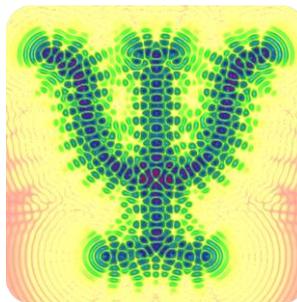


Reunión:  
MATERIALES PARA ALMACENAMIENTO ENERGÉTICO

Diseño y evaluación de sistemas  
moleculares para el almacenamiento y  
la liberación de energía solar:  
sistemas mono- y multi-cromofóricos

**Marco MARAZZI**



Grupo **RESMOL**

**Reactividad y**  
**E**structura  
**MOL**ecular

Twitter: [@RESMOL\\_UAH](https://twitter.com/RESMOL_UAH)

Facebook: [Resmol Alcalá](https://www.facebook.com/ResmolAlcala/)

Web IQAR: [www3.uah.es/iqar/](http://www3.uah.es/iqar/)

del inglés "Molecular Solar Thermal Systems" (MOST)

### Comparación fotovoltaico – MOST

Fotovoltaico:

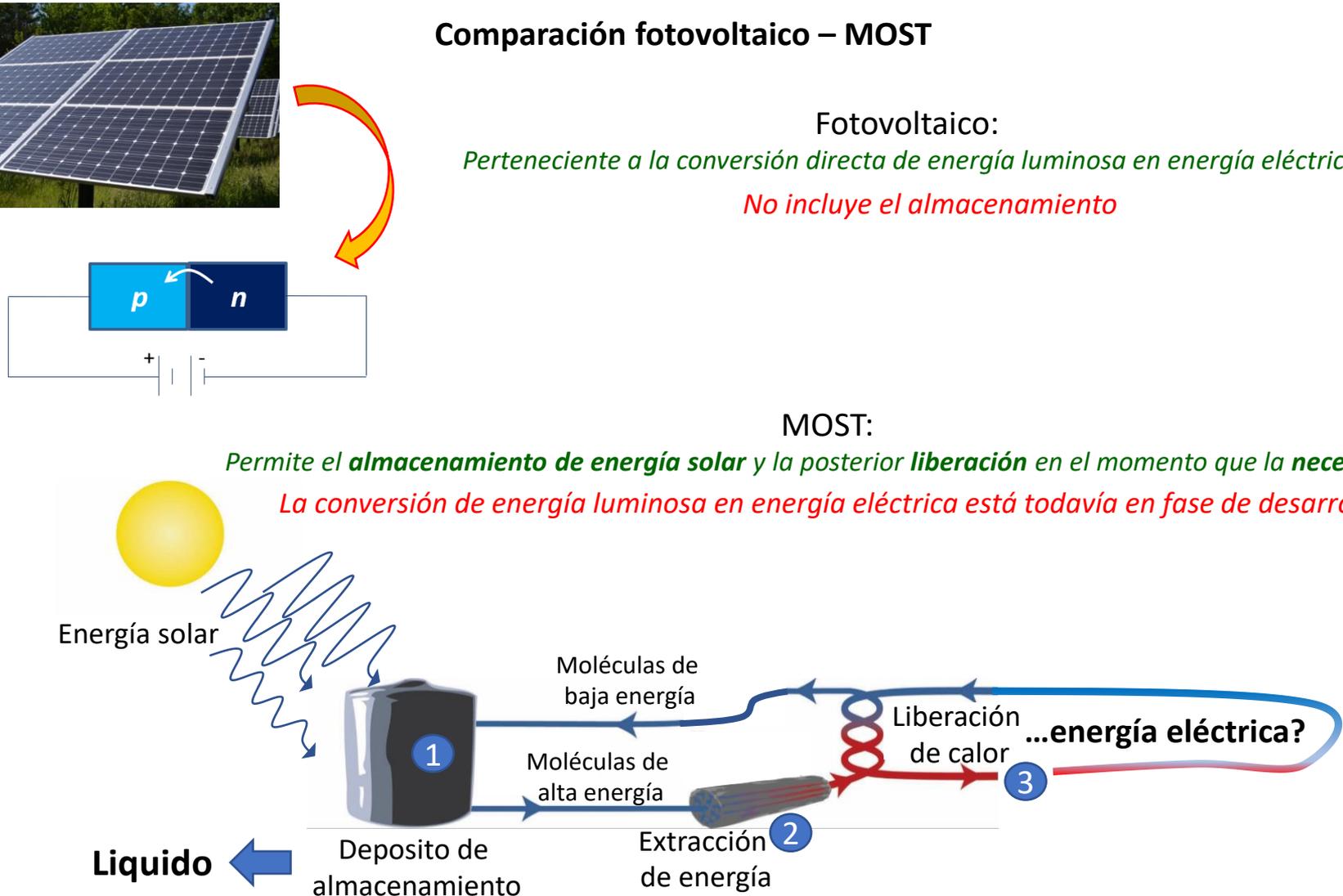
*Pertenece a la conversión directa de energía luminosa en energía eléctrica*

