



Universidad de Oviedo

Complejos organometálicos para el tratamiento del cáncer y el aprovechamiento solar

Paula Fernández Pisonero

Escuela Altas Presiones XIII – *Mieres 2026*

Motivación



Cáncer

Reto: destrucción selectiva de células tumorales.

Herramienta: Terapia Fotodinámica (PDT)
→ tratamiento mínimamente invasivo.



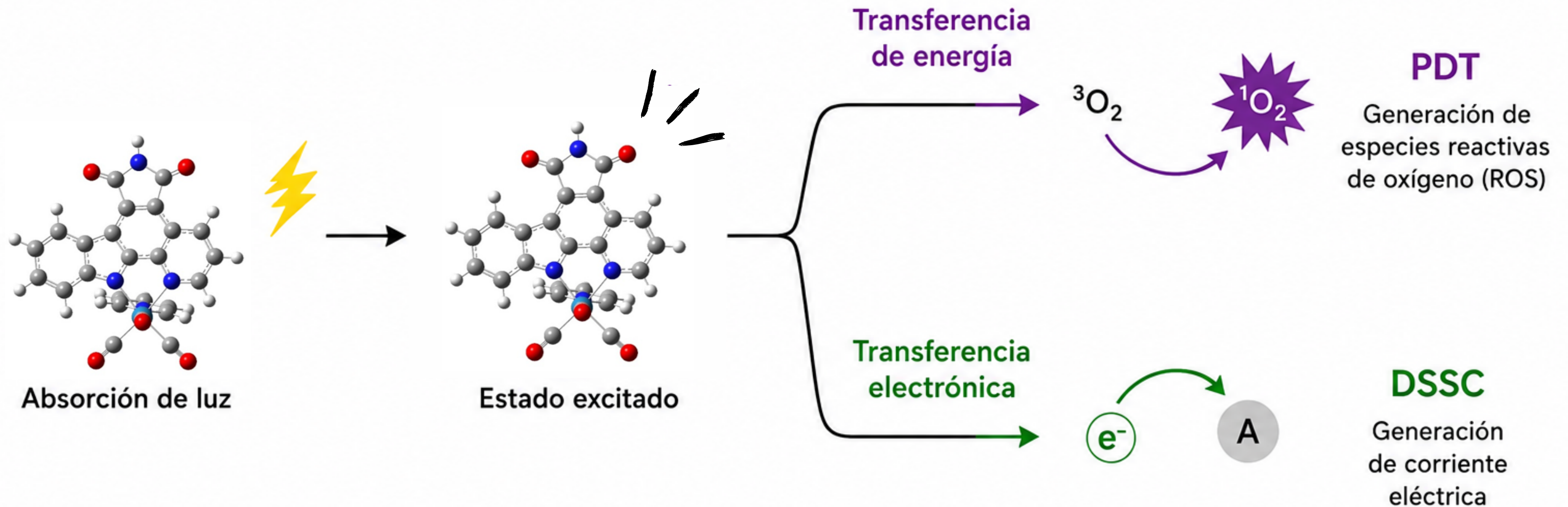
Energía

Reto: conversión eficiente y limpia de la energía solar en electricidad.

Herramienta: Celdas Solares Sensibilizadas por Colorante (DSSCs)

