

# SEMINARIO DE QUÍMICA ORGÁNICA

**Miércoles 17 de junio de 2026- 13 hs.**

AULA DE SEMINARIO DQO- 3er piso Pab. II -  
Ciudad Universitaria

## **Estructura molecular y electrónica de interfaces entre complejos de coordinación y óxidos semiconductores**

**Dr. Federico Williams**

**Dpto QIAyQF- INQUIMAE- CONICET-UBA**

### **Resumen**

La posición relativa de los niveles de energía en interfaces molécula– semiconductor es clave para el desarrollo de celdas solares sensibilizadas por colorantes. En esta charla discutiremos la interacción de complejos de rutenio con la superficie modelo rutilo  $\text{TiO}_2(110)$ . Nuestros resultados indican que, tras la adsorción, los complejos de Ru conservan su estructura de coordinación y forman monocapas estables ancladas a la superficie mediante grupos carboxilato. A su vez, la sustitución de uno de los ligandos permite ajustar de manera sistemática la posición de los niveles de energía del complejo con respecto a las bandas del semiconductor. Al adsorber un dímero de rutenio unido mediante un puente cianuro, encontramos que el nivel desocupado de menor energía se alinea con la banda de conducción del  $\text{TiO}_2$ , favoreciendo la inyección de electrones, mientras que el hueco queda localizado en el centro metálico más alejado de la superficie, lo que podría contribuir a reducir los procesos de recombinación. Estos resultados muestran que la posición relativa de los niveles de energía y los procesos de transferencia de carga pueden ser controlados mediante un diseño racional de la interfaz entre el compuesto de coordinación y el óxido semiconductor.

<http://superficies.qi.fcen.uba.ar>