*No incluye el almacenamiento*

MOST:

*Permite el **almacenamiento de energía solar** y la posterior **liberación** en el momento que la **necesitamos***

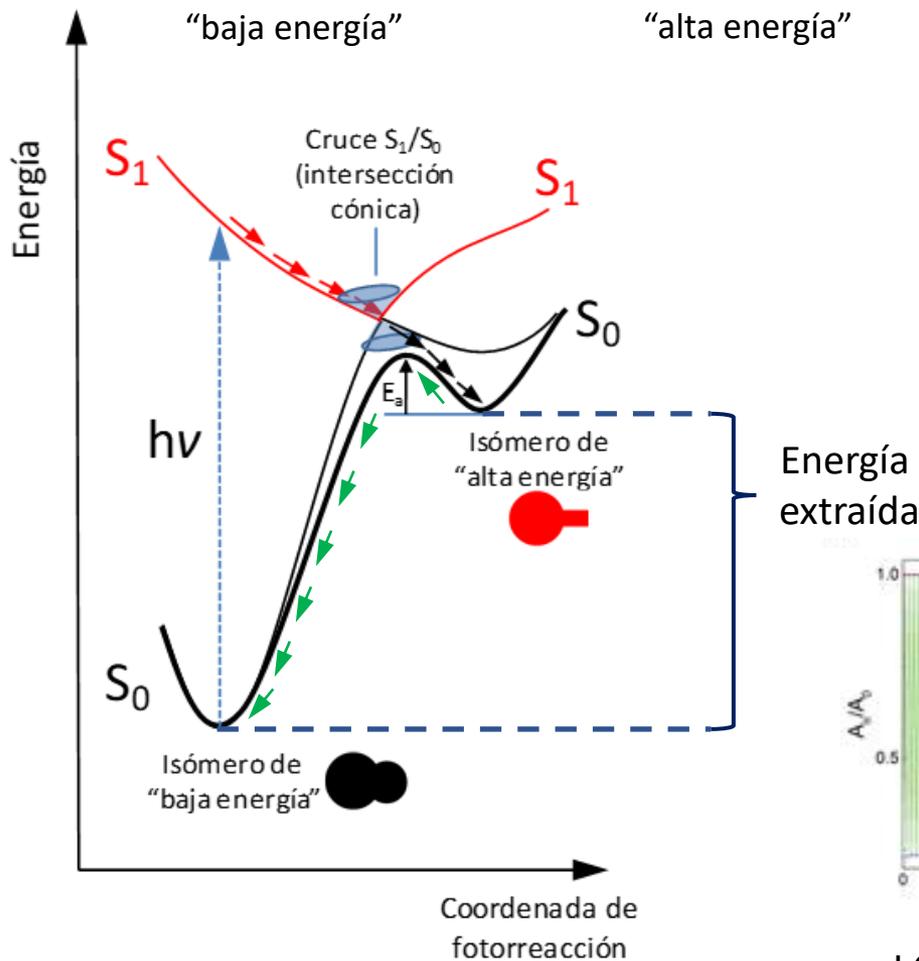
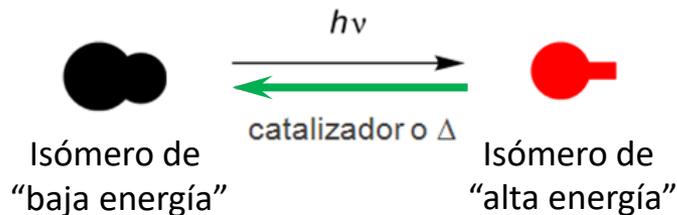
*La conversión de energía luminosa en energía eléctrica está todavía en fase de desarrollo*