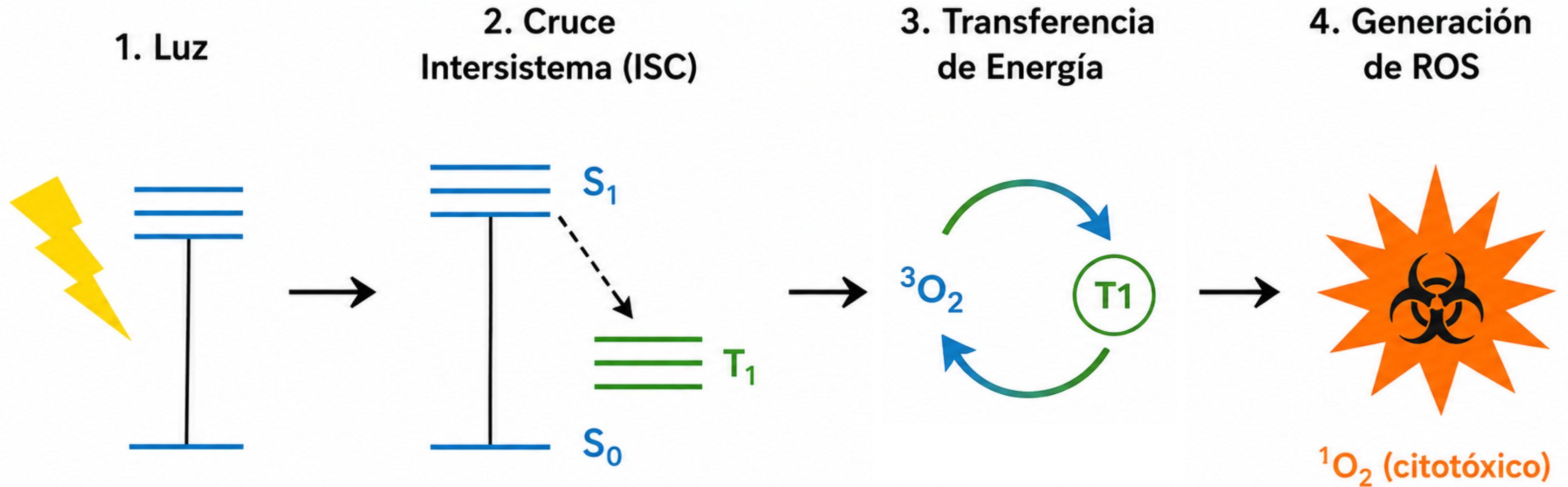
Ambos dependen de un mismo principio: la capacidad de una molécula para absorber luz y transformar dicha energía en procesos químicos: **FOTOSENSIBILIZADORES**.

Procesos fotoinducidos



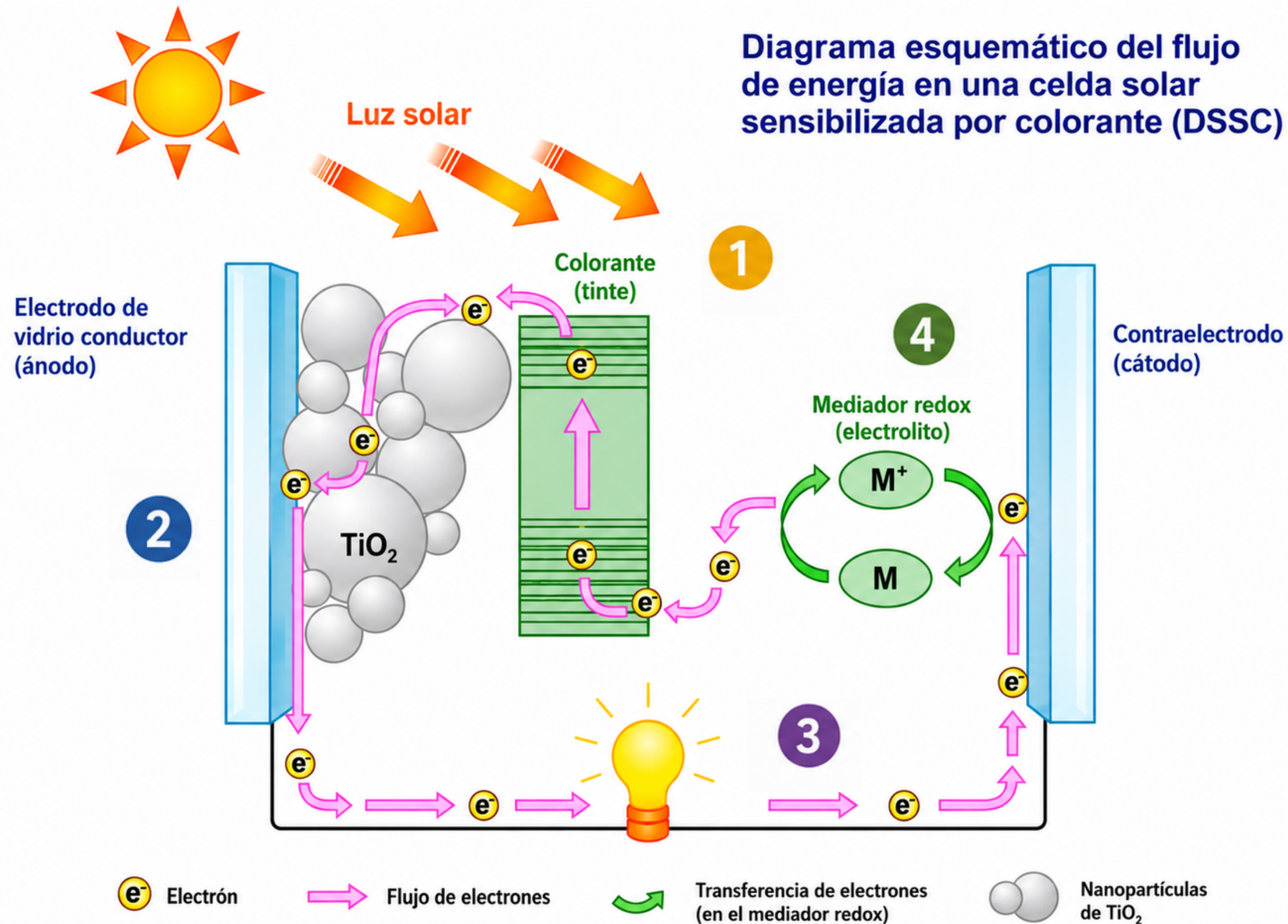
La eficiencia del proceso depende de las propiedades del fotosensibilizador.

