

# Viernes 12 de Junio 11 hs

Aula Seminarios INQUIMAE-DQIAQF

Ciudad Universitaria Pab. II, 3° Piso

## "Estudio comparativo de estructura, espectroscopía y reactividad en especies mono- y oligo-nucleares conteniendo fragmentos que incorporan NO y/o CO"

*Tesis doctoral*

Juan Pablo Marcolongo

**Director/es:** Dr. Leonardo Slep

**Consejero de estudios:** Dra. Sara Aldabe Bilmes

**Jurados titulares:** Dres. Florencia Fagalde, José Hodak y Ezequiel Wolcan

**Jurados suplentes:** Dres. Claudia Palopoli y Mariano González Lebrero

### Resumen

"En este trabajo de tesis se presenta un estudio comparativo de sistemas moleculares que poseen coordinadas las moléculas isoelectrónicas CO y NO<sup>+</sup>. Se explora un conjunto de sistemas moleculares consistentes en la unidad fundamental *trans*-{Ru<sup>II</sup>(py)<sub>4</sub>}<sup>2+</sup> (py = piridina) y otros sistemas de menor simetría basados en el fragmento {Ru<sup>II</sup>(tmtacn)(bpy)}<sup>2+</sup> (tmtacn = N,N',N''-trimetil-1,4,7-triazaciclonoano ; bpy = 2,2'-bipiridina). Se generan de esta manera sistemas moleculares en donde el diferente grado de interacción  $\pi$  entre los ligandos aceptores y el centro metálico induce variaciones graduales en las propiedades químicas y espectroscópicas de los sistemas presentados.

El estudio de la estructura electrónica de estas especies se enmarca en el contexto de un extenso análisis comparativo con sistemas relacionados, y permite poner a prueba herramientas de cálculo desarrolladas por nuestro grupo de trabajo mediante las cuales se

cuantifican magnitudes tales como la donación  $\sigma$  y la retrodonación  $\pi$  presente entre los ligandos incorporados y el fragmento metálico para los diferentes casos.

Se estudia la reactividad diferencial de las especies estudiadas y de sistemas binucleares que las contienen haciendo foco en sus propiedades fotoquímicas. Para ello se exploran los procesos que conllevan a la fotoliberación de ligandos en base a experimentos de fotólisis estacionaria, complementados con cálculos de DFT de los estados excitados que se presumen responsables de los procesos y analizando la estabilidad térmica y fotoquímica de los productos formados. El tratamiento de los datos en estos experimentos se realiza empleando metodologías de análisis a múltiples longitudes de onda desarrolladas por nuestro grupo de trabajo, y representa una estrategia novedosa para la obtención de rendimientos cuánticos."