

## Identificación del proyecto

### Nombre del proyecto

Materiales multifuncionales. Control de la interdependencia entre interacciones magnéticas, conductividad y reactividad de estados excitados. ESRIMM.

### Expediente numero

CTQ2017-83566-P

### Descripción del proyecto

La reactividad de los estados excitados es un área de investigación en rápida expansión en química, física y ciencia de materiales. Muchos procesos son inducidos por irradiación y se producen, al menos en parte, en superficies de energía potencial de estados excitados. Más aún, existen muchos materiales cuyas propiedades se activan mediante irradiación, lo que los hace muy interesantes para aplicaciones tecnológicas. Por otro lado, actualmente se están haciendo grandes esfuerzos para diseñar materiales multifuncionales. Estos materiales son de especial interés cuando las propiedades se acoplan de tal forma que un estímulo externo puede cambiar propiedades que no parecían relacionadas en un principio.

Este proyecto tiene como objetivo dar una interpretación teórica detallada de tres propiedades de materiales moleculares multifuncionales: (i) spin crossover producido por irradiación, (ii) interacciones magnéticas entre electrones desapareados, y (iii) conductividad eléctrica en moléculas. Además de estudiarlas de forma independiente, nos focalizaremos en sistemas que combinen dos de ellas para elucidar el mecanismo de su posible acoplamiento. Algunas de las preguntas candentes que se abordarán son: ¿Puede la conductividad de un sistema verse afectada por interacciones magnéticas? ¿Puede el spin crossover en una parte de la molécula influir en el acoplamiento de momentos de espín localizados en otra parte de la misma? ¿Podría mejorarse la conductividad promocionando el sistema a un estado electrónico excitado?

Los sistemas que se estudiarán en el marco de este proyecto se pueden clasificar en cuatro grupos: (i) Complejos de metales de transición con propiedades spin crossover basados principalmente en Fe(II), aunque también se considerarán otros metales menos estudiados; (ii) clusters finitos de óxido de vanadio con propiedades redox interesantes y una compleja estructura electrónica; (iii) diariletos y derivados que muestran, además del intrínseco fotocromismo del sistema no sustituido, otras propiedades aportadas por sustituyentes; y (iv) cadenas extendidas de átomos metálicos (EMACs), excelentes candidatas a actuar como conductores eléctricos en nanodispositivos.

Para obtener una descripción detallada de la estructura electrónica de estos materiales y de las propiedades de interés es necesario introducir explícitamente la dinámica de sus núcleos, no sólo en el estado fundamental sino también en los estados excitados que puedan ser poblados por irradiación. Para seguir la evolución temporal de la estructura electrónica se adoptarán diferentes esquemas. La primera aproximación se basa en la dinámica molecular ab initio con transiciones entre estados, usando DFT o funciones de onda multiconfiguracionales. Otra aproximación implica la descripción completa del sistema a nivel mecano-cuántico, propagando paquetes de onda vibracionales sobre las superficies de energía potencial de los diferentes estados electrónicos. Se realizarán estimaciones de la conductividad mediante las funciones de Green de no-equilibrio.

Los objetivos más tangibles del proyecto son: una detallada descripción del ciclo fotoquímico del spin crossover inducido por luz; propuestas para controlar la conductividad de sistemas moleculares mediante irradiación o mediante transformaciones redox del material; y mecanismos para acoplar spin crossover reversible y orden magnético.

## Financiación

### Entidad financiadora

Ministerio de Ciencia e Innovación (MICINN), Agencia Estatal de Investigación (AEI) y Fondo Europeo de Desarrollo Regional (FEDER)

### Importe

72.600,00 €



**Unión Europea**

Fondo Europeo de Desarrollo regional  
*"Una manera de hacer Europa"*

**Este proyecto está cofinanciado por el Fondo Europeo de Desarrollo Regional (FEDER). "Una manera de hacer Europa"**