PDT



El fotosensibilizador canaliza la luz para fabricar una toxina letal en la zona irradiada.

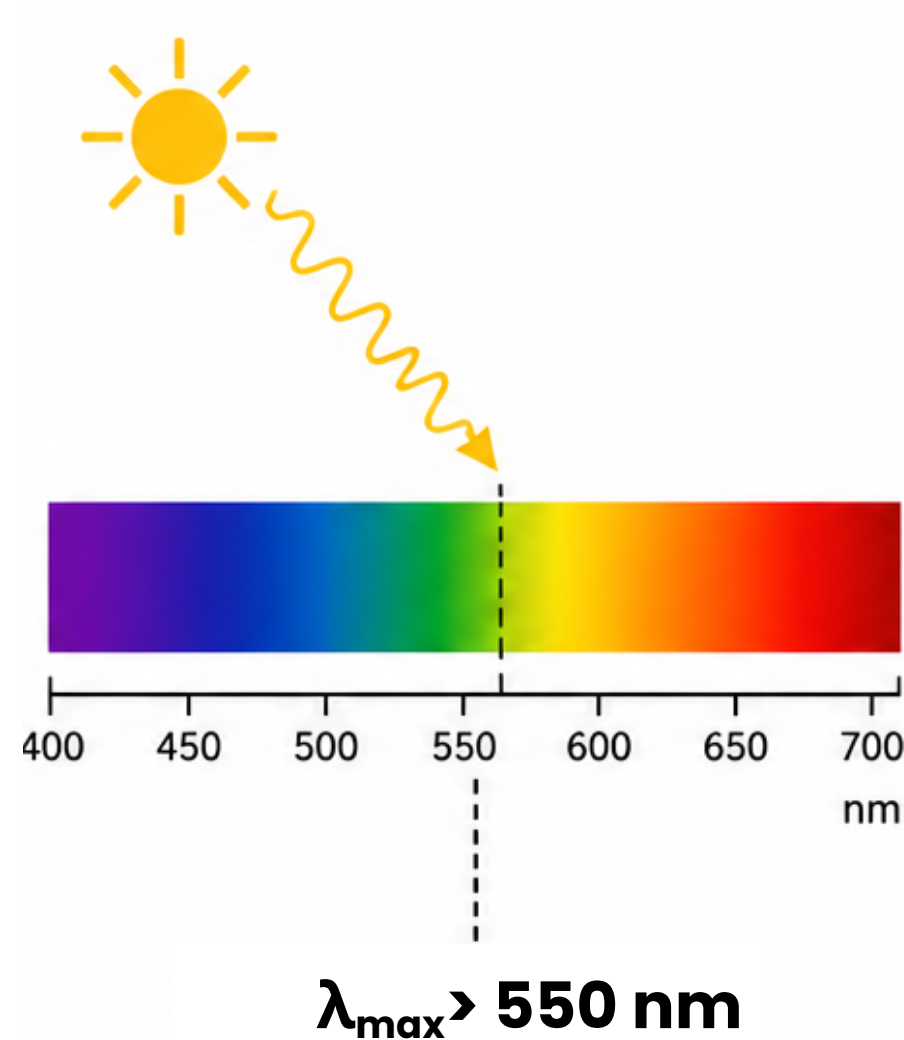
DSSC



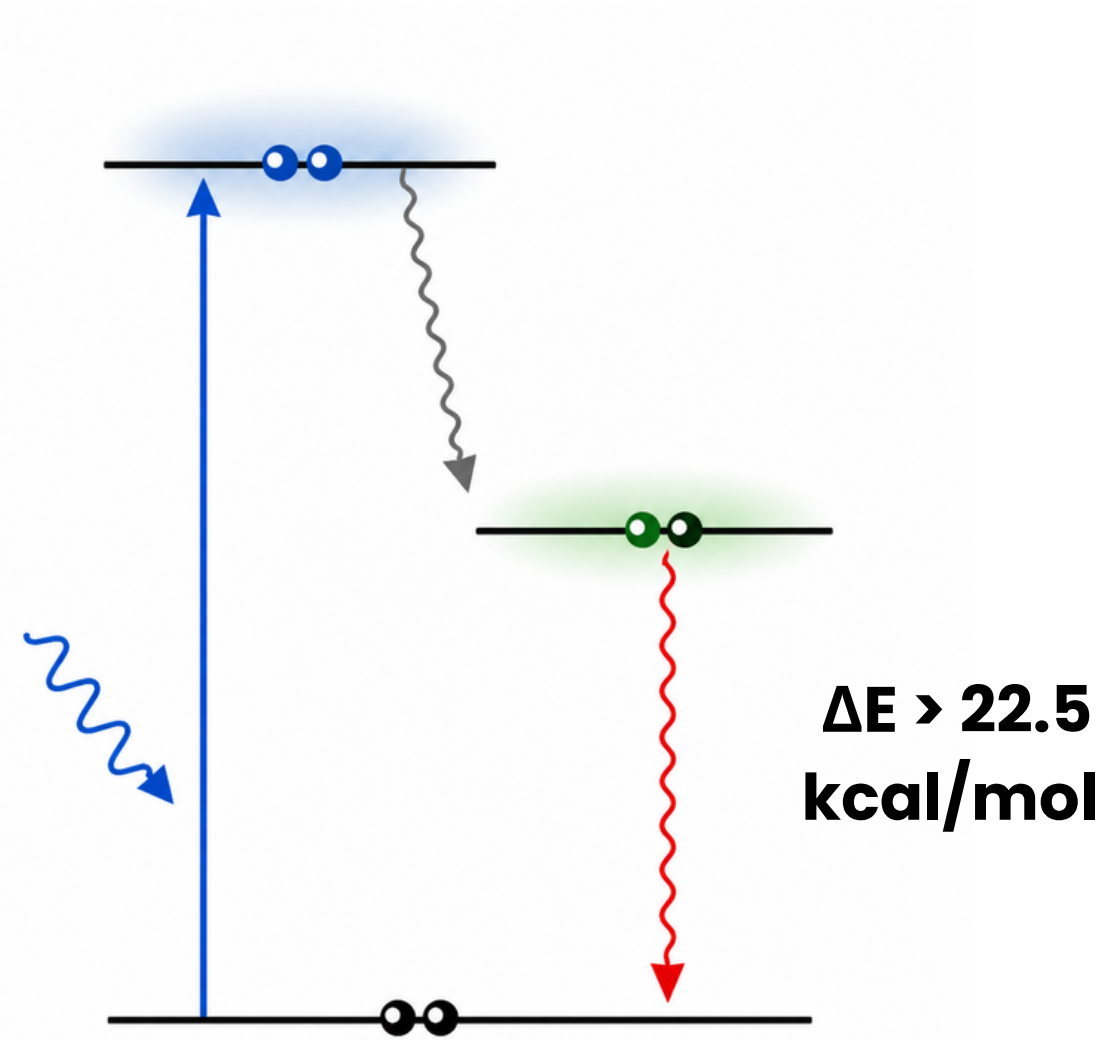
- 1** **Excitación:**
Irradiación del colorante (excitación inicial).
- 2** **Inyección electrónica:**
El electrón excitado en el colorante se inyecta en la banda de conducción del semiconductor (TiO_2).
- 3** **Generación de corriente:**
Los electrones se desplazan a través del circuito externo generando corriente eléctrica hasta llegar al contraelectrodo.
- 4** **Regeneración:**
El electrolito (I^-) dona un electrón al colorante oxidado (S^+).
En el electrolito: $3 \text{I}^- \rightarrow \text{I}_3^-$.

