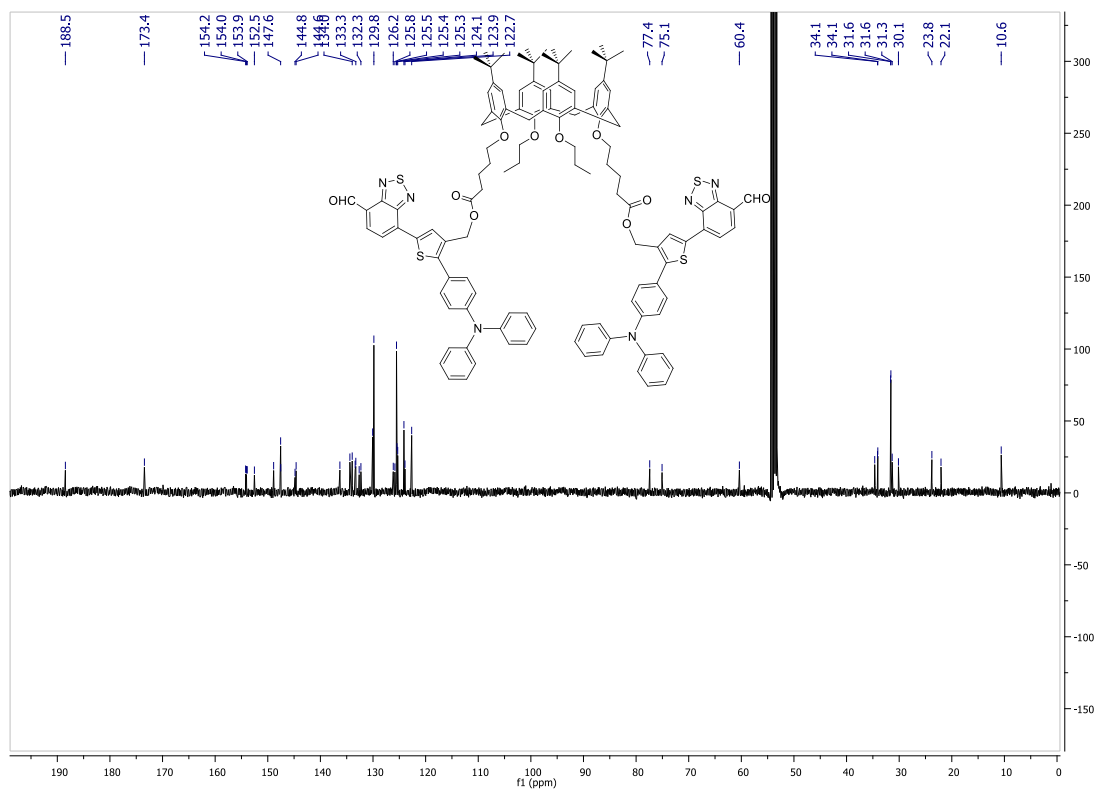


Figura 7.2.42. Espectro ^{13}C -RMN (APT) de (16).

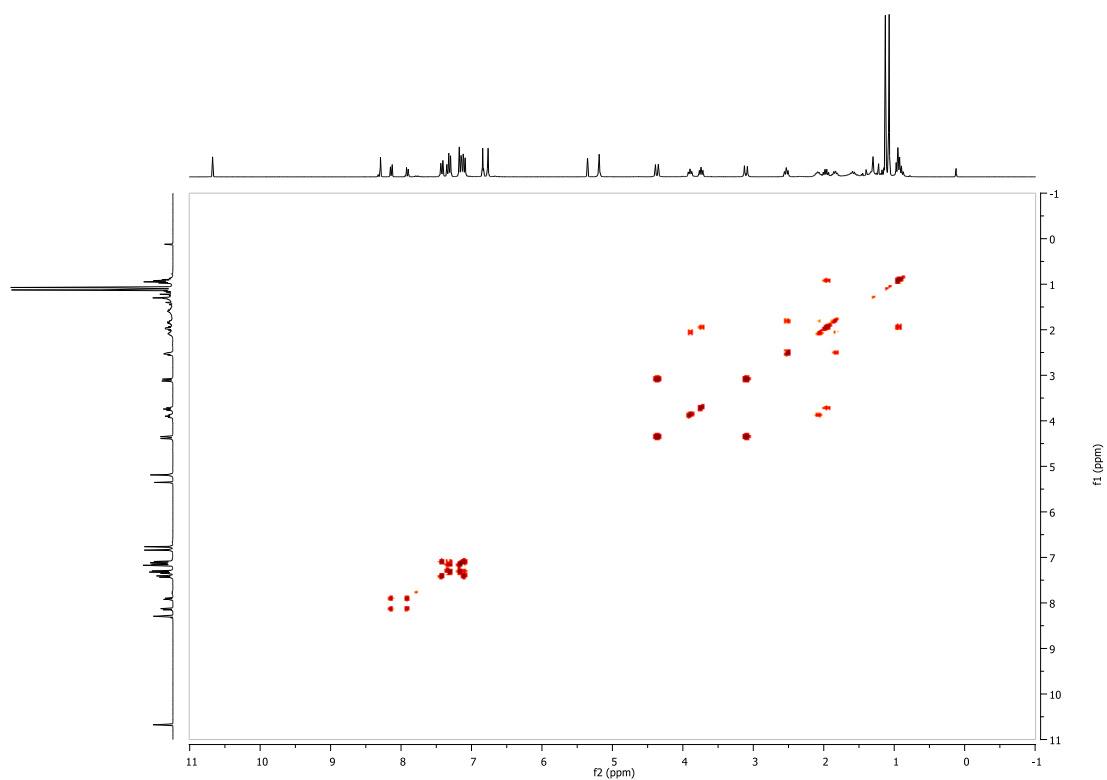


Figura 7.2.43 Espectro COSY de **(16)**.

HSQC

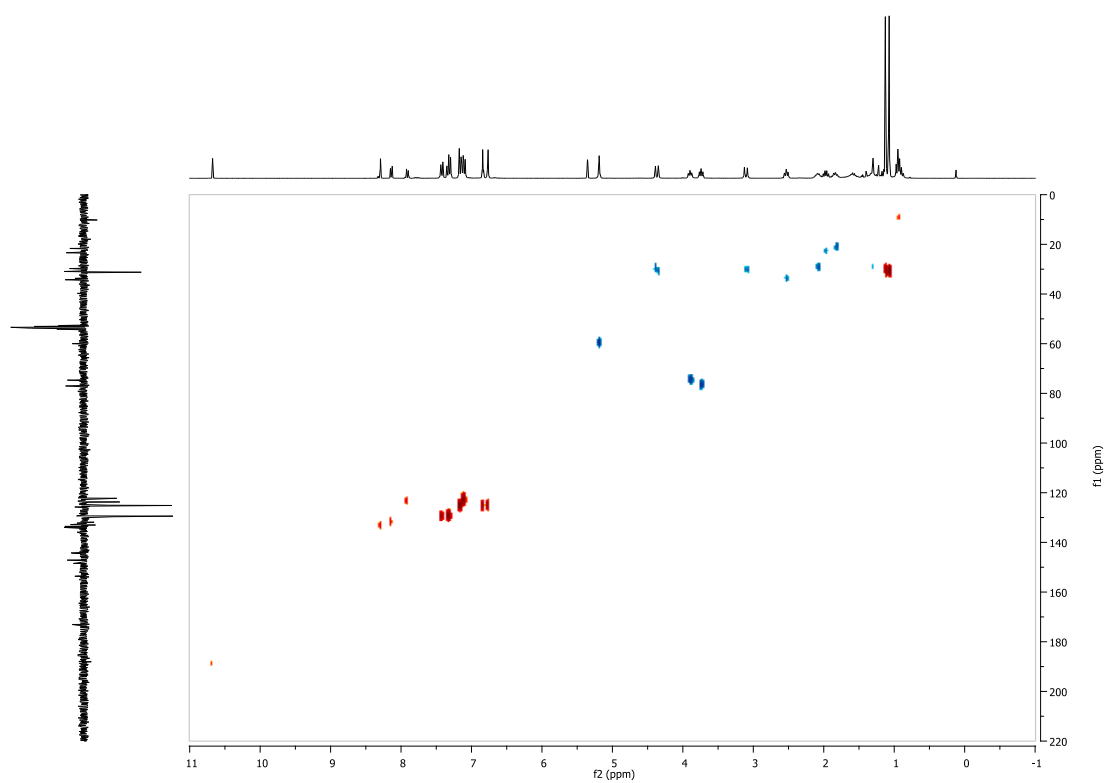


Figura 7.2.44 Espectro HSQC de **(16)**.

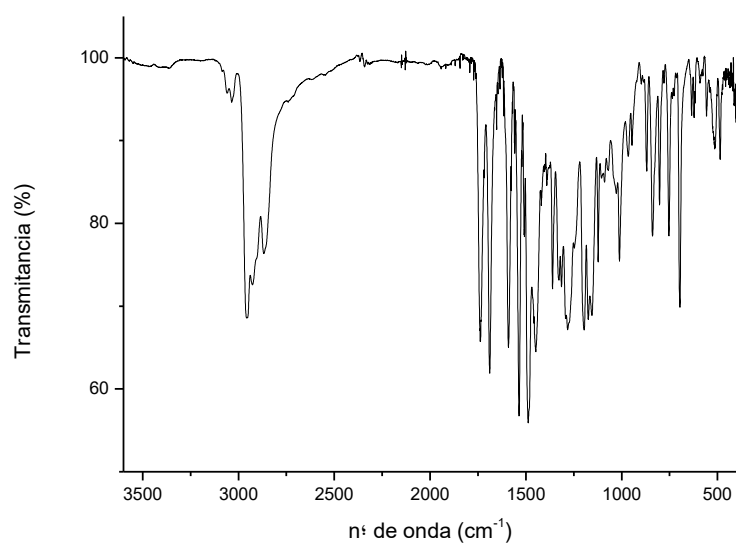


Figura 7.2.45 Espectro IR de **(16)**.

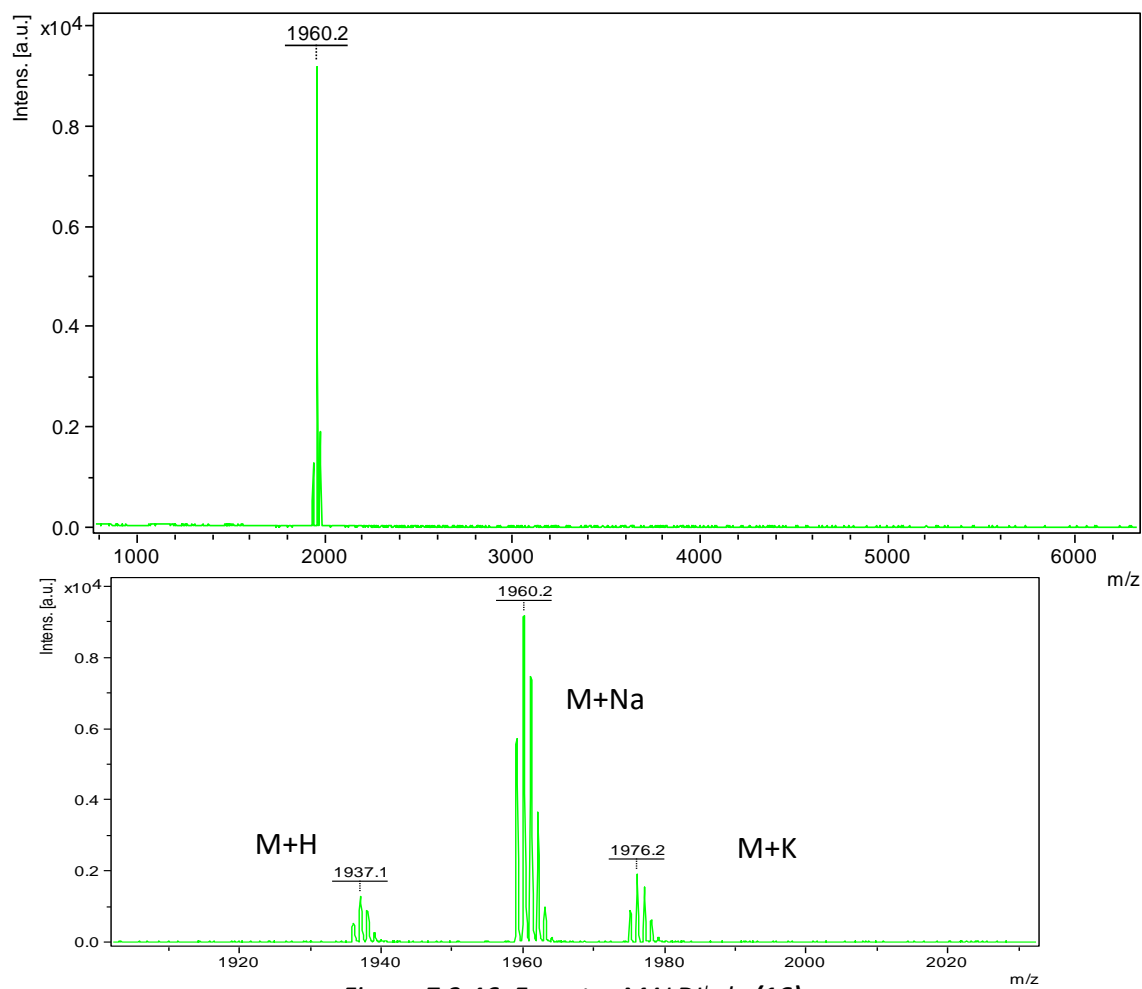


Figura 7.2.46. Espectro MALDI⁺ de **(16)**.

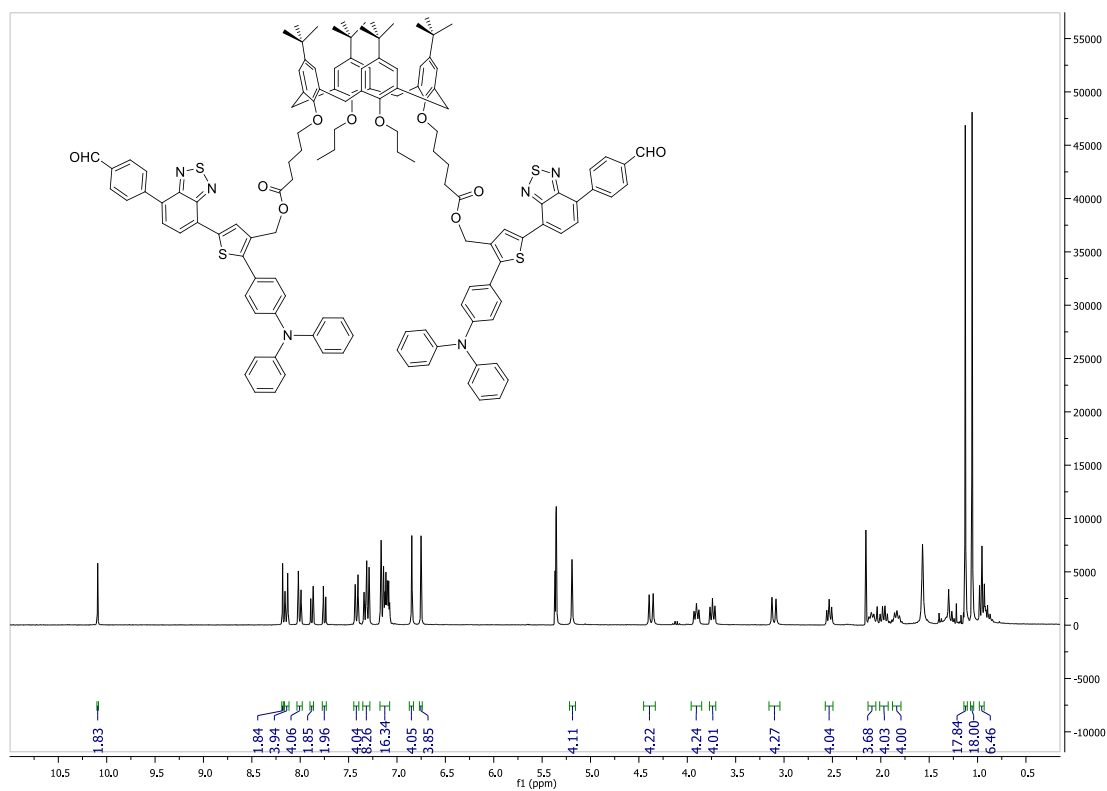


Figura 7.2.47. Espectro ¹H-RMN de (17).