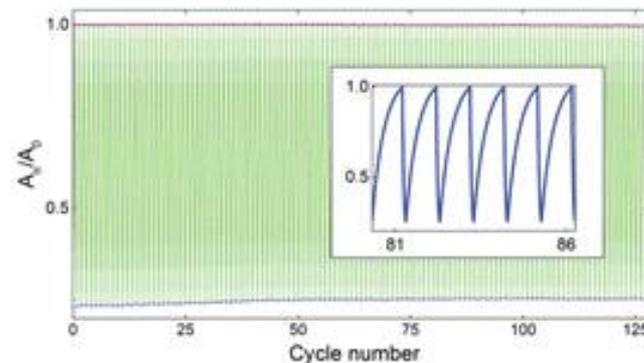
Extracción de energía

La energía almacenada a través de la fotorreacción se puede extraer a nivel **térmico** o proporcionado un **catalizador** apropiado



Propiedades moleculares deseadas

- 1) El isómero de "alta energía" tiene que ser **estable** durante periodos de tiempo largos, según la aplicación (horas, días, meses, ...)
- 2) El ciclo "Almacenamiento (fotorreacción) – extracción de energía" tiene que ser **estable** frente a la degradación
- 3) **Densidad de almacenamiento ( $D_A$ )** más alta posible



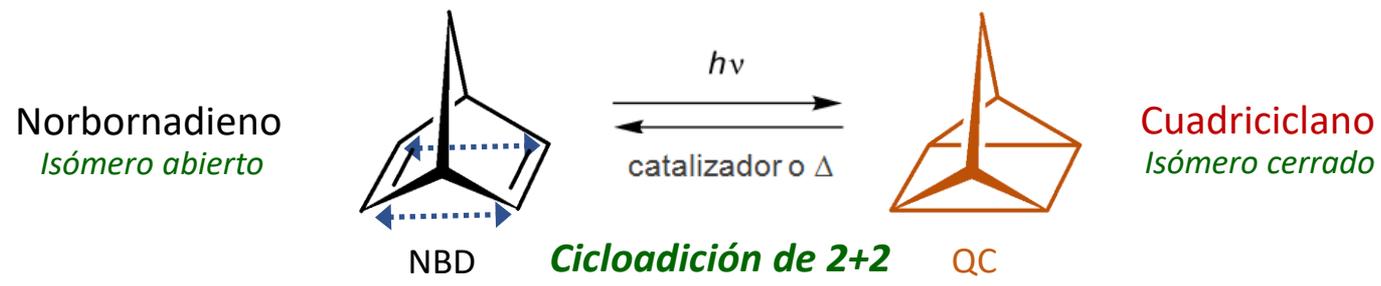
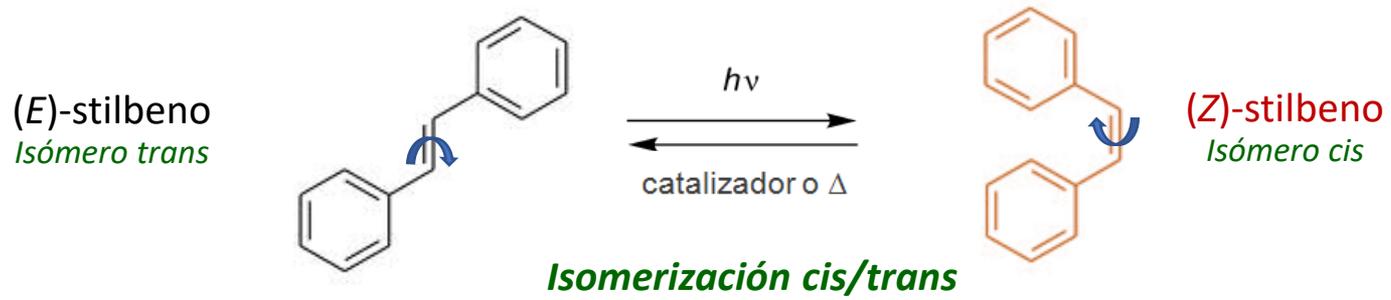
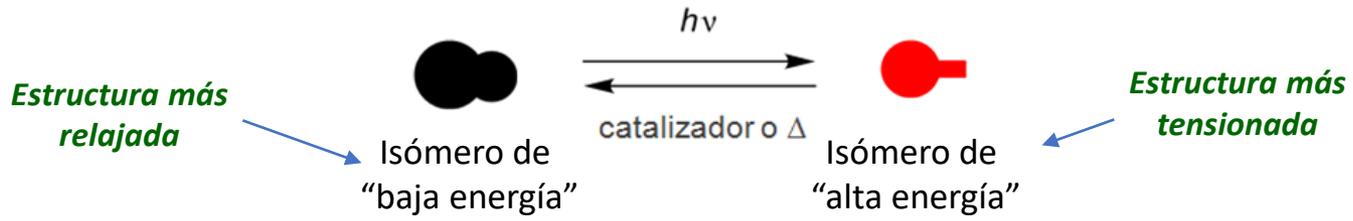
Entalpía de almacenamiento

