



DESARROLLO DE SISTEMAS MOLECULARES MULTIREDOX Y APLICACIONES EN MODELOS DE CONVERSIÓN DE ENERGÍA

Mauricio Cattaneo, Laura Castaño, Bruno Angelillo, Pedro O. Abate, Bianca Kollrich

INQUINOA-CONICET, Instituto de Química Física, Facultad de Bioquímica, Química y Farmacia, Universidad Nacional de Tucumán, Ayacucho 471, (T4000INI) San Miguel de Tucumán, Argentina

Correo electrónico de contacto: mauricio.cattaneo@fbqf.unt.edu.ar

La conversión de energía química y solar requiere acumular varios electrones y protones en una misma molécula y liberarlos de forma controlada. En nuestro grupo abordamos este problema mediante moléculas modelo: complejos de coordinación en los que metal y ligando participan de manera cooperativa en reacciones de transferencia de electrones acoplada a protones (PCET). Los complejos de Ru(II) con ligandos amina nos permiten seguir, paso a paso, la oxidación del ligando y la activación de sus enlaces N–H. Para cada intermediario determinamos potenciales redox, pKa y energías libres de disociación de enlace (BDFE).[1–5] Con esa información construimos esquemas cuadrados y diagramas termoquímicos que muestran qué caminos de reacción están favorecidos. Extendemos este enfoque a nuevos sistemas multiredox,[6,7] combinando síntesis, electroquímica, espectroelectroquímica y cálculos teóricos, con el objetivo de establecer reglas de diseño para catalizadores y reservorios moleculares de carga.

REFERENCIAS

- [1] Cattaneo, M.; Ryken, S. A.; Mayer, J. M. *Angew. Chem. Int. Ed.* **2017**, *56*, 3675-3678. DOI: [10.1002/anie.201612642](https://doi.org/10.1002/anie.201612642)
- [2] Perez, E.; Menges, F.; Cattaneo, M.; Mayer, J. M.; Johnson, M. A. *J. Chem. Phys.* **2020**, *152*, 234309. DOI: [10.1063/5.0012176](https://doi.org/10.1063/5.0012176)
- [3] Cattaneo, M.; Parada, G. A.; Tenderholt, A. L.; Kaminsky, W.; Mayer, J. M. *Eur. J. Inorg. Chem.* **2021**, 4066-4073. DOI: [10.1002/ejic.202100604](https://doi.org/10.1002/ejic.202100604)
- [4] Cattaneo, M.; Gallmeier, E. T.; Abate, P. O.; Mercado, B. Q.; Mayer, J. M. *Chem. Eur. J.* **2024**, *30*, e202401308. DOI: [10.1002/chem.202401308](https://doi.org/10.1002/chem.202401308)
- [5] Groff, B. D.; Cattaneo, M.; Rinaolo, K.; Mercado, B. Q.; Mayer, J. M. *J. Am. Chem. Soc.* **2025**, *147*, 4766-4777. DOI: [10.1021/jacs.4c10596](https://doi.org/10.1021/jacs.4c10596)
- [6] Kollrich, B. A.; Castaño Castañeda, L. C.; Angelillo, B.; Cattaneo, M. *Z. Anorg. Allg. Chem.* **2025**, *651*, e202500136. DOI: [10.1002/zaac.202500136](https://doi.org/10.1002/zaac.202500136)
- [7] Castaño Castañeda, L. C.; Angelillo, B.; Mercado, B. Q.; Di Salvo, F.; Cattaneo, M. *ACS Omega* **2026**, *11*, 17827-17842. DOI: [10.1021/acsomega.5c12371](https://doi.org/10.1021/acsomega.5c12371)