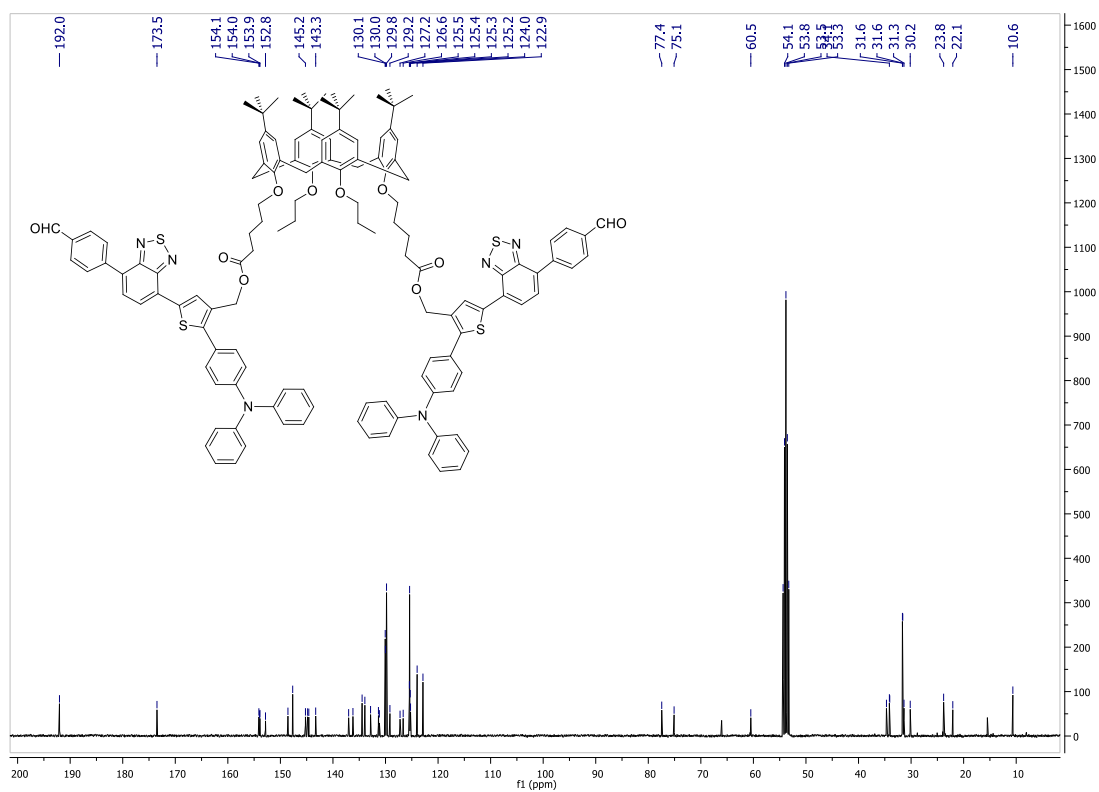


Figura 7.2.48. Espectro ¹³C-RMN de (17).

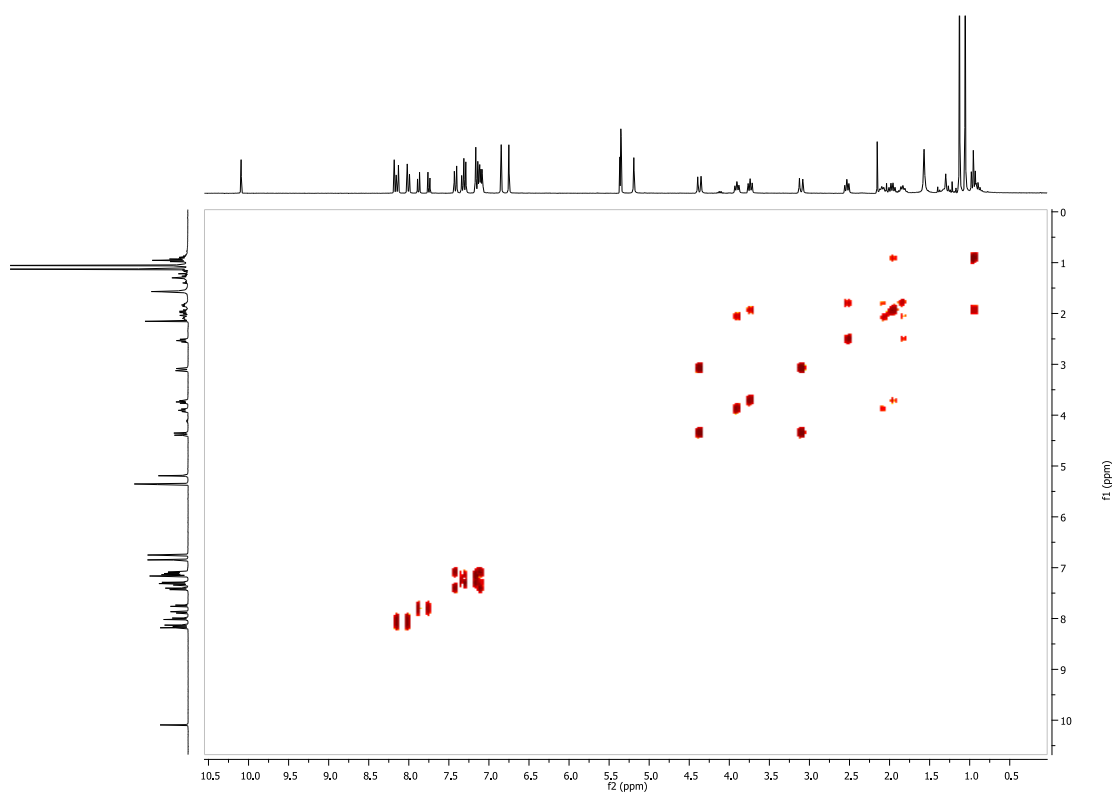


Figura 7.2.49. Espectro COSY de **(17)**.

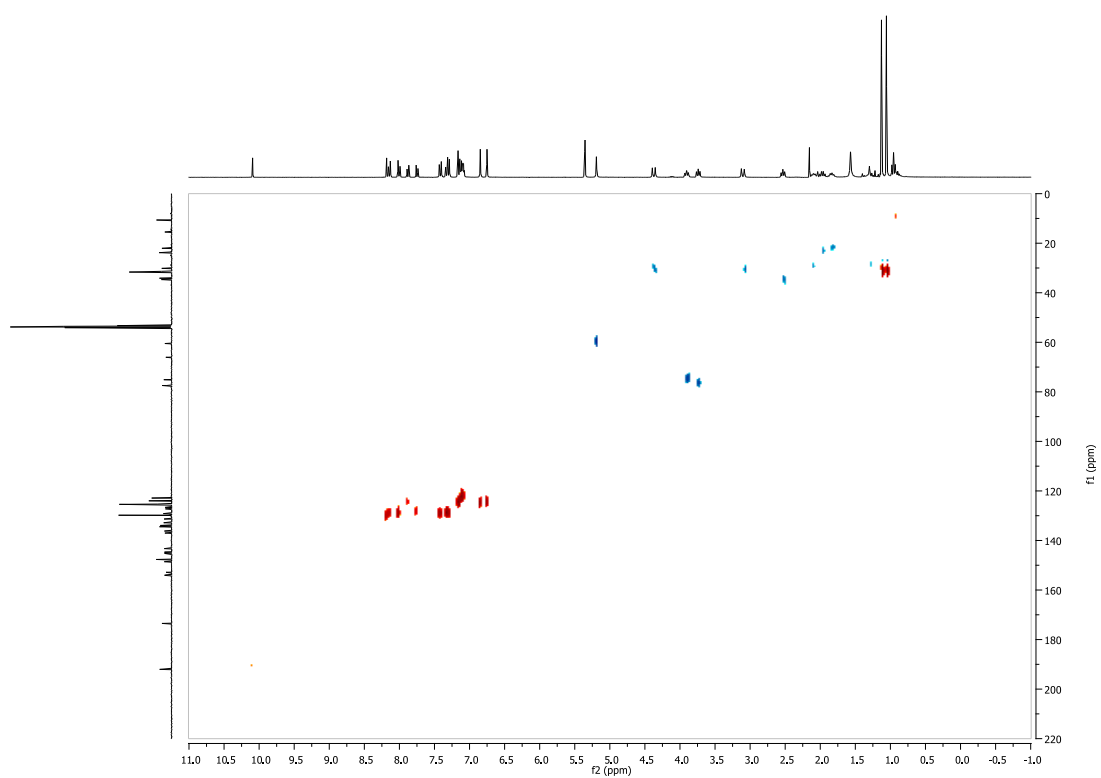


Figura 7.2.50. Espectro HSQC de **(17)**.

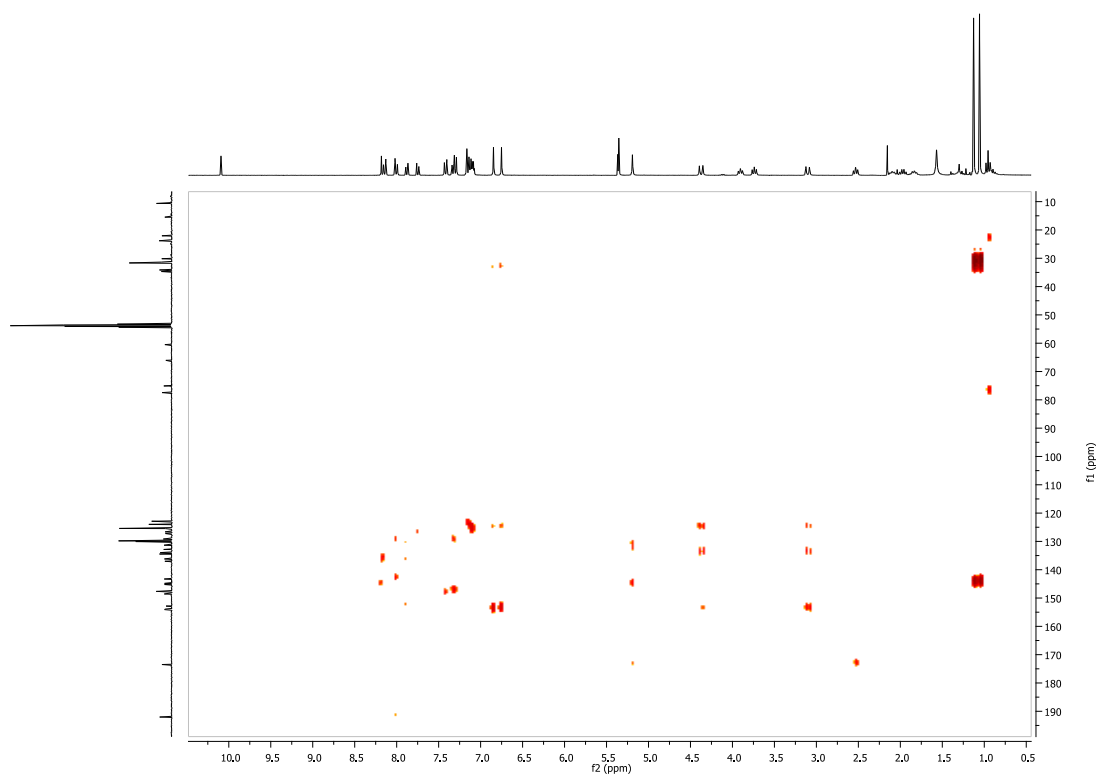


Figura 7.2.51. Espectro HMBC de **(17)**.

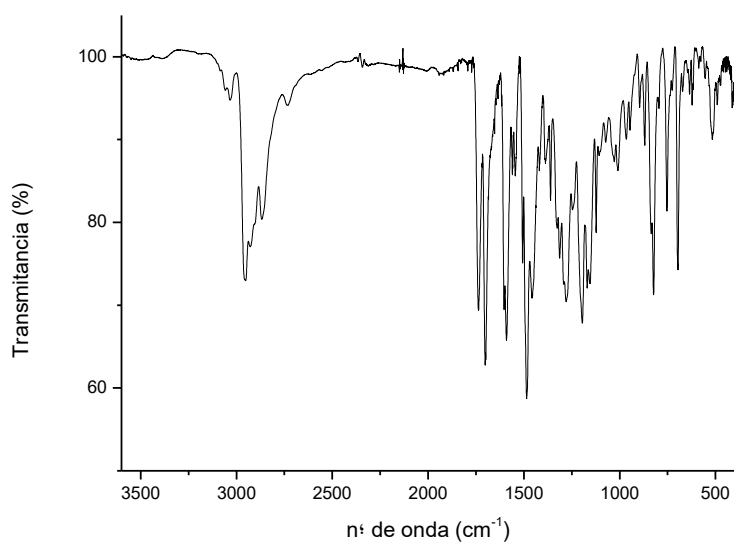


Figura 7.2.52. Espectro IR de **(17)**.

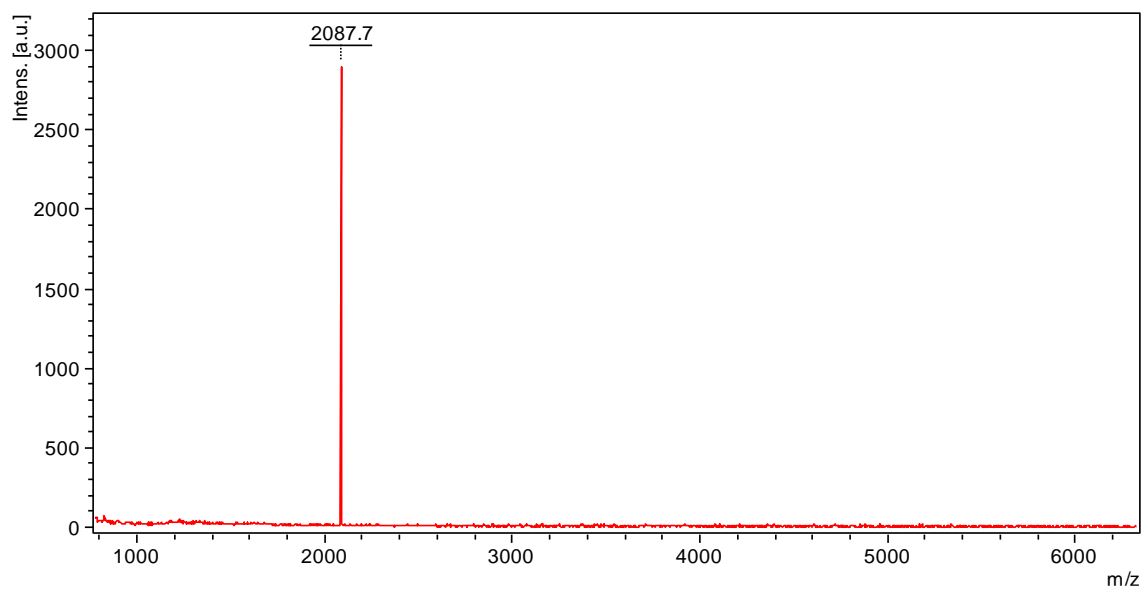


Figura 7.2.53. Espectro MALDI⁺ de **(17)**.