$$D_A \propto \frac{H_A}{M}$$

Masa molar

Mecanismos de isomerización: **sistemas mono-cromofórico**

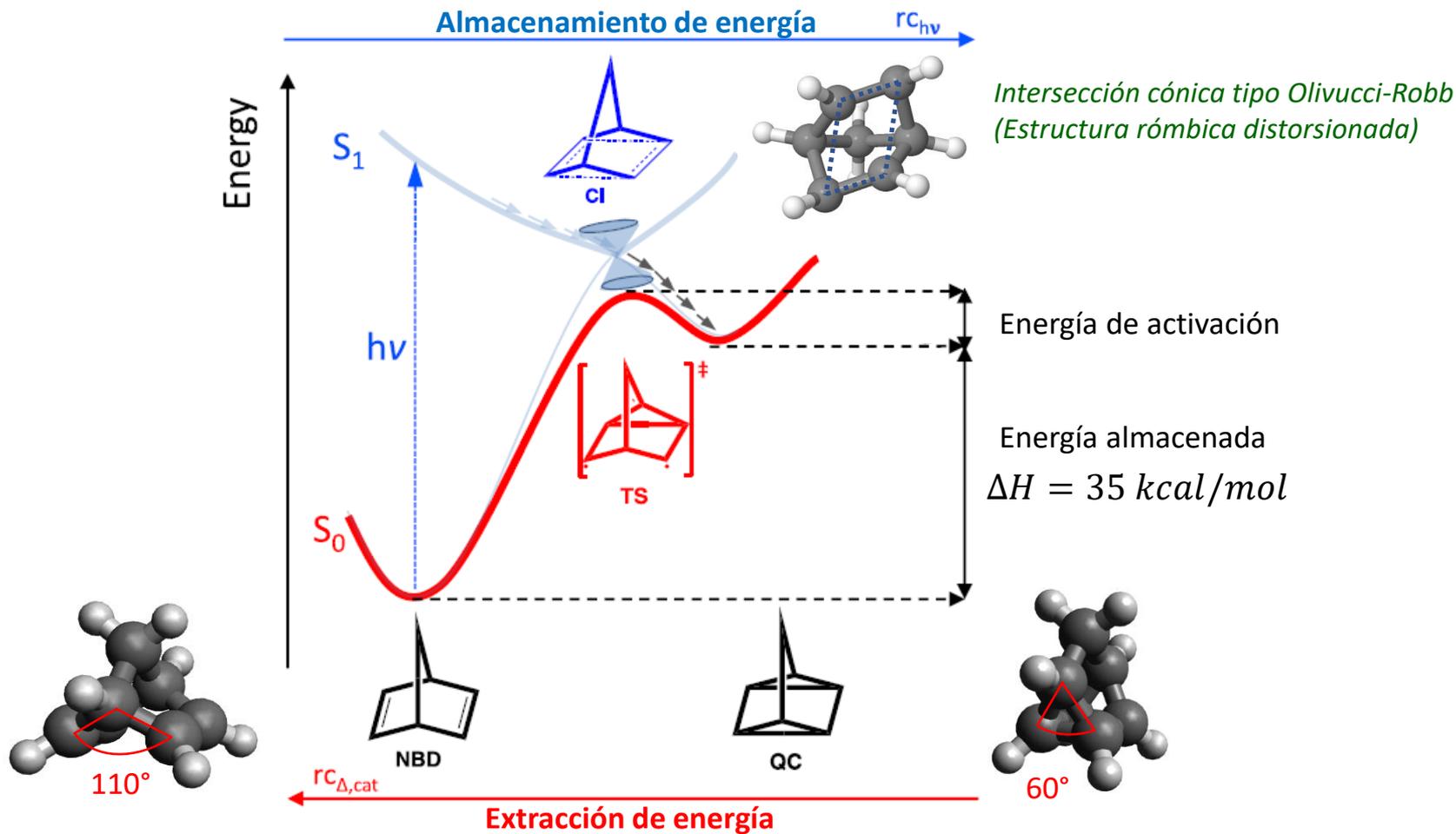
Se han propuesto distintos tipos de sistemas moleculares correspondientes a diferentes mecanismos de isomería



