

## **Valencia mixta en el estado excitado**

**Dr. Alejandro Cadranel**

*INQUIMAE / Friedrich Alexander University, Erlangen-Nürnberg, Alemania*

- **Lunes 8 de abril a las 13 hs.**
- **Aula: RFP (INQUIMAE - 3º piso, Pabellón II) - Orador de manera REMOTA (Vía Zoom)**
- **Streaming por el canal de [YouTube](#) del DQIAyQF**

### Resumen

Los sistemas de Valencia Mixta (MV) en estado fundamental (GS-MV) son los modelos más simples para las reacciones de transferencia de electrones, ya que proporcionan acceso experimental a parámetros clave y poseen distancias donador-aceptor fijas que facilitan los análisis. Como ocurre en los aparatos fotosintéticos naturales, en la conversión de energía solar están involucrados sistemas de MV de estado excitado (ES-MV), que han recibido, comparativamente, mucha menos atención que los análogos GS-MV. Existen diversos tipos de ES-MV:

- La fotoexcitación de un sistema GS-MV que resulta en una transferencia de carga dentro del núcleo MV genera estados excitados IVCT, que presentan fragmentos redox-activos en diferentes estados de oxidación formales en relación con el estado fundamental.
- La fotoexcitación de un sistema GS-MV que involucra una excitación local en cualquiera de sus componentes produce sistemas MV localmente excitados (LE-MV). Aquí, los fragmentos redox-activos conservan los mismos estados de oxidación formales en relación con el estado fundamental.
- Los estados fundamentales con dos fragmentos redox-activos en el mismo estado de oxidación formal no son sistemas GS-MV y requieren una transferencia de carga fotoinducida para crear un núcleo MV, generando sistemas MV fotoinducidos (PI-MV). Naturalmente, presentan fragmentos redox-activos en diferentes estados de oxidación formales en relación con el estado fundamental.

Diversos caminos conducen a una paleta de sistemas ES-MV con diferentes propiedades, requiriendo enfoques específicos para ajustar el acoplamiento electrónico, determinante para controlar la conversión de energía. Además, un aspecto clave de los sistemas ES-MV es su naturaleza dinámica. Su cascada de decaimiento al estado fundamental depende crucialmente de las interacciones MV. Esto agrega una nueva dimensión que falta en los sistemas GS-MV, y que requiere técnicas de resolución temporal para una caracterización detallada. En la charla se discutirán las diferentes clases de sistemas, con algunos ejemplos como el ion de Creutz y Taube de estado excitado 1 y photoswitches de valencia mixta fotoinducida.