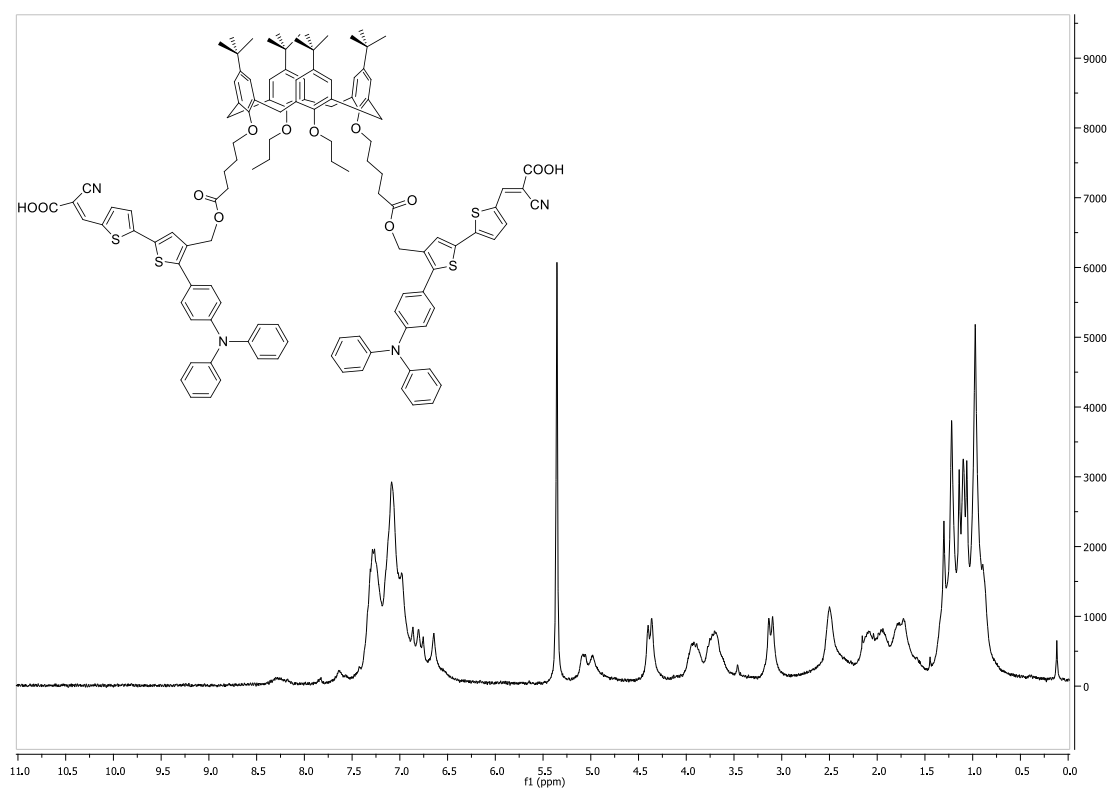


Figura 7.2.54. Espectro ¹H-RMN de **(18)**.

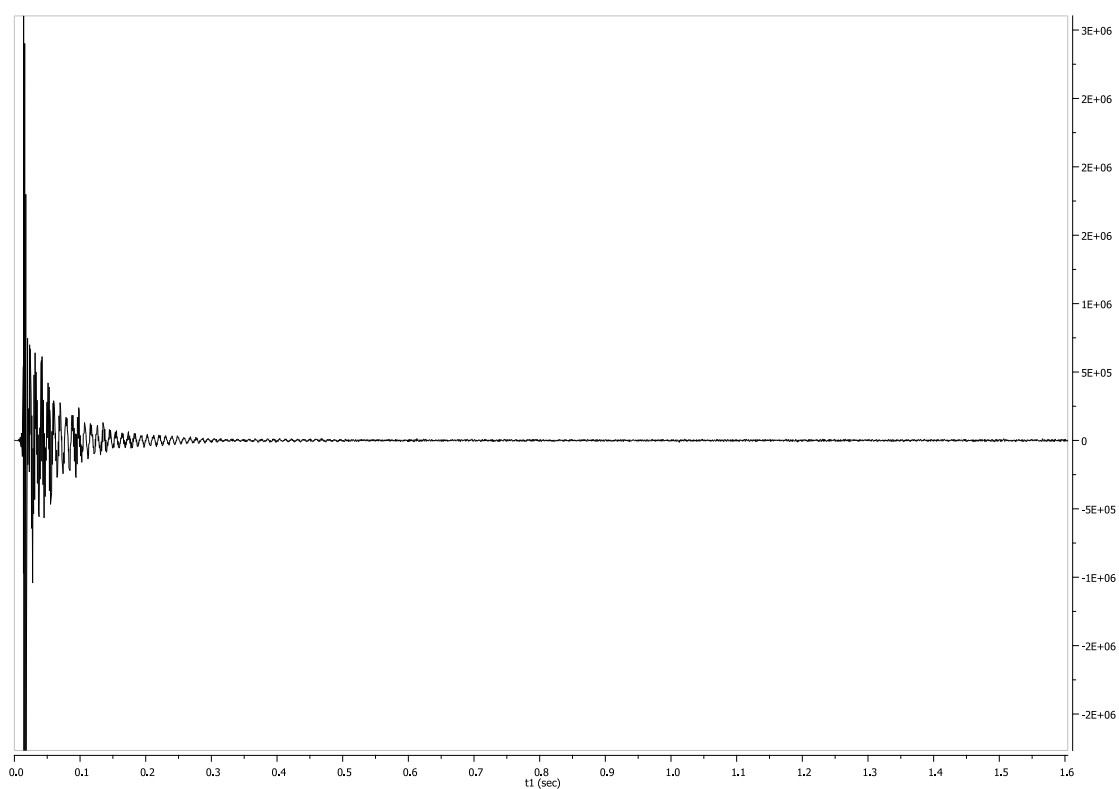


Figura 7.2.55. FID del espectro ^1H -RMN de **(18)**.

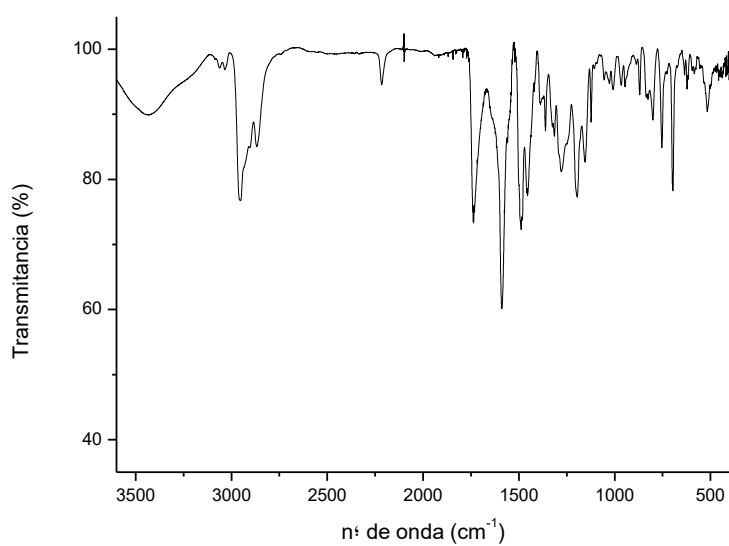


Figura 7.2.56. Espectro IR de **(18)**.

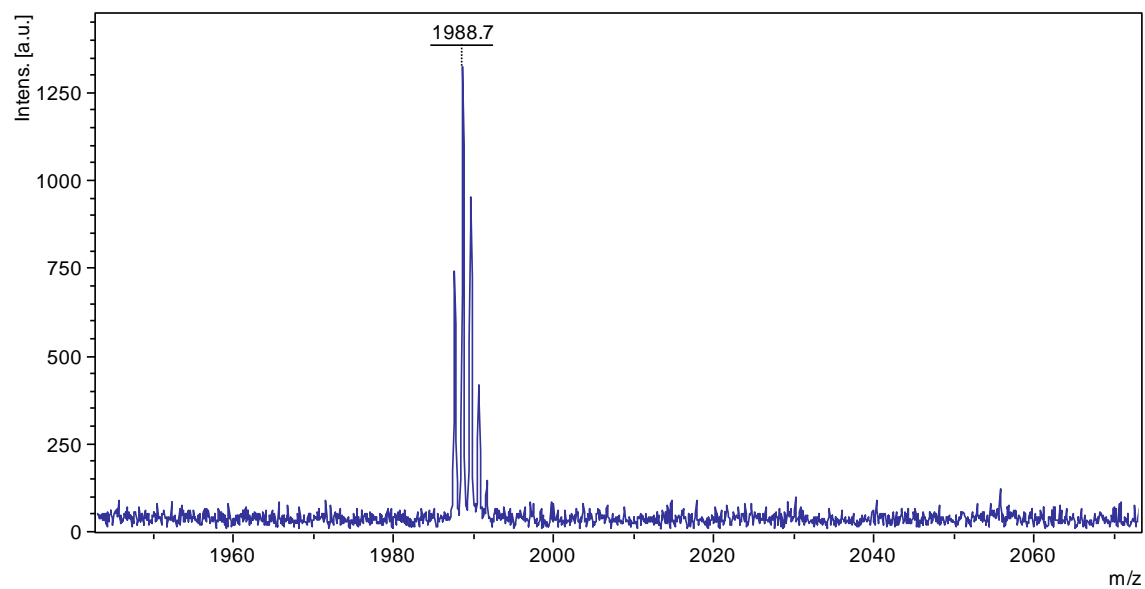
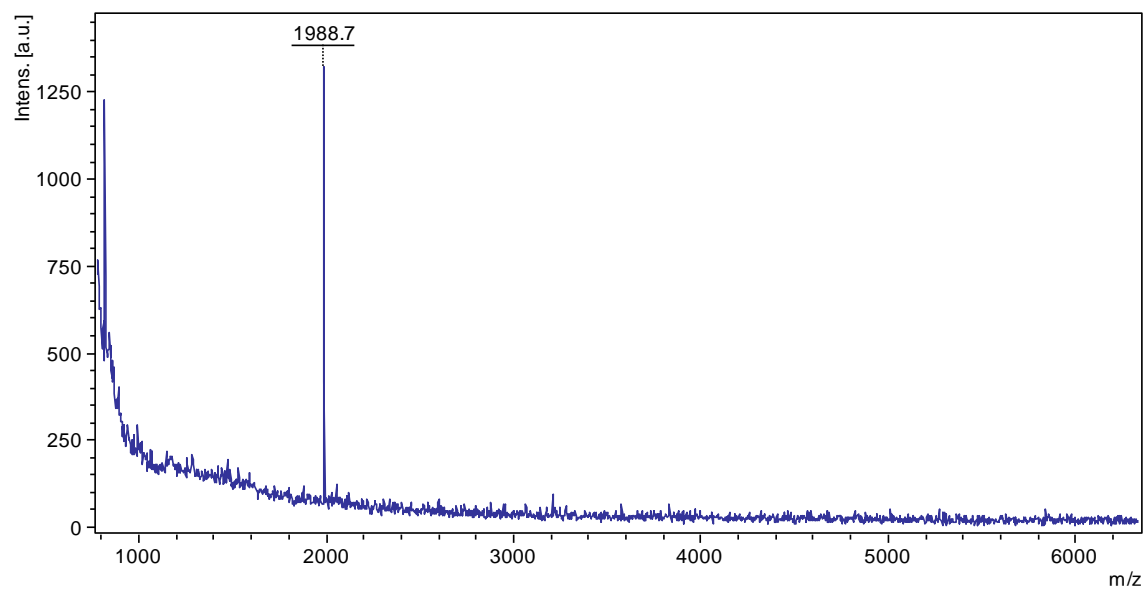


Figura 7.2.57. Espectro Maldi^+ de **(18)**.

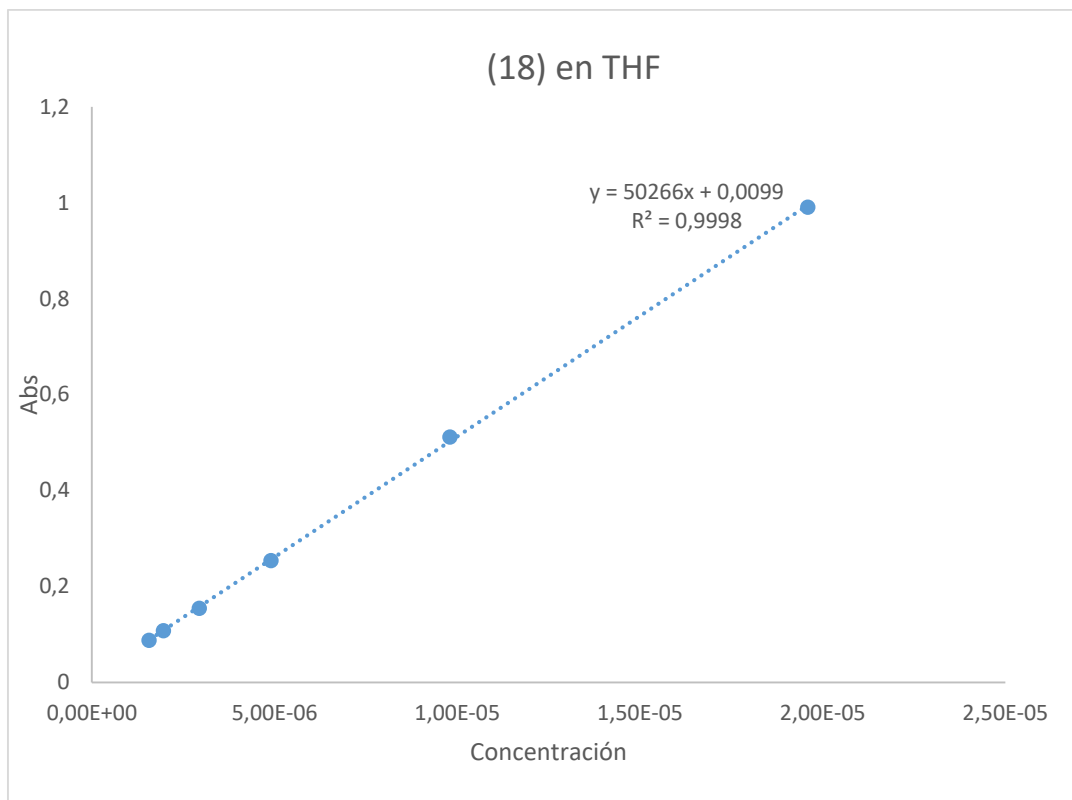


Figura 7.2.58. Recta de calibrado para determinar el coeficiente de absorción molar de **(18)** en THF.

DPV

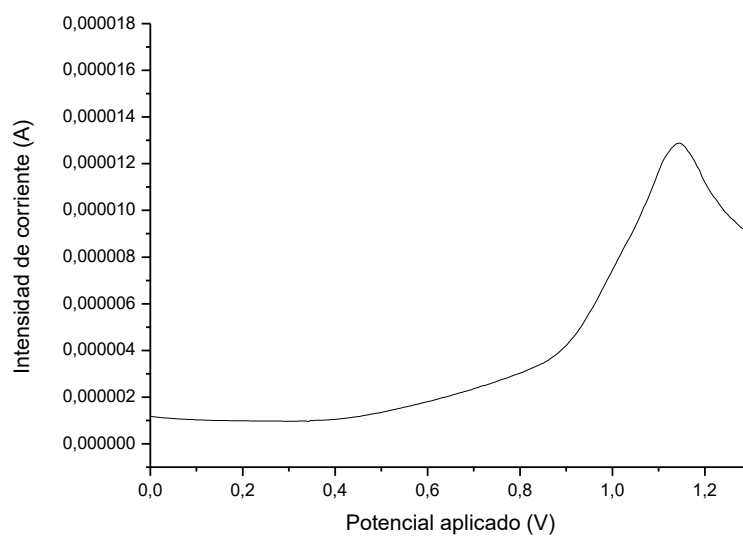


Figura 7.2.59. Voltametría de Pulso Diferencial de **(18)** en THF.