**Variación de la aromaticidad**

Norbornadieno / Cuadriciclano

Coordenadas de almacenamiento y extracción de energía

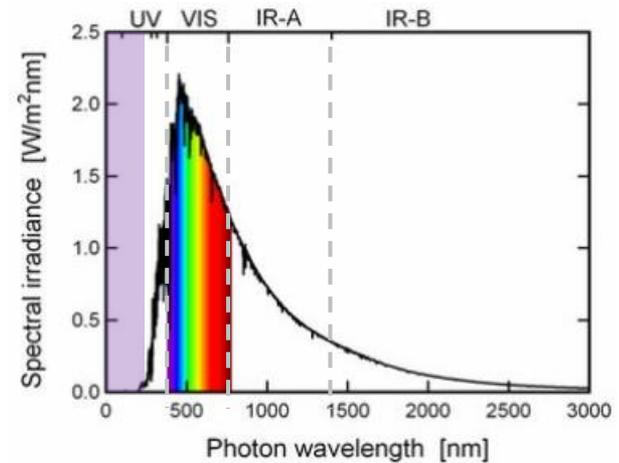


Norbornadieno / Cuadriciclano

*Características comparativas para ser aplicado como MOST*

- 1) No hay productos secundarios
- 2) No hay reversión fotoquímica
- 3)  $\Delta H$  considerablemente alto
- 4) No absorbe en el visible

→  $\lambda < 267 \text{ nm}$



Solución:

