

VIERNES 5 de SEPTIEMBRE 10 hs.

Aula Fernández Prini INQUIMAE-DQIAQF

Ciudad Universitaria Pab. II, 3º Piso

Estrategias para la minimización de la disipación en conversión de energía solar

Tesis doctoral

AGUSTINA LUDMILA COTIC

Director: Dr. Alejandro Cadrandel

Consejero de Estudios: Dr. Fernando Battaglini

Jurados: Dra. María G. Lagorio - Prof. Adj., DQIAQF, FCEN, UBA – Inv. Princ., INQUIMAE, CONICET, Dr. Mauricio Cattaneo - Prof. Adj., UNT – Inv. Indep., INQUINOA, UNT, CONICET y Dr. Martin Mirenda - Prof. Adj., UNSAM – Inv. Adj., CNEA, CAC, CONICET

Resumen

Para aumentar las eficiencias de conversión de energía solar, es necesario desarrollar estrategias para mitigar los procesos disipativos. Tomando como punto de partida cromóforos de transferencia de carga metal-ligando (MLCT) en complejos de rutenio con ligandos polipiridínicos, se investiga cómo la rigidez estructural y la capacidad donora electrónica de los ligandos influyen en la conversión interna (IC), principal vía de pérdida energética. Se explora el mecanismo de la IC por reconfiguración de hueco excitado mediante espectroscopía de absorción transiente y cálculos DFT/TD-DFT. El estudio identifica cromóforos capaces de prolongar la vida de estados excitados de alta energía hasta la escala de nanosegundos, lo que posibilita su uso en reacciones fotoquímicas antes de su decaimiento. Los resultados confirman la viabilidad de la estrategia, aportando herramientas para el diseño de fotosensibilizadores más eficientes y sostenibles.