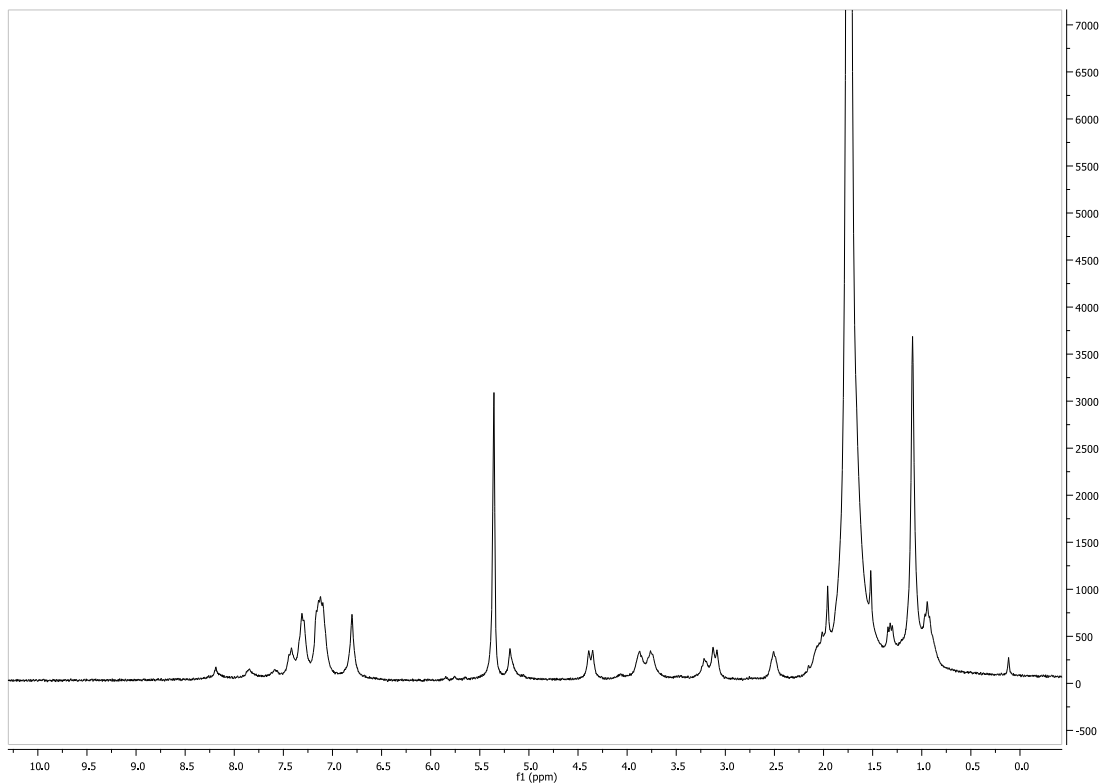


Figura 7.2.60. Espectro ^1H -RMN de (19).

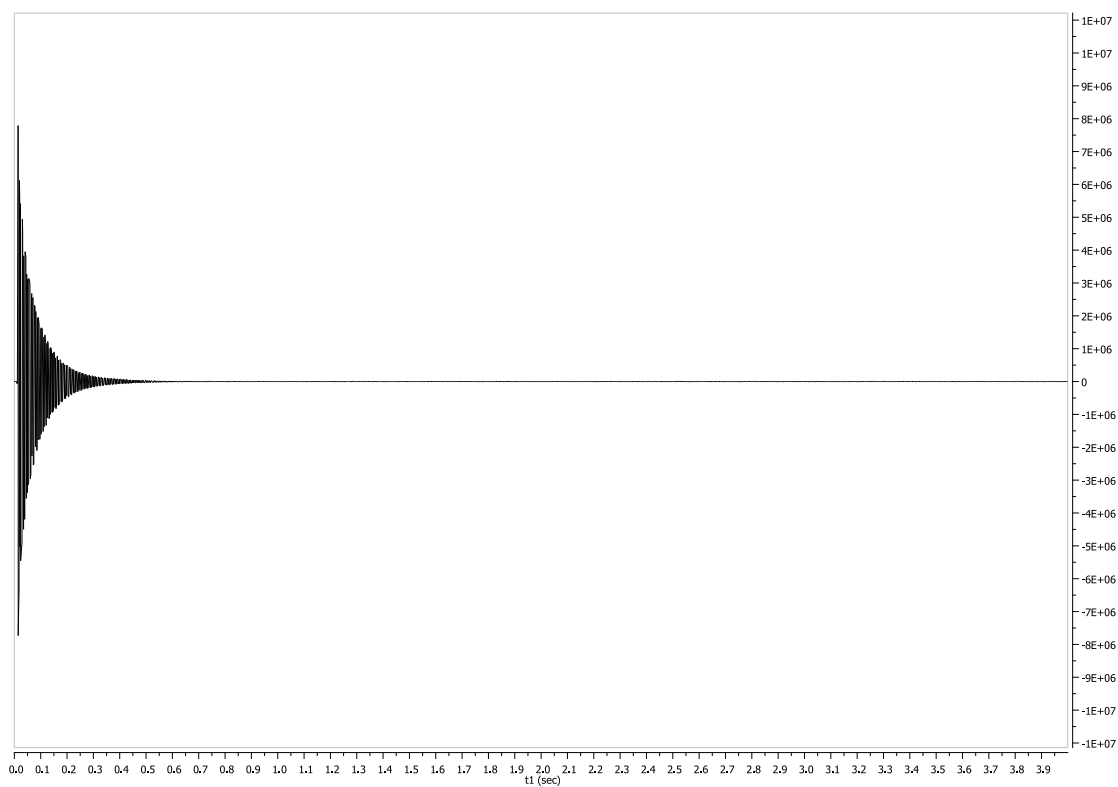


Figura 7.2.61. FID del espectro ^1H -RMN de (19).

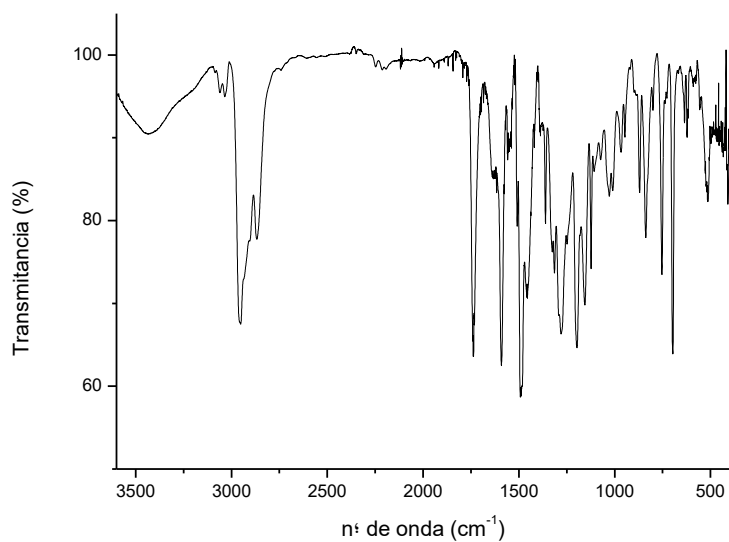


Figura 7.2.62. Espectro IR de **(19)**.

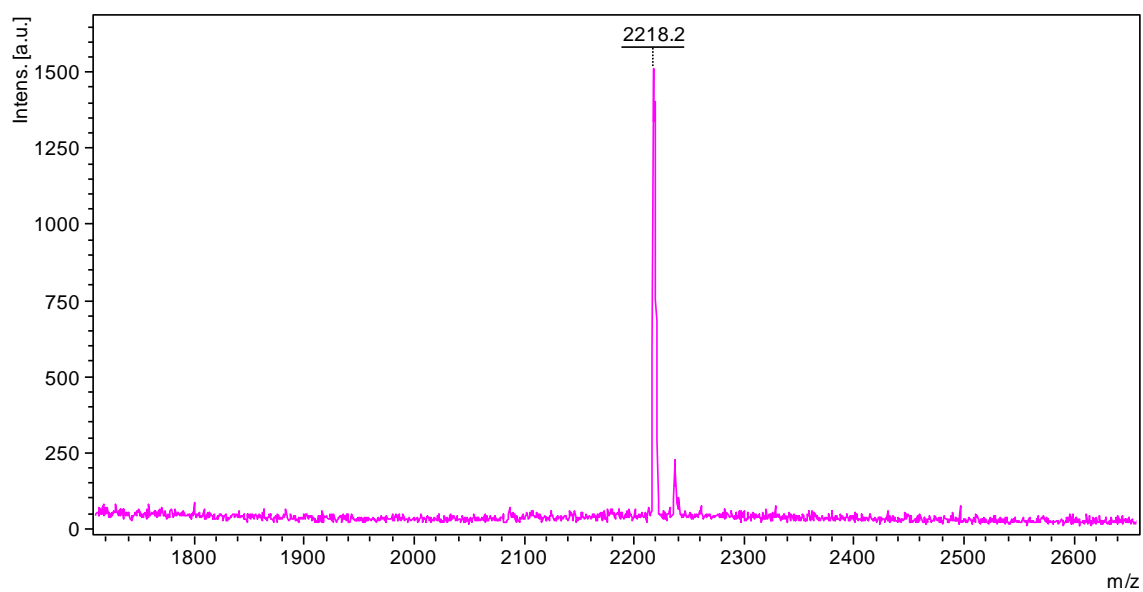


Figura 7.2.63. Espectro Maldit⁺ de **(19)**.

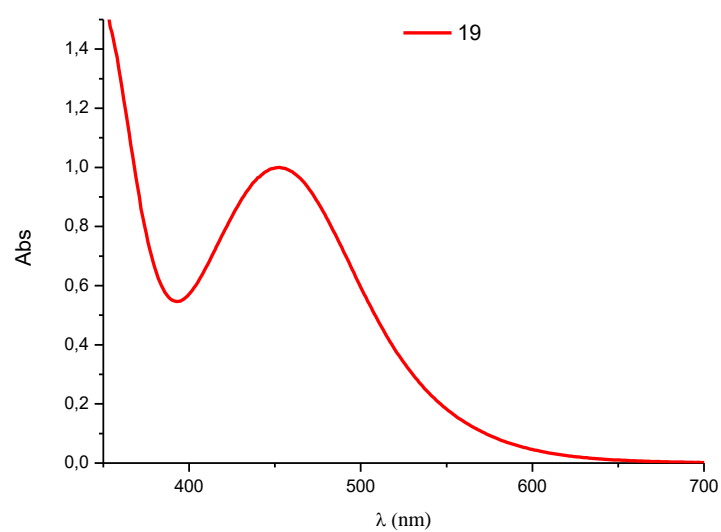


Figura 7.2.64. Espectro de absorción UV-vis de **(19)** en CH_2Cl_2 .

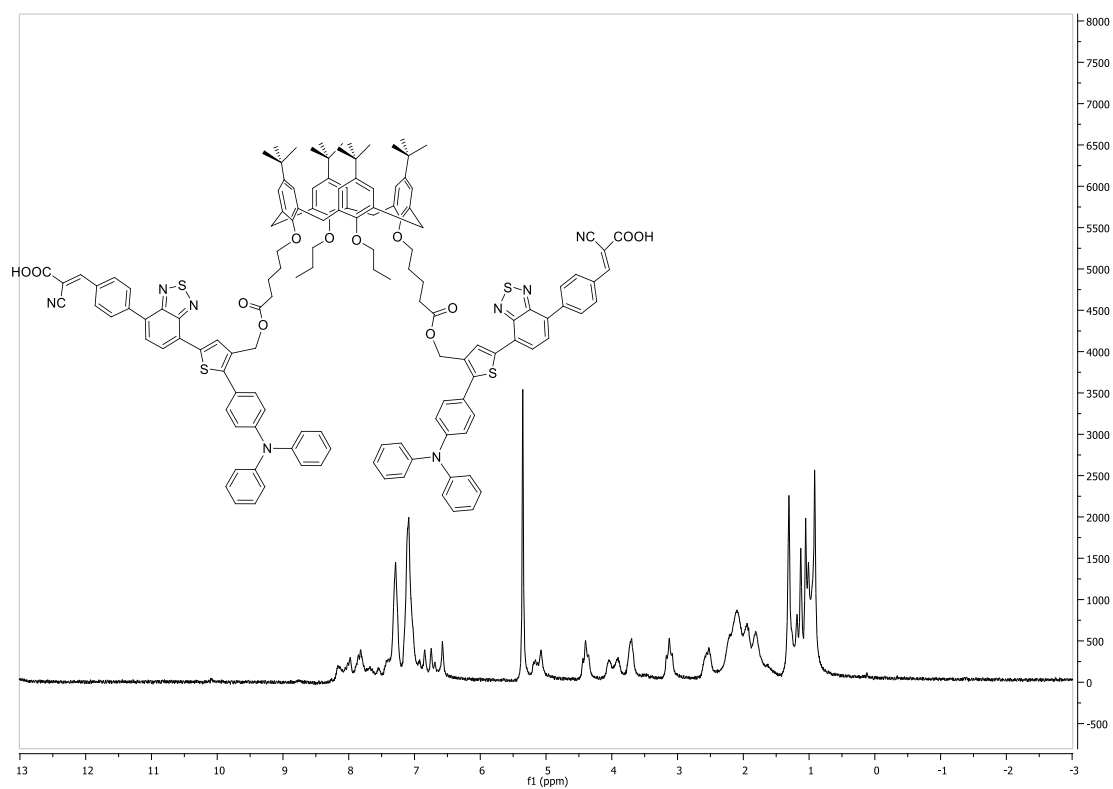


Figura 7.2.65. Espectro ^1H -RMN de **(20)**.

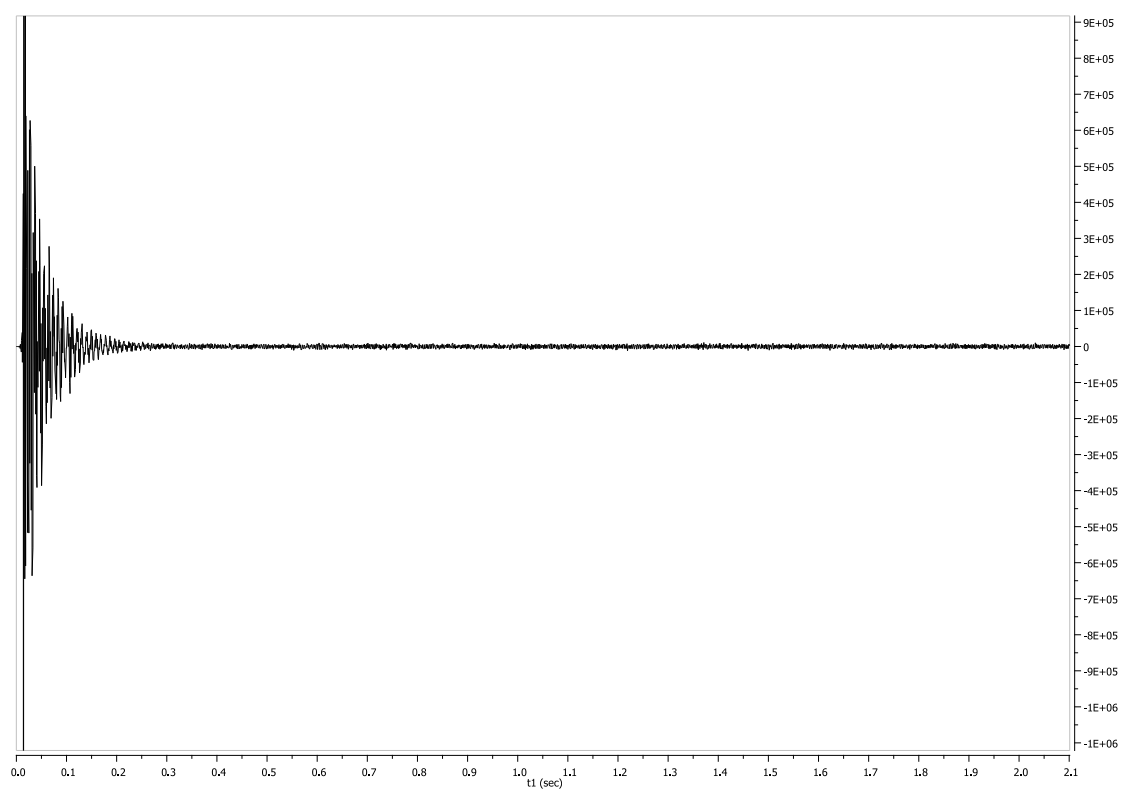


Figura 7.2.66. FID del espectro ^1H -RMN de **(20)**.