*Modificación del cromóforo introduciendo grupos dadores y aceptores*

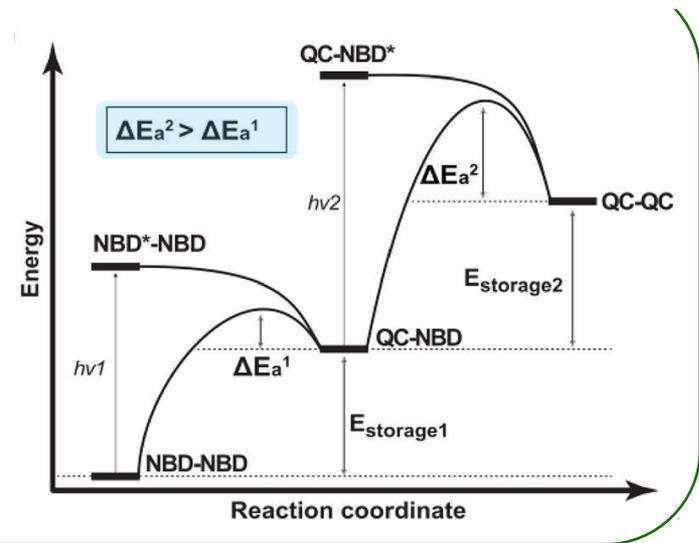
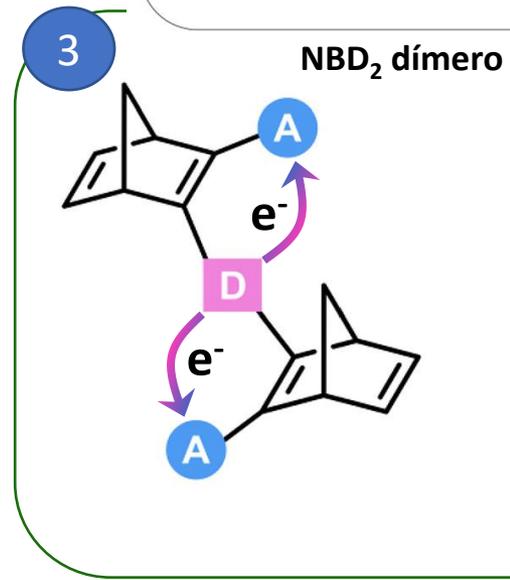
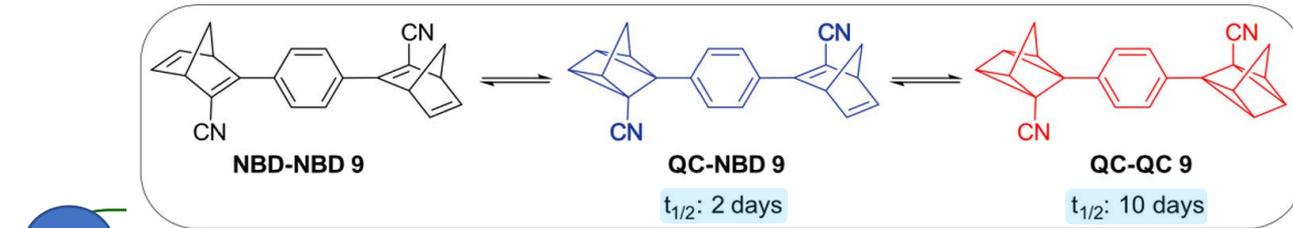
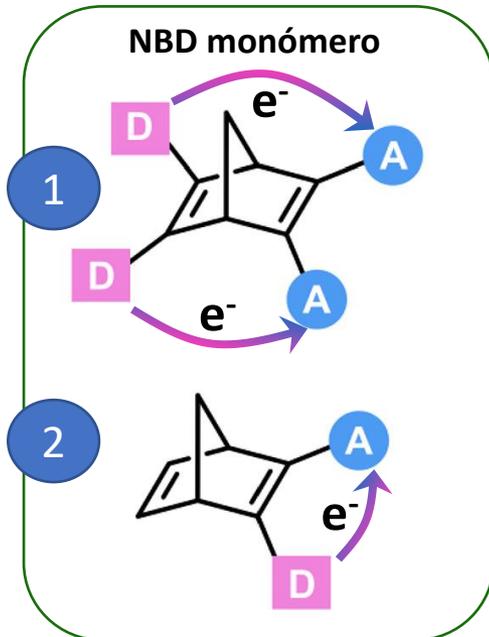
*Transferencia de carga en el estado excitado*

$\lambda < 558 \text{ nm}$

Norbornadieno / Cuadriciclano

Sistema multi-cromofórico

Modificación del sistema mono-cromofórico



- 1) **Homoconjugación:** transferencia electrónica entre 2 sistemas π (C=C) separados por un grupo no conjugado (“*through-space interaction*”)
- 2) **Efecto “push-pull”** (empujar-halar) en un **monómero:** transferencia electrónica dentro del mismo sistemas π (C=C)

$$D_A \propto \frac{H_A}{M} \rightleftharpoons \text{Equilibrio } \textcircled{1} \textcircled{2} \textcircled{3}$$