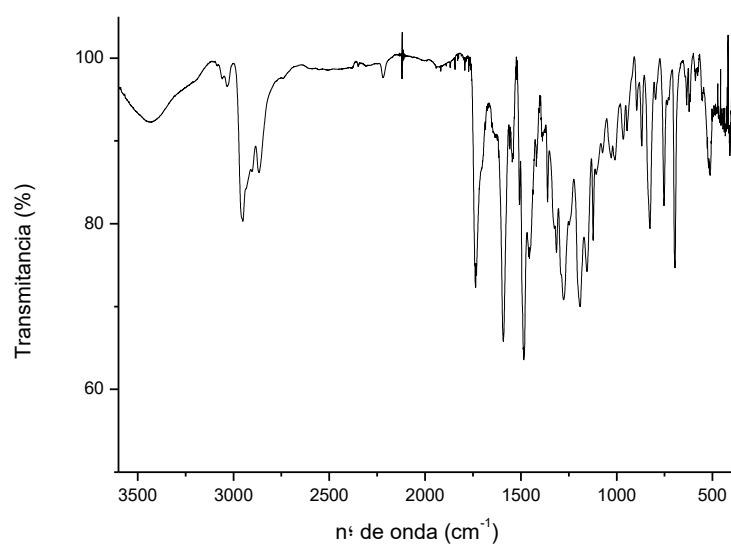


Figura 7.2.67. Espectro IR de **(20)**.

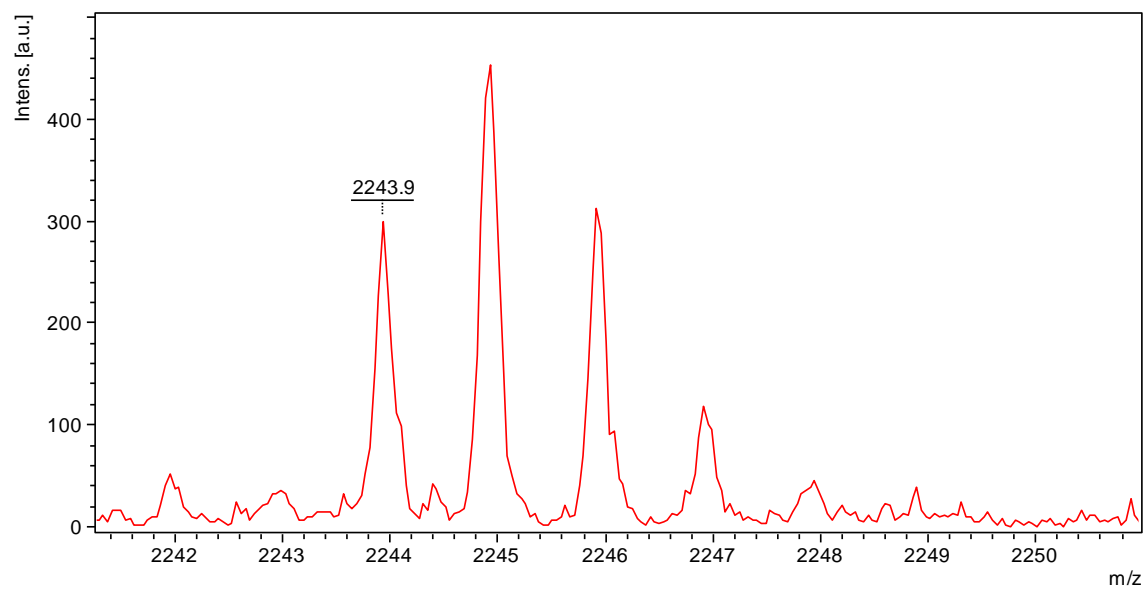
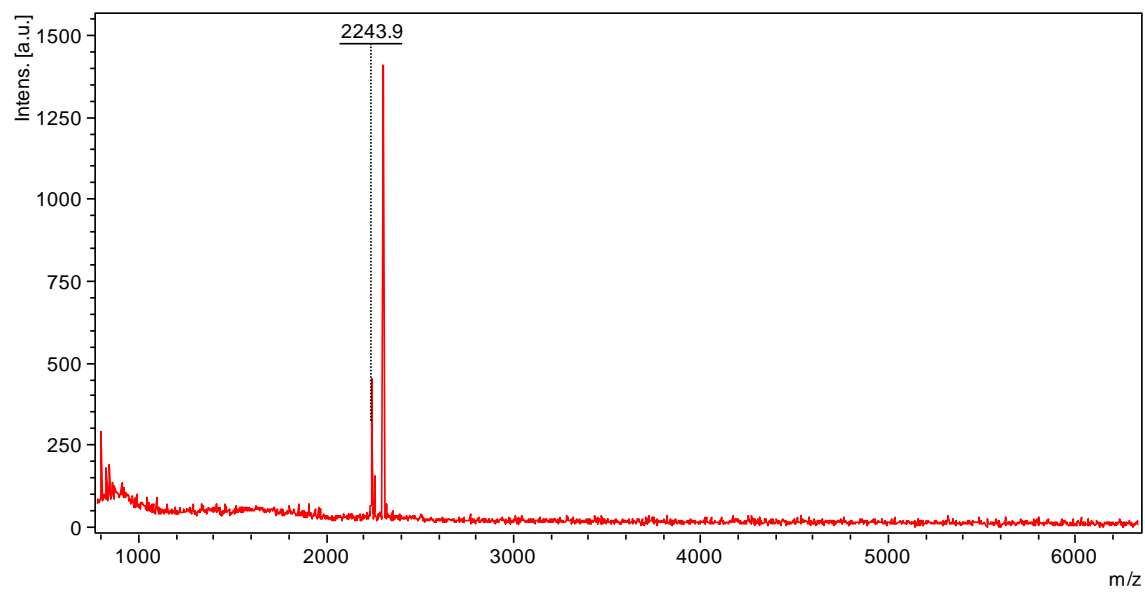


Figura 7.2.68. Espectro Maldi^+ de **(20)**.

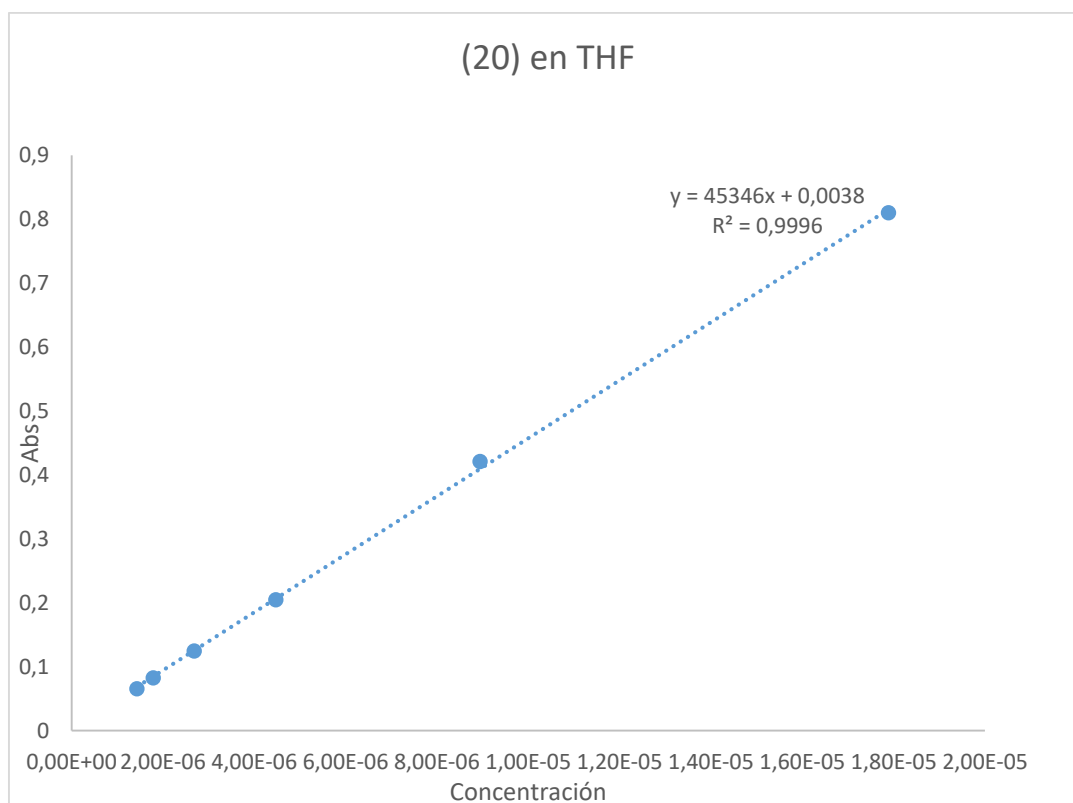


Figura 7.2.69. Recta de calibrado para determinar el coeficiente de absorción molar de **(20)** en THF.

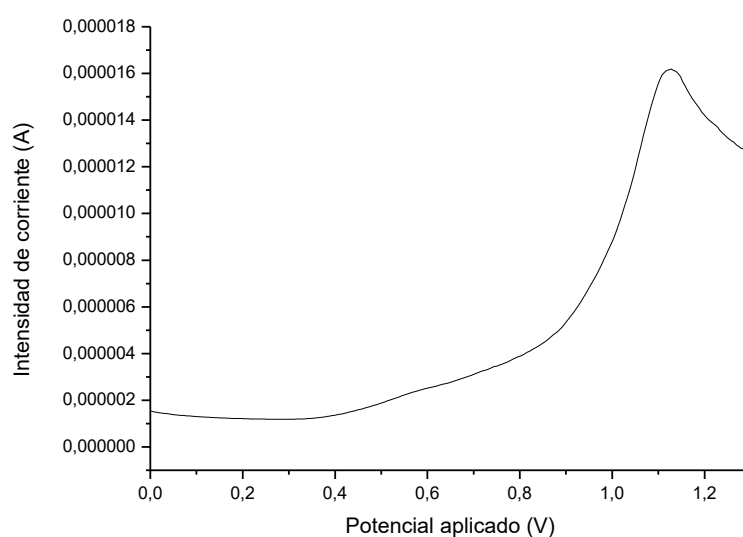


Figura 7.2.70. Voltametría de Pulso Diferencial de **(20)** en THF.

7.3 Cálculos teóricos.

7.3.1 Procedimientos

Los cálculos DFT han sido realizados usando *Gaussian 09*^[1] con integración ultrafina. Los efectos del disolvente se han estimado usando un modelo CPCM (Conductor-like Polarizable Continuum Model)^[2,3]. Las geometrías en el equilibrio se optimizaron empleando el funcional híbrido M06-2x^[4] y la base de tamaño medio 6-31G*^[5]. Los mínimos en energía se caracterizaron por cálculos de frecuencia. Las energías de excitación se calcularon mediante cálculos “single point” dependientes del tiempo utilizando el modelo M06-2x/6-311G (2d,p). Los espectros de emisión se calcularon con las energías de excitación verticales usando la geometría del estado excitado. Debido al gran coste computacional requerido para calcular las energías vibracionales de los estados excitados, E_{0-0} se aproximó a la energía de excitación adiabática (E_{Adia}). El potencial de oxidación del estado fundamental se calculó utilizando las energías del método M06-2x/6-311-G (2d, p) y las correcciones térmicas a la energía libre de Gibbs del nivel M06-2x/6-31G*. Los potenciales de oxidación del estado excitado se estimaron de la diferencia entre E_{ox} y E_{0-0} . Los orbitales moleculares se obtuvieron utilizando el software *Avogadro*.^[6]

[1] Gaussian 09, Revision A.02, Frisch, M. J.; Trucks, G. W.; Schlegel, H. B.; Scuseria, G. E.; Robb, M. A.; Cheeseman, J. R.; Scalmani, G.; Barone, V.; Mennucci, B.; Petersson, G. A.; Nakatsuji, H.; Caricato, M.; Li, X.; Hratchian, H. P.; Izmaylov, A. F.; Bloino, J.; Zheng, G.; Sonnenberg, J. L.; Hada, M.; Ehara, M.; Toyota, K.; Fukuda, R.; Hasegawa, J.; Ishida, M.; Nakajima, T.; Honda, Y.; Kitao, O.; Nakai, H.; Vreven, T.; Montgomery, Jr. J. A.; Peralta, J. E.; Ogliaro, F.; Bearpark, M.; Heyd, J. J.; Brothers, E.; Kudin, K. N.; Staroverov, V. N.; Kobayashi, R.; Normand, J.; Raghavachari, K.; Rendell, A.; Burant, J. C.; Iyengar, S. S.; Tomasi, J.; Cossi, M.; Rega, N.; Millam, J. M.; Klene, M.; Knox, J. E.; Cross, J. B.; Bakken, V.; Adamo, C.; Jaramillo, J.; Gomperts, R.; Stratmann, R. E.; Yazyev, O.; Austin, A. J.; Cammi, R.; Pomelli, C.; Ochterski, J. W.; Martin, R. L.; Morokuma, K.; Zakrzewski, V. G.; Voth, G. A.; Salvador, P.; Dannenberg, J. J.; Dapprich, S.; Daniels, A. D.; Farkas, O.; Foresman, J. B.; Ortiz, J. V.; Cioslowski, J.; Fox, D. J. Gaussian, Inc., Wallingford CT, 2009

[2] Barone, V.; Cossi, M. *J Phys Chem A* **1998**, 102, 1995-2001.

- [3] Cossi, M.; Rega, N.; Scalmani, G.; Barone, V. *J Comput Chem* **2003**, 24, 669-681.
- [4] Zhao, Y.; Truhlar, D. G. *Theor Chem Account* **2008**, 120, 215–241.
- [5] Hariharan, P. C.; Pople, J. A. *Theor. Chim. Acta* **1973**, 28, 213-222.
- [6] Hanwell, M. D.; Curtis, D. E.; Lonie, D. C.; Vandermeersch, T.; Zurek, E.; Hutchison, G. R. *J Cheminf* **2012**, 4, 17.

7.3.2 Geometrías

Referencia	Geometría	
AcTPA	Estado fundamental	7.3.2.1
	Estado excitado	7.3.2.2
	Estado oxidado	7.3.2.3
AcTPA-A	Estado fundamental	7.3.2.4
	Estado excitado	7.3.2.5
	Estado oxidado	7.3.2.6
AcTPA-B	Estado fundamental	7.3.2.7
	Estado excitado	7.3.2.8
	Estado oxidado	7.3.2.9
AcTPA-C	Estado fundamental	7.3.2.10
	Estado excitado	7.3.2.11
	Estado oxidado	7.3.2.12

Standard orientation:

Center Number	Atomic Number	Atomic Type	Coordinates (Angstroms)		
			X	Y	Z
1	7	0	3.991450	-0.437832	0.045791
2	6	0	4.787326	-0.038034	1.153193
3	6	0	4.396136	-0.354746	2.458317
4	6	0	5.978840	0.662610	0.941642
5	6	0	5.182019	0.040327	3.536006
6	1	0	3.476088	-0.908216	2.620329
7	6	0	6.768369	1.037059	2.024175
8	1	0	6.279791	0.907213	-0.072468
9	6	0	6.372773	0.733794	3.325689
10	1	0	4.867299	-0.209424	4.544463
11	1	0	7.691765	1.579765	1.847563
12	1	0	6.987284	1.033465	4.168211
13	6	0	4.634197	-0.991518	-1.094265
14	6	0	4.265726	-0.588603	-2.382110
15	6	0	5.654725	-1.933842	-0.932510
16	6	0	4.901832	-1.135935	-3.491585
17	1	0	3.480739	0.151317	-2.506049
18	6	0	6.298588	-2.461715	-2.046992
19	1	0	5.938526	-2.244642	0.068341
20	6	0	5.923141	-2.070868	-3.331073
21	1	0	4.605965	-0.816982	-4.486144
22	1	0	7.090059	-3.191723	-1.908925
23	1	0	6.422543	-2.489751	-4.198493
24	6	0	2.597330	-0.278857	0.073051
25	6	0	1.760014	-1.172446	-0.615013
26	6	0	2.007349	0.773499	0.790230
27	6	0	0.385106	-1.007282	-0.595180
28	1	0	2.195729	-1.996030	-1.170247
29	6	0	0.629404	0.922919	0.816596
30	1	0	2.634510	1.471822	1.333595
31	6	0	-0.210780	0.044607	0.116957
32	1	0	-0.237816	-1.702528	-1.150956
33	1	0	0.200707	1.725612	1.409274
34	6	0	-1.667363	0.211417	0.145160
35	16	0	-2.684187	-1.182801	0.239877

36	6	0	-3.786125	1.134288	0.154442
37	6	0	-4.129414	-0.207318	0.216315
38	1	0	-4.531638	1.920939	0.113589
39	6	0	-5.516812	-0.574122	0.253811
40	1	0	-6.140028	0.318633	0.230338
41	6	0	-6.238514	-1.730040	0.313750
42	6	0	-5.783549	-3.136187	0.363884
43	8	0	-6.534788	-4.081668	0.425032
44	8	0	-4.452589	-3.254091	0.334266
45	1	0	-4.229228	-4.202294	0.372506
46	6	0	-7.669401	-1.600522	0.335873
47	7	0	-8.820882	-1.477998	0.352723
48	6	0	-2.399914	1.384596	0.111897
49	6	0	-1.816951	2.762795	-0.002212
50	1	0	-1.655323	3.225181	0.977703
51	1	0	-0.856239	2.748531	-0.526074
52	8	0	-2.753019	3.561678	-0.734473
53	6	0	-2.411816	4.855176	-0.885083
54	8	0	-1.384679	5.315757	-0.447149
55	6	0	-3.461839	5.607865	-1.653429
56	1	0	-3.591917	5.154250	-2.638971
57	1	0	-4.417982	5.545139	-1.128184
58	1	0	-3.159585	6.648429	-1.757663

7.3.2.1 Geometría del estado fundamental del colorante AcTPA

Standard orientation:

Center Number	Atomic Number	Atomic Type	Coordinates (Angstroms)		
			X	Y	Z
1	7	0	-3.995636	-0.408607	-0.015582
2	6	0	-4.866237	0.579279	-0.552741
3	6	0	-4.565032	1.184028	-1.778478
4	6	0	-6.029759	0.929883	0.141010
5	6	0	-5.422313	2.147196	-2.296915
6	1	0	-3.672709	0.885292	-2.319793
7	6	0	-6.881750	1.889135	-0.391710
8	1	0	-6.250086	0.456820	1.092597
9	6	0	-6.581225	2.502949	-1.607961
10	1	0	-5.189571	2.610904	-3.249766
11	1	0	-7.779953	2.164794	0.150911
12	1	0	-7.249369	3.252690	-2.018256
13	6	0	-4.571328	-1.585634	0.537397
14	6	0	-4.096610	-2.089741	1.753727
15	6	0	-5.621991	-2.224607	-0.130206
16	6	0	-4.665988	-3.238761	2.288972
17	1	0	-3.297936	-1.571142	2.274843
18	6	0	-6.187138	-3.368690	0.419391
19	1	0	-5.978597	-1.827047	-1.075030
20	6	0	-5.710998	-3.881545	1.626176
21	1	0	-4.299696	-3.624501	3.234596
22	1	0	-6.997183	-3.866881	-0.102899
23	1	0	-6.154866	-4.776317	2.049588
24	6	0	-2.630162	-0.231173	-0.031131
25	6	0	-1.747460	-1.343362	-0.068419
26	6	0	-2.061811	1.071991	-0.010858
27	6	0	-0.392683	-1.158744	-0.083868
28	1	0	-2.155816	-2.346778	-0.112310
29	6	0	-0.704717	1.249473	-0.014741
30	1	0	-2.714591	1.936310	0.035026
31	6	0	0.207781	0.145130	-0.048640
32	1	0	0.239874	-2.039046	-0.126303
33	1	0	-0.338963	2.265842	0.006563
34	6	0	1.615355	0.286438	-0.056840
35	16	0	2.615846	-1.151775	-0.301753
36	6	0	3.788938	1.144544	0.019526
37	6	0	4.102596	-0.230596	-0.179709
38	1	0	4.568785	1.887036	0.132648
39	6	0	5.429198	-0.676852	-0.159432
40	1	0	6.119229	0.137695	0.056081
41	6	0	6.065352	-1.924555	-0.282842
42	6	0	5.537383	-3.200104	-0.741651
43	8	0	6.129456	-4.264899	-0.690478
44	8	0	4.305432	-3.101150	-1.285759
45	1	0	4.029906	-4.001638	-1.533203

46	6	0	7.449728	-1.968750	0.046948
47	7	0	8.580363	-1.979709	0.318946
48	6	0	2.447652	1.440872	0.088227
49	6	0	1.949870	2.836854	0.334040
50	1	0	1.409667	3.234187	-0.532695
51	1	0	1.275189	2.876099	1.196069
52	8	0	3.077105	3.672528	0.590944
53	6	0	2.788080	4.965515	0.834180
54	8	0	1.658365	5.392388	0.836099
55	6	0	4.036581	5.760539	1.092710
56	1	0	4.571108	5.337957	1.946859
57	1	0	4.696165	5.701644	0.223517
58	1	0	3.772066	6.797469	1.292027

7.3.2.2 Geometría del estado excitado del colorante AcTPA

Standard orientation:

Center Number	Atomic Number	Atomic Type	Coordinates (Angstroms)		
			X	Y	Z
1	7	0	-3.985281	-0.432234	-0.044641
2	6	0	-4.767413	-0.050227	-1.154367
3	6	0	-4.295482	-0.294791	-2.454739
4	6	0	-6.012446	0.565198	-0.943845
5	6	0	-5.074356	0.081161	-3.537802
6	1	0	-3.348470	-0.803877	-2.599531
7	6	0	-6.774254	0.939809	-2.039211
8	1	0	-6.349162	0.770809	0.066571
9	6	0	-6.310082	0.699071	-3.334319
10	1	0	-4.723488	-0.119483	-4.543844
11	1	0	-7.728187	1.431123	-1.883989
12	1	0	-6.913286	0.992277	-4.186745
13	6	0	-4.614080	-0.969533	1.097988
14	6	0	-4.150836	-0.617290	2.376550
15	6	0	-5.701602	-1.844688	0.941716
16	6	0	-4.780258	-1.146177	3.492376
17	1	0	-3.333328	0.088296	2.480323
18	6	0	-6.313952	-2.368738	2.069136
19	1	0	-6.028812	-2.126952	-0.053227
20	6	0	-5.857903	-2.021698	3.342774
21	1	0	-4.438669	-0.865217	4.482260
22	1	0	-7.142540	-3.058656	1.955506
23	1	0	-6.344258	-2.433330	4.220555
24	6	0	-2.595867	-0.277415	-0.074870
25	6	0	-1.769361	-1.218846	0.569860
26	6	0	-2.023332	0.816609	-0.751070
27	6	0	-0.399627	-1.059371	0.538173
28	1	0	-2.210463	-2.078061	1.062652
29	6	0	-0.650524	0.965997	-0.768044
30	1	0	-2.659751	1.550729	-1.232336
31	6	0	0.187061	0.039411	-0.119471
32	1	0	0.228910	-1.787901	1.039956
33	1	0	-0.221057	1.799633	-1.312171
34	6	0	1.639968	0.207517	-0.140567
35	16	0	2.656933	-1.188793	-0.223544
36	6	0	3.755302	1.130076	-0.124414
37	6	0	4.093125	-0.211335	-0.193345
38	1	0	4.500988	1.915339	-0.076439
39	6	0	5.486517	-0.581496	-0.239612
40	1	0	6.110860	0.309813	-0.210708
41	6	0	6.198358	-1.737862	-0.311762
42	6	0	5.735437	-3.145620	-0.369176
43	8	0	6.484290	-4.089067	-0.451160
44	8	0	4.405573	-3.256254	-0.318207
45	1	0	4.173614	-4.202485	-0.362647
46	6	0	7.631250	-1.617274	-0.341425
47	7	0	8.782825	-1.502602	-0.364074
48	6	0	2.368699	1.383448	-0.095039
49	6	0	1.797001	2.767549	0.022160
50	1	0	1.609314	3.214348	-0.960613
51	1	0	0.853153	2.770016	0.576159
52	8	0	2.759685	3.566159	0.712305

53	6	0	2.422486	4.863203	0.865777
54	8	0	1.377889	5.314309	0.462469
55	6	0	3.500362	5.622954	1.585079
56	1	0	3.677267	5.172597	2.564723
57	1	0	4.432145	5.564504	1.017214
58	1	0	3.196833	6.661979	1.699723

7.3.2.3 Geometría del estado oxidado del colorante AcTPA

Standard orientation:

Center Number	Atomic Number	Atomic Type	Coordinates (Angstroms)		
			X	Y	Z
1	7	0	-5.146330	-1.032076	-0.074468
2	6	0	-6.011254	-0.852468	-1.186177
3	6	0	-5.540765	-1.044400	-2.489766
4	6	0	-7.348371	-0.494947	-0.983475
5	6	0	-6.395564	-0.866602	-3.572673
6	1	0	-4.505401	-1.331291	-2.646714
7	6	0	-8.200919	-0.337989	-2.071399
8	1	0	-7.711894	-0.345048	0.028519
9	6	0	-7.729752	-0.517266	-3.370792
10	1	0	-6.017679	-1.017134	-4.579169
11	1	0	-9.236721	-0.061673	-1.900417
12	1	0	-8.395623	-0.387008	-4.217500
13	6	0	-5.625725	-1.727388	1.067110
14	6	0	-5.351188	-1.251699	2.353879
15	6	0	-6.388492	-2.889551	0.911651
16	6	0	-5.823065	-1.939932	3.466839
17	1	0	-4.767164	-0.344221	2.473909
18	6	0	-6.872412	-3.560749	2.029866
19	1	0	-6.599400	-3.258342	-0.087487
20	6	0	-6.588880	-3.094294	3.312271
21	1	0	-5.601893	-1.561339	4.459937
22	1	0	-7.464112	-4.460968	1.895754
23	1	0	-6.961924	-3.624218	4.182493
24	6	0	-3.831014	-0.535407	-0.105539
25	6	0	-2.793037	-1.215062	0.550814
26	6	0	-3.526109	0.646110	-0.796765
27	6	0	-1.499784	-0.718082	0.526800
28	1	0	-3.008414	-2.134142	1.085390
29	6	0	-2.224938	1.125409	-0.833664
30	1	0	-4.313027	1.182659	-1.316051
31	6	0	-1.187402	0.462763	-0.162611
32	1	0	-0.717612	-1.253817	1.057779
33	1	0	-2.010416	2.021384	-1.408993
34	6	0	0.185559	0.980359	-0.196851
35	16	0	1.518204	-0.118617	-0.381761
36	6	0	2.045122	2.386370	-0.194927
37	6	0	2.675883	1.175550	-0.328289
38	1	0	2.574437	3.328121	-0.106111
39	6	0	0.628478	2.281958	-0.118693
40	6	0	-0.262819	3.474227	0.069445
41	1	0	-0.502973	3.963116	-0.881129
42	1	0	-1.206026	3.198284	0.550266
43	8	0	0.441409	4.409183	0.896922
44	6	0	-0.195483	5.572946	1.120754
45	8	0	-1.288916	5.818969	0.669711
46	6	0	0.627452	6.484926	1.987622
47	1	0	0.823605	6.000761	2.947393
48	1	0	1.590211	6.679140	1.508816
49	1	0	0.091355	7.419476	2.143417
50	6	0	4.103648	0.940562	-0.420921
51	6	0	5.072764	1.867745	-0.752414
52	16	0	4.782339	-0.615121	-0.096181
53	6	0	6.360158	1.311156	-0.744350
54	1	0	4.852221	2.896298	-1.009656
55	6	0	6.399312	-0.039346	-0.418450
56	1	0	7.260302	1.867641	-0.981732
57	6	0	7.659930	-0.721489	-0.390973
58	1	0	8.463238	-0.030497	-0.642229
59	6	0	8.102343	-1.987589	-0.137482
60	6	0	9.517576	-2.212267	-0.239387
61	7	0	10.660800	-2.376342	-0.325951

62	6	0	7.347643	-3.203361	0.233225
63	8	0	7.862323	-4.280849	0.423491
64	8	0	6.032492	-2.987513	0.337765
65	1	0	5.603113	-3.827902	0.582360

7.3.2.4 Geometría del estado fundamental del colorante AcTPA-A

Standard orientation:

Center Number	Atomic Number	Atomic Type	Coordinates (Angstroms)		
			X	Y	Z
1	7	0	-5.096898	-1.102152	-0.063177
2	6	0	-6.149988	-0.461989	-0.780210
3	6	0	-5.944800	-0.036263	-2.095840
4	6	0	-7.395420	-0.288782	-0.170860
5	6	0	-6.981697	0.577641	-2.789963
6	1	0	-4.979251	-0.195163	-2.566466
7	6	0	-8.428623	0.316250	-0.877826
8	1	0	-7.542707	-0.626007	0.850436
9	6	0	-8.225427	0.754971	-2.185673
10	1	0	-6.819454	0.905407	-3.811588
11	1	0	-9.393596	0.452571	-0.400608
12	1	0	-9.033572	1.229320	-2.732436
13	6	0	-5.405624	-2.307121	0.633098
14	6	0	-4.979953	-2.484017	1.952935
15	6	0	-6.159338	-3.298114	-0.001509
16	6	0	-5.294935	-3.659491	2.625880
17	1	0	-4.412885	-1.698659	2.443463
18	6	0	-6.478188	-4.464743	0.684484
19	1	0	-6.485739	-3.148484	-1.025949
20	6	0	-6.044824	-4.652001	1.996462
21	1	0	-4.964135	-3.792358	3.650771
22	1	0	-7.060449	-5.233829	0.187510
23	1	0	-6.293410	-5.565191	2.526916
24	6	0	-3.822394	-0.576249	-0.048183
25	6	0	-2.693563	-1.403054	0.178879
26	6	0	-3.599220	0.805808	-0.267495
27	6	0	-1.429046	-0.873685	0.187824
28	1	0	-2.830972	-2.467602	0.329212
29	6	0	-2.330157	1.329289	-0.245202
30	1	0	-4.442992	1.462144	-0.445917
31	6	0	-1.183862	0.517396	-0.009381
32	1	0	-0.595614	-1.546730	0.364674
33	1	0	-2.224452	2.386935	-0.444531
34	6	0	0.143315	1.028037	0.007759
35	16	0	1.496727	-0.088603	-0.091204
36	6	0	2.003872	2.455429	0.101436
37	6	0	2.666990	1.208755	-0.004966
38	1	0	2.535259	3.393369	0.194398
39	6	0	0.625794	2.364646	0.109083
40	6	0	-0.251511	3.573503	0.276109
41	1	0	-0.750669	3.846001	-0.660632
42	1	0	-1.025373	3.403588	1.031911
43	8	0	0.574640	4.661913	0.685210
44	6	0	-0.067479	5.834399	0.859686
45	8	0	-1.255976	5.957928	0.687137
46	6	0	0.884988	6.915363	1.285600
47	1	0	1.374068	6.627172	2.219233
48	1	0	1.661077	7.041427	0.526772
49	1	0	0.339133	7.847354	1.420945
50	6	0	4.040673	0.975592	-0.043985
51	6	0	5.073991	1.947900	0.002569
52	16	0	4.707791	-0.643935	-0.166442
53	6	0	6.327814	1.396967	-0.055936
54	1	0	4.876471	3.010458	0.077119
55	6	0	6.359907	-0.025706	-0.152947
56	1	0	7.246795	1.972109	-0.031256
57	6	0	7.584802	-0.701864	-0.213410
58	1	0	8.413178	0.004211	-0.173987