- 3) **Efecto “push-pull”** en un **dímero:** dos pasos fotoquímicos



### Objetivos del proyecto

(Línea de actuación estímulo a la investigación de jóvenes doctores 2022-2023)

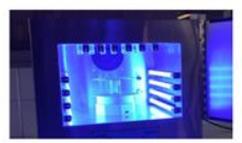
Nuevos sistemas mono-cromofóricos  
*Distinto tipo de cromóforo y de reactividad*

Nuevos sistemas multi-cromofóricos  
*Tipo estrella → Tipo lineal (oligómeros)*

Clúster de superordenadores



Fotorreactor (luz azul como ejemplo)

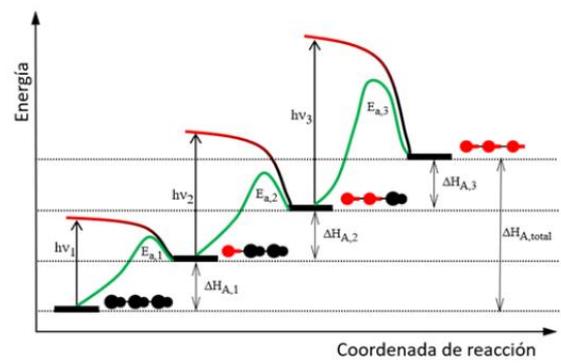
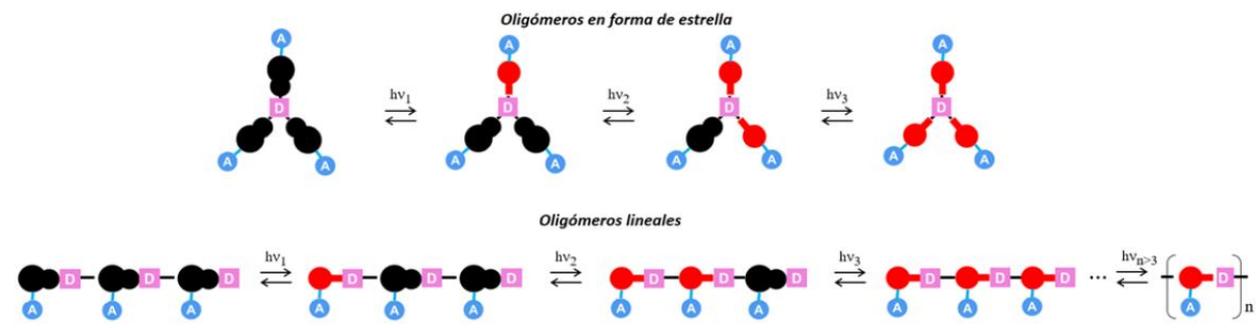


Proyectores LED



Luz blanca cálida y fría

RGB



$$hv_1 < hv_2 < hv_3 \dots < hv_n$$

$$E_{a,1} < E_{a,2} < E_{a,3} \dots < E_{a,n}$$

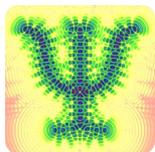
$$\Delta H_{A,total} = \Delta H_{A,1} + \Delta H_{A,2} + \Delta H_{A,3} \dots + \Delta H_{A,n}$$

Reunión:  
MATERIALES PARA ALMACENAMIENTO ENERGÉTICO

Luis Manuel FRUTOS

Alejandro JODRA

Martina NUCCI



RESMOL



Alain ARSENE

Twitter: @RESMOL\_UAH

Facebook: Resmol Alcalá



Cécilia HOGNON

Web IQAR: [www3.uah.es/iqar/](http://www3.uah.es/iqar/)



Cristina GARCÍA

Obis CASTAÑO

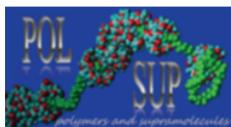
Marco MARAZZI

Manuel TEMPRADO

Thank you & sponsors



Comunidad de Madrid



Grupo de POLimeros y SUPramoleculas



Francisco MENDICUTI



Gema MARCELO



UNIÓN EUROPEA