59	6	0	8.019713	-2.029835	-0.304869
60	6	0	9.430980	-2.233978	-0.318265
61	7	0	10.584365	-2.376381	-0.327780
62	6	0	7.257934	-3.267918	-0.392006
63	8	0	7.743711	-4.382967	-0.455288
64	8	0	5.924073	-3.075390	-0.401176
65	1	0	5.504816	-3.952382	-0.457685

7.3.2.5 Geometría del estado excitado del colorante AcTPA-A

Standard orientation:

Center Number	Atomic Number	Atomic Type	Coordinates (Angstroms)		
			X	Y	Z
1	7	0	-5.120413	-1.053728	-0.101984
2	6	0	-6.084916	-0.590418	-1.033827
3	6	0	-5.720206	-0.403798	-2.373978
4	6	0	-7.395729	-0.346825	-0.603236
5	6	0	-6.674134	0.039661	-3.279346
6	1	0	-4.710001	-0.633827	-2.696791
7	6	0	-8.335904	0.099809	-1.520476
8	1	0	-7.655865	-0.485472	0.440877
9	6	0	-7.979032	0.293881	-2.856104
10	1	0	-6.401254	0.173816	-4.320189
11	1	0	-9.348626	0.304153	-1.191071
12	1	0	-8.720386	0.639484	-3.568520
13	6	0	-5.506544	-2.043087	0.838746
14	6	0	-5.087193	-1.934762	2.171601
15	6	0	-6.319957	-3.105806	0.423658
16	6	0	-5.478639	-2.903838	3.084888
17	1	0	-4.488739	-1.084836	2.483249
18	6	0	-6.698719	-4.068014	1.348570
19	1	0	-6.623889	-3.179637	-0.615180
20	6	0	-6.280454	-3.970282	2.676855
21	1	0	-5.167838	-2.818704	4.120258
22	1	0	-7.315815	-4.901073	1.030681
23	1	0	-6.583425	-4.724205	3.395481
24	6	0	-3.830597	-0.555294	-0.113282
25	6	0	-2.747365	-1.364948	0.306639
26	6	0	-3.577998	0.765775	-0.551913
27	6	0	-1.468429	-0.863276	0.288074
28	1	0	-2.926869	-2.389776	0.610330
29	6	0	-2.292527	1.257036	-0.553245
30	1	0	-4.401249	1.398611	-0.862382
31	6	0	-1.204002	0.463615	-0.125793
32	1	0	-0.651568	-1.500188	0.612060
33	1	0	-2.123775	2.261946	-0.920712
34	6	0	0.150024	0.982098	-0.130021
35	16	0	1.488900	-0.107680	-0.353114
36	6	0	2.005256	2.387807	-0.020378
37	6	0	2.635212	1.179569	-0.223307
38	1	0	2.536980	3.319257	0.128515
39	6	0	0.596466	2.287372	0.031154
40	6	0	-0.280072	3.477768	0.302663
41	1	0	-0.648050	3.929698	-0.625642
42	1	0	-1.148777	3.209249	0.911748
43	8	0	0.510251	4.440702	0.999461
44	6	0	-0.120355	5.599224	1.284066
45	8	0	-1.270437	5.803394	0.979915
46	6	0	0.791318	6.549581	2.006369
47	1	0	1.146302	6.087710	2.930760
48	1	0	1.663299	6.766254	1.384436
49	1	0	0.253323	7.469145	2.229474
50	6	0	4.061884	0.955342	-0.340080
51	6	0	5.019686	1.907705	-0.626319
52	16	0	4.751532	-0.613051	-0.114112
53	6	0	6.310633	1.358717	-0.666117
54	1	0	4.791656	2.948446	-0.820353
55	6	0	6.356998	-0.007177	-0.418568
56	1	0	7.205232	1.932638	-0.880719
57	6	0	7.625418	-0.684903	-0.443003
58	1	0	8.421896	0.023510	-0.664367
59	6	0	8.072008	-1.959429	-0.266373
60	6	0	9.486997	-2.175457	-0.399527
61	7	0	10.628647	-2.332747	-0.510349

62	6	0	7.324416	-3.198829	0.047462
63	8	0	7.846419	-4.281749	0.165847
64	8	0	6.011867	-2.991895	0.187783
65	1	0	5.586812	-3.845671	0.390845

7.3.2.6 Geometría del estado oxidado del colorante AcTPA-A

Standard orientation:

Center Number	Atomic Number	Atomic Type	Coordinates (Angstroms)		
			X	Y	Z
1	7	0	-6.039476	-0.620257	-0.086225
2	6	0	-6.834041	-0.403965	-1.242702
3	6	0	-6.362372	-0.774778	-2.506689
4	6	0	-8.103315	0.172141	-1.124532
5	6	0	-7.146625	-0.557785	-3.634875
6	1	0	-5.381055	-1.230511	-2.597438
7	6	0	-8.888521	0.367838	-2.256018
8	1	0	-8.467629	0.461007	-0.143423
9	6	0	-8.414192	0.009840	-3.516714
10	1	0	-6.768254	-0.848625	-4.609935
11	1	0	-9.872104	0.814950	-2.150445
12	1	0	-9.026400	0.170537	-4.397993
13	6	0	-6.652498	-1.130458	1.088111
14	6	0	-6.334485	-0.598710	2.342652
15	6	0	-7.590602	-2.164309	0.997679
16	6	0	-6.937853	-1.106493	3.488561
17	1	0	-5.613446	0.210119	2.412197
18	6	0	-8.202975	-2.653041	2.147092
19	1	0	-7.835431	-2.577474	0.023979
20	6	0	-7.877361	-2.132179	3.398179
21	1	0	-6.681064	-0.686053	4.455925
22	1	0	-8.929927	-3.454899	2.062882
23	1	0	-8.351702	-2.520583	4.293393
24	6	0	-4.662000	-0.333640	-0.104177
25	6	0	-3.759005	-1.109701	0.638547
26	6	0	-4.160866	0.730074	-0.868082
27	6	0	-2.404025	-0.818653	0.626814
28	1	0	-4.127914	-1.940186	1.231193
29	6	0	-2.800667	1.001533	-0.890965
30	1	0	-4.842081	1.337961	-1.454006
31	6	0	-1.895128	0.243227	-0.135332
32	1	0	-1.727997	-1.423487	1.224864
33	1	0	-2.435284	1.807206	-1.521347
34	6	0	-0.458033	0.543092	-0.158898
35	16	0	0.693534	-0.751402	-0.198377
36	6	0	1.583018	1.653923	-0.185622
37	6	0	2.036603	0.356053	-0.214886
38	1	0	2.237495	2.516833	-0.146075
39	6	0	0.169288	1.769903	-0.150952
40	6	0	-0.536192	3.091622	-0.071390
41	1	0	-0.681298	3.543070	-1.059042
42	1	0	-1.519919	2.993854	0.397390
43	8	0	0.282879	3.969093	0.713063
44	6	0	-0.176939	5.226718	0.839587
45	8	0	-1.211805	5.600062	0.340184
46	6	0	0.755329	6.065407	1.669215
47	1	0	0.854290	5.627529	2.665500
48	1	0	1.746908	6.078413	1.210441
49	1	0	0.363793	7.078403	1.743874
50	6	0	3.429980	-0.067521	-0.284507
51	6	0	3.847304	-1.417256	-0.011710
52	6	0	4.437579	0.810110	-0.631658
53	6	0	5.237146	-1.791457	-0.077667
54	6	0	5.807100	0.444586	-0.681388
55	1	0	4.183321	1.828417	-0.903268
56	6	0	6.251252	-0.827706	-0.398208
57	1	0	6.518658	1.201291	-0.989401
58	16	0	3.995516	-3.743479	0.490626
59	7	0	5.446722	-3.077588	0.190935
60	7	0	3.052113	-2.436358	0.304418

61	6	0	7.620849	-1.299576	-0.529642
62	1	0	7.694761	-2.339087	-0.845928
63	6	0	8.801129	-0.661649	-0.342751
64	6	0	10.003257	-1.371767	-0.692905
65	7	0	10.960843	-1.955468	-0.979140
66	6	0	9.076761	0.691603	0.226566
67	8	0	10.148430	1.237010	0.111387
68	8	0	8.055564	1.204426	0.915985
69	1	0	8.342094	2.070217	1.261415

7.3.2.7 Geometría del estado fundamental del colorante AcTPA-B

Standard orientation:

Center Number	Atomic Number	Atomic Type	Coordinates (Angstroms)		
			X	Y	Z
1	7	0	-6.003650	-0.637506	-0.039501
2	6	0	-6.954207	0.145241	-0.760921
3	6	0	-6.725729	0.464112	-2.102147
4	6	0	-8.127603	0.560825	-0.127210
5	6	0	-7.665715	1.215409	-2.799518
6	1	0	-5.819739	0.116592	-2.589516
7	6	0	-9.065819	1.302373	-0.836779
8	1	0	-8.293590	0.302913	0.914158
9	6	0	-8.837263	1.635255	-2.171316
10	1	0	-7.486707	1.460227	-3.841344
11	1	0	-9.975020	1.627272	-0.341610
12	1	0	-9.570976	2.215869	-2.720538
13	6	0	-6.497249	-1.747442	0.709105
14	6	0	-6.098788	-1.930667	2.036083
15	6	0	-7.405424	-2.628941	0.117754
16	6	0	-6.596422	-3.008289	2.760692
17	1	0	-5.409447	-1.226109	2.491559
18	6	0	-7.905169	-3.697003	0.854739
19	1	0	-7.709342	-2.472746	-0.912647
20	6	0	-7.500450	-3.893007	2.174500
21	1	0	-6.286383	-3.147222	3.791200
22	1	0	-8.607458	-4.382746	0.392163
23	1	0	-7.890986	-4.729110	2.745006
24	6	0	-4.661899	-0.331704	-0.061975
25	6	0	-3.683805	-1.322250	0.209502
26	6	0	-4.215758	0.979190	-0.363463
27	6	0	-2.348742	-1.011023	0.185622
28	1	0	-3.994736	-2.338444	0.421381
29	6	0	-2.876421	1.283207	-0.369582
30	1	0	-4.940080	1.755269	-0.580456
31	6	0	-1.882866	0.306233	-0.087384
32	1	0	-1.634794	-1.800264	0.399869
33	1	0	-2.593165	2.293672	-0.633443
34	6	0	-0.486110	0.597643	-0.096178
35	16	0	0.666896	-0.713983	-0.221084
36	6	0	1.564017	1.711193	-0.026237
37	6	0	2.026866	0.381198	-0.151293
38	1	0	2.226767	2.559760	0.074334
39	6	0	0.187129	1.841993	0.001917
40	6	0	-0.487043	3.170831	0.197534
41	1	0	-0.912955	3.552683	-0.737180
42	1	0	-1.296758	3.103522	0.931501
43	8	0	0.495660	4.095209	0.661211
44	6	0	0.053119	5.354378	0.852936
45	8	0	-1.092655	5.678737	0.654499
46	6	0	1.159492	6.250225	1.332894
47	1	0	1.561718	5.865649	2.273277
48	1	0	1.970536	6.257762	0.600724
49	1	0	0.774129	7.258232	1.475283
50	6	0	3.373794	-0.039088	-0.218165
51	6	0	3.755987	-1.425252	-0.310621
52	6	0	4.448712	0.898495	-0.208297
53	6	0	5.153171	-1.810677	-0.354076
54	6	0	5.776051	0.533005	-0.244433
55	1	0	4.215644	1.956788	-0.191583
56	6	0	6.206134	-0.821296	-0.304855
57	1	0	6.521920	1.315518	-0.267709
58	16	0	3.839990	-3.819407	-0.461162
59	7	0	5.327220	-3.119511	-0.428428

60	7	0	2.925515	-2.452967	-0.367708
61	6	0	7.539847	-1.272096	-0.443277
62	1	0	7.613962	-2.287325	-0.832007
63	6	0	8.762492	-0.656179	-0.218018
64	6	0	9.922897	-1.316744	-0.728309
65	7	0	10.851675	-1.869409	-1.152705
66	6	0	9.086504	0.542543	0.570021
67	8	0	10.175083	1.083791	0.563615
68	8	0	8.088693	0.958354	1.370781
69	1	0	8.425332	1.733367	1.855581

7.3.2.8 Geometría del estado excitado del colorante AcTPA-B

Standard orientation:

Center Number	Atomic Number	Atomic Type	Coordinates (Angstroms)		
			X	Y	Z
1	7	0	-5.999607	-0.635586	-0.077470
2	6	0	-6.893390	-0.053601	-1.014840
3	6	0	-6.527394	0.026301	-2.364724
4	6	0	-8.139765	0.412229	-0.577351
5	6	0	-7.413749	0.587294	-3.274067
6	1	0	-5.572755	-0.373743	-2.690975
7	6	0	-9.012367	0.973676	-1.498546
8	1	0	-8.400339	0.351588	0.474104
9	6	0	-8.653023	1.062665	-2.844486
10	1	0	-7.141205	0.640980	-4.322275
11	1	0	-9.973118	1.349459	-1.164347
12	1	0	-9.341818	1.499317	-3.559696
13	6	0	-6.525953	-1.522547	0.898112
14	6	0	-6.088268	-1.431653	2.225897
15	6	0	-7.493814	-2.462465	0.521388
16	6	0	-6.617204	-2.297084	3.173585
17	1	0	-5.365534	-0.672333	2.506646
18	6	0	-8.009441	-3.322612	1.480272
19	1	0	-7.812126	-2.524715	-0.513957
20	6	0	-7.573909	-3.242961	2.804117
21	1	0	-6.291221	-2.223493	4.205184
22	1	0	-8.748354	-4.062268	1.192454
23	1	0	-7.984218	-3.916051	3.549233
24	6	0	-4.650270	-0.343947	-0.110974
25	6	0	-3.700982	-1.293761	0.341325
26	6	0	-4.198660	0.904879	-0.601280
27	6	0	-2.361158	-0.994137	0.309658
28	1	0	-4.034012	-2.267222	0.682264
29	6	0	-2.853893	1.193939	-0.614362
30	1	0	-4.916109	1.643678	-0.938889
31	6	0	-1.897232	0.262168	-0.149731
32	1	0	-1.650563	-1.735890	0.659669
33	1	0	-2.533872	2.146584	-1.018617
34	6	0	-0.481633	0.571848	-0.157616
35	16	0	0.679361	-0.714118	-0.297483
36	6	0	1.552792	1.689302	-0.063487
37	6	0	2.007233	0.393745	-0.213739
38	1	0	2.205425	2.544028	0.059385
39	6	0	0.148081	1.804824	-0.033797
40	6	0	-0.542971	3.122336	0.179973
41	1	0	-0.838163	3.584591	-0.768986
42	1	0	-1.443568	3.011890	0.792149
43	8	0	0.378545	3.988206	0.842732
44	6	0	-0.072555	5.239784	1.066601
45	8	0	-1.178034	5.599237	0.741329
46	6	0	0.968412	6.076831	1.753700
47	1	0	1.246280	5.612329	2.702834
48	1	0	1.865582	6.130373	1.132152
49	1	0	0.573548	7.076252	1.927147
50	6	0	3.401400	-0.022283	-0.319207
51	6	0	3.805538	-1.399635	-0.239627
52	6	0	4.415773	0.892811	-0.512212
53	6	0	5.193732	-1.767623	-0.336094
54	6	0	5.786084	0.529656	-0.593966
55	1	0	4.173174	1.943075	-0.626828
56	6	0	6.215118	-0.773183	-0.494683
57	1	0	6.507782	1.318454	-0.769865
58	16	0	3.938387	-3.774640	-0.078160

59	7	0	5.394820	-3.080395	-0.254653
60	7	0	3.001742	-2.448792	-0.088766
61	6	0	7.590540	-1.225931	-0.668033
62	1	0	7.677224	-2.182121	-1.181741
63	6	0	8.755954	-0.641955	-0.309024
64	6	0	9.978288	-1.272552	-0.735716
65	7	0	10.952037	-1.789859	-1.086434
66	6	0	8.994861	0.577524	0.524308
67	8	0	10.067274	1.130121	0.566021
68	8	0	7.936766	0.951173	1.245161
69	1	0	8.197569	1.734588	1.764302

7.3.2.9 Geometría del estado oxidado del colorante AcTPA-B

Standard orientation:

Center Number	Atomic Number	Atomic Type	Coordinates (Angstroms)		
			X	Y	Z
1	7	0	7.427073	-1.103171	0.184736
2	6	0	8.152661	-1.167846	1.402750
3	6	0	7.538641	-1.636601	2.569487
4	6	0	9.493894	-0.771918	1.444220
5	6	0	8.255462	-1.694740	3.760143
6	1	0	6.500155	-1.951736	2.536047
7	6	0	10.208445	-0.851455	2.635131
8	1	0	9.969414	-0.406121	0.539359
9	6	0	9.593925	-1.307687	3.799907
10	1	0	7.766378	-2.059038	4.658262
11	1	0	11.248929	-0.542262	2.653014
12	1	0	10.152264	-1.361961	4.728671
13	6	0	8.053781	-1.516137	-1.019512
14	6	0	7.888394	-0.776105	-2.195661
15	6	0	8.852822	-2.664615	-1.038017
16	6	0	8.504031	-1.189454	-3.372553
17	1	0	7.275620	0.120068	-2.180563
18	6	0	9.480313	-3.059482	-2.214997
19	1	0	8.979049	-3.240314	-0.126243
20	6	0	9.306434	-2.329040	-3.389231
21	1	0	8.365992	-0.606669	-4.278021
22	1	0	10.098643	-3.951814	-2.214673
23	1	0	9.791669	-2.643829	-4.307240
24	6	0	6.100738	-0.629375	0.170903
25	6	0	5.157628	-1.168808	-0.716522
26	6	0	5.693460	0.387079	1.045777
27	6	0	3.856397	-0.691583	-0.737430
28	1	0	5.454293	-1.960385	-1.396723
29	6	0	4.382865	0.842993	1.034572
30	1	0	6.406928	0.811680	1.744211
31	6	0	3.440684	0.325336	0.134618
32	1	0	3.149832	-1.112188	-1.447596
33	1	0	4.083862	1.604916	1.748794
34	6	0	2.058822	0.823351	0.118495
35	16	0	0.742001	-0.287653	-0.084241
36	6	0	0.185904	2.201153	0.166018
37	6	0	-0.437396	0.989570	-0.003558
38	1	0	-0.343527	3.146304	0.200262
39	6	0	1.603327	2.116916	0.234152
40	6	0	2.481917	3.324744	0.372932
41	1	0	2.590874	3.638964	1.416945
42	1	0	3.484098	3.141194	-0.025665
43	8	0	1.864654	4.392552	-0.359806
44	6	0	2.498042	5.576761	-0.296621
45	8	0	3.522686	5.741325	0.322421
46	6	0	1.767490	6.627042	-1.086862
47	1	0	1.700963	6.319072	-2.133216
48	1	0	0.749286	6.734016	-0.705174
49	1	0	2.297896	7.574560	-1.009532
50	6	0	-1.880120	0.759357	-0.066014
51	6	0	-2.453587	-0.447551	-0.597462
52	6	0	-2.781841	1.698075	0.379002
53	6	0	-3.885903	-0.635723	-0.659023
54	6	0	-4.191669	1.518052	0.304929
55	1	0	-2.415843	2.615296	0.827845
56	6	0	-4.784936	0.384764	-0.195122
57	1	0	-4.820397	2.310951	0.698640

58	16	0	-2.857425	-2.585383	-1.574158
59	7	0	-4.229378	-1.804697	-1.198675
60	7	0	-1.772343	-1.482232	-1.083181
61	6	0	-6.253586	0.233918	-0.249831
62	6	0	-7.057667	1.341382	-0.553237
63	6	0	-6.875656	-0.997864	0.006319
64	6	0	-8.438788	1.222776	-0.592388
65	1	0	-6.594224	2.292129	-0.797356
66	6	0	-8.257068	-1.110322	-0.006624
67	1	0	-6.269939	-1.870783	0.219119
68	6	0	-9.060769	0.003222	-0.288795
69	1	0	-9.045942	2.084102	-0.855959
70	1	0	-8.714767	-2.074557	0.182919
71	6	0	-10.519998	-0.062396	-0.382627
72	1	0	-10.948575	0.578977	-1.151547
73	6	0	-11.412445	-0.804515	0.312473
74	6	0	-12.791284	-0.756562	-0.098246
75	7	0	-13.896263	-0.708929	-0.439284
76	6	0	-11.192781	-1.674702	1.508043
77	8	0	-11.981997	-2.523263	1.848764
78	8	0	-10.082949	-1.377571	2.186143
79	1	0	-10.032407	-1.985205	2.947227

7.3.2.10 Geometría del estado fundamental del colorante AcTPA-C

Standard orientation:					
Center Number	Atomic Number	Atomic Type	Coordinates (Angstroms)		
			X	Y	Z
1	7	0	7.409405	-1.087934	0.160480
2	6	0	8.369113	-0.539470	1.061172
3	6	0	8.044428	-0.355722	2.408175
4	6	0	9.646133	-0.214165	0.597424
5	6	0	8.991804	0.169576	3.280557
6	1	0	7.055094	-0.629006	2.762708
7	6	0	10.590813	0.297944	1.480430
8	1	0	9.888043	-0.364135	-0.450275
9	6	0	10.267063	0.496094	2.821872
10	1	0	8.735057	0.310073	4.325549
11	1	0	11.580878	0.551150	1.115245
12	1	0	11.005477	0.899599	3.506755
13	6	0	7.832726	-2.146819	-0.694974
14	6	0	7.536725	-2.109470	-2.060565
15	6	0	8.571821	-3.208581	-0.167194
16	6	0	7.964985	-3.142411	-2.887695
17	1	0	6.977761	-1.270907	-2.464886
18	6	0	9.007031	-4.229867	-1.004942
19	1	0	8.798514	-3.225967	0.894389
20	6	0	8.702334	-4.203825	-2.365076
21	1	0	7.732894	-3.108462	-3.947253
22	1	0	9.579050	-5.053427	-0.589932
23	1	0	9.040465	-5.004352	-3.014673
24	6	0	6.112733	-0.608525	0.118044
25	6	0	5.605098	-1.422128	-0.343031
26	6	0	5.807402	0.705321	0.541105
27	6	0	3.764260	-0.940926	-0.381113
28	1	0	5.253107	-2.439078	-0.658708
29	6	0	4.516957	1.181176	0.489604
30	1	0	6.599032	1.348852	0.906737
31	6	0	3.443771	0.382824	0.019205
32	1	0	2.980012	-1.596834	-0.746974
33	1	0	4.333467	2.181848	0.860113
34	6	0	2.092615	0.857095	-0.027707
35	16	0	0.776740	-0.291498	-0.061541
36	6	0	0.217327	2.239435	-0.120645
37	6	0	-0.424008	0.979969	-0.119086
38	1	0	-0.320388	3.175098	-0.191985
39	6	0	1.599939	2.182643	-0.068158
40	6	0	2.457549	3.415165	-0.130622
41	1	0	2.836505	3.700573	0.857246
42	1	0	3.319323	3.268981	-0.789895
43	8	0	1.651783	4.481194	-0.633335
44	6	0	2.268764	5.676323	-0.718789

45	8	0	3.422388	5.838639	-0.401646
46	6	0	1.337826	6.729932	-1.248933
47	1	0	0.975884	6.436936	-2.237406
48	1	0	0.471520	6.820656	-0.589163
49	1	0	1.863290	7.681309	-1.309550
50	6	0	-1.815214	0.746823	-0.147483
51	6	0	-2.385569	-0.574072	-0.170370
52	6	0	-2.751685	1.821689	-0.152629
53	6	0	-3.826824	-0.783006	-0.203239
54	6	0	-4.111744	1.620540	-0.198901
55	1	0	-2.386087	2.840498	-0.102991
56	6	0	-4.730408	0.340329	-0.229421
57	1	0	-4.744140	2.499680	-0.161376
58	16	0	-2.757938	-2.948106	-0.224150
59	7	0	-4.150551	-2.070435	-0.242397
60	7	0	-1.684623	-1.695175	-0.173898
61	6	0	-6.168814	0.214751	-0.280649
62	6	0	-6.974163	1.299897	-0.719029
63	6	0	-6.848921	-0.975595	0.091606
64	6	0	-8.346748	1.203242	-0.759506
65	1	0	-6.509844	2.209136	-1.082831
66	6	0	-8.225198	-1.053683	0.084306
67	1	0	-6.274300	-1.838933	0.396899
68	6	0	-9.018275	0.040861	-0.319681
69	1	0	-8.929809	2.041989	-1.130537
70	1	0	-8.698524	-1.983898	0.372735
71	6	0	-10.459369	0.029834	-0.413906
72	1	0	-10.854188	0.739645	-1.140440
73	6	0	-11.414873	-0.717748	0.214648
74	6	0	-12.765817	-0.587865	-0.253383
75	7	0	-13.850519	-0.470483	-0.644206
76	6	0	-11.298851	-1.623680	1.385695
77	8	0	-12.154034	-2.425609	1.688684
78	8	0	-10.197550	-1.419885	2.118215
79	1	0	-10.227340	-2.047306	2.863643

7.3.2.11 Geometría del estado excitado del colorante AcTPA-C

Standard orientation:					
Center Number	Atomic Number	Atomic Type	Coordinates (Angstroms)		
			X	Y	Z
1	7	0	7.386954	-1.059094	0.247979
2	6	0	8.320878	-0.529182	1.186553
3	6	0	7.941601	-0.361194	2.522067
4	6	0	9.615178	-0.215697	0.761043
5	6	0	8.864743	0.141697	3.430799
6	1	0	6.942800	-0.643347	2.840097
7	6	0	10.526638	0.286604	1.680531
8	1	0	9.888825	-0.352093	-0.280169
9	6	0	10.154542	0.467470	3.013114
10	1	0	8.578470	0.266308	4.469427
11	1	0	11.528794	0.542600	1.354313
12	1	0	10.872182	0.857428	3.726990
13	6	0	7.841045	-2.085993	-0.631023
14	6	0	7.538722	-2.014661	-1.994670
15	6	0	8.611488	-3.134367	-0.118789
16	6	0	7.999284	-3.012975	-2.844383
17	1	0	6.968860	-1.174636	-2.379274
18	6	0	9.063928	-4.125294	-0.980115
19	1	0	8.834106	-3.172063	0.942612
20	6	0	8.758834	-4.068196	-2.340488
21	1	0	7.774636	-2.958037	-3.903957
22	1	0	9.652195	-4.947194	-0.586840
23	1	0	9.118060	-4.843757	-3.008456
24	6	0	6.097631	-0.597018	0.191296
25	6	0	5.055242	-1.419740	-0.316436
26	6	0	5.775117	0.709639	0.644943
27	6	0	3.769973	-0.950269	-0.368976
28	1	0	5.276248	-2.432168	-0.632754
29	6	0	4.485574	1.171446	0.567915

30	1	0	6.557052	1.353962	1.028596
31	6	0	3.437934	0.366640	0.050007
32	1	0	2.995173	-1.603634	-0.756746
33	1	0	4.276113	2.163497	0.946547
34	6	0	2.083709	0.845320	-0.033637
35	16	0	0.769628	-0.298891	-0.091046
36	6	0	0.203483	2.204775	-0.201958
37	6	0	-0.409786	0.961578	-0.192525
38	1	0	-0.334433	3.138086	-0.302312
39	6	0	1.603044	2.155983	-0.109617
40	6	0	2.448771	3.397279	-0.166865
41	1	0	2.765145	3.718208	0.832290
42	1	0	3.348969	3.243534	-0.770368
43	8	0	1.658443	4.431786	-0.749939
44	6	0	2.264717	5.634535	-0.836247
45	8	0	3.395261	5.819571	-0.456526
46	6	0	1.353587	6.657756	-1.451592
47	1	0	1.051293	6.328786	-2.448724
48	1	0	0.450688	6.758111	-0.844305
49	1	0	1.870942	7.613444	-1.513307
50	6	0	-1.843658	0.710205	-0.238702
51	6	0	-2.396666	-0.610403	-0.367491
52	6	0	-2.761372	1.736702	-0.163236
53	6	0	-3.823994	-0.822554	-0.414399
54	6	0	-4.164956	1.527012	-0.214832
55	1	0	-2.415821	2.757260	-0.042951
56	6	0	-4.738682	0.282931	-0.335026
57	1	0	-4.807029	2.397231	-0.123917
58	16	0	-2.767992	-2.953205	-0.611895
59	7	0	-4.148835	-2.106825	-0.557942
60	7	0	-1.699597	-1.738182	-0.466335
61	6	0	-6.203511	0.104337	-0.381836
62	6	0	-6.997887	1.042965	-1.054427
63	6	0	-6.829076	-0.983671	0.246060
64	6	0	-8.376892	0.901130	-1.092671
65	1	0	-6.528928	1.867116	-1.582674
66	6	0	-8.209368	-1.109330	0.231375
67	1	0	-6.229327	-1.730317	0.752934
68	6	0	-9.004471	-0.158575	-0.423093
69	1	0	-8.977611	1.621054	-1.640842
70	1	0	-8.671987	-1.962556	0.714468
71	6	0	-10.461916	-0.267023	-0.525418
72	1	0	-10.871913	0.068666	-1.476874
73	6	0	-11.366190	-0.736036	0.363420
74	6	0	-12.737032	-0.845018	-0.062529
75	7	0	-13.835449	-0.927750	-0.417323
76	6	0	-11.164505	-1.149450	1.786929
77	8	0	-11.947468	-1.855300	2.375746
78	8	0	-10.078565	-0.614057	2.346953
79	1	0	-10.036762	-0.931142	3.268268

7.3.2.12 Geometría del estado oxidado del colorante AcTPA-C