Requisitos

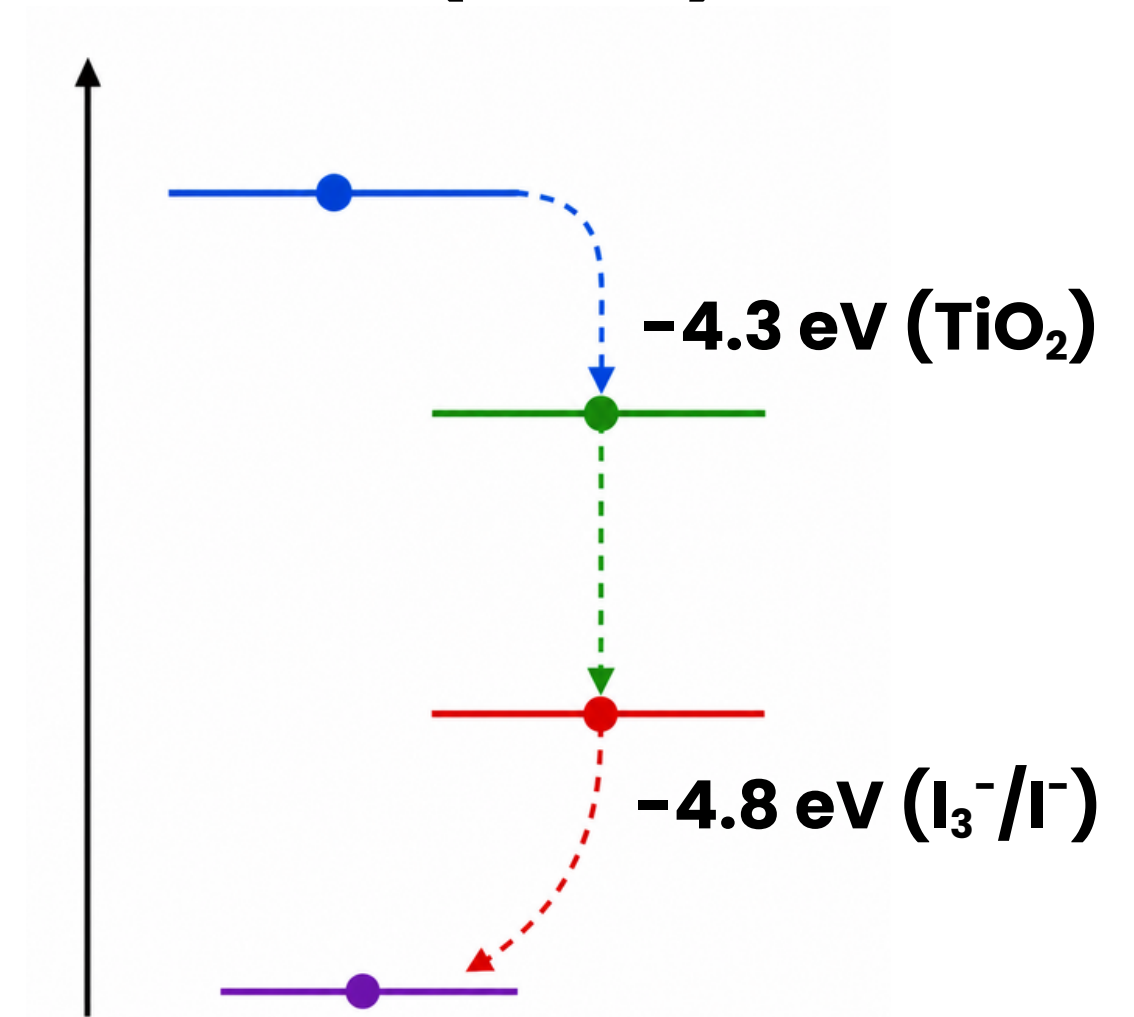
Absorción de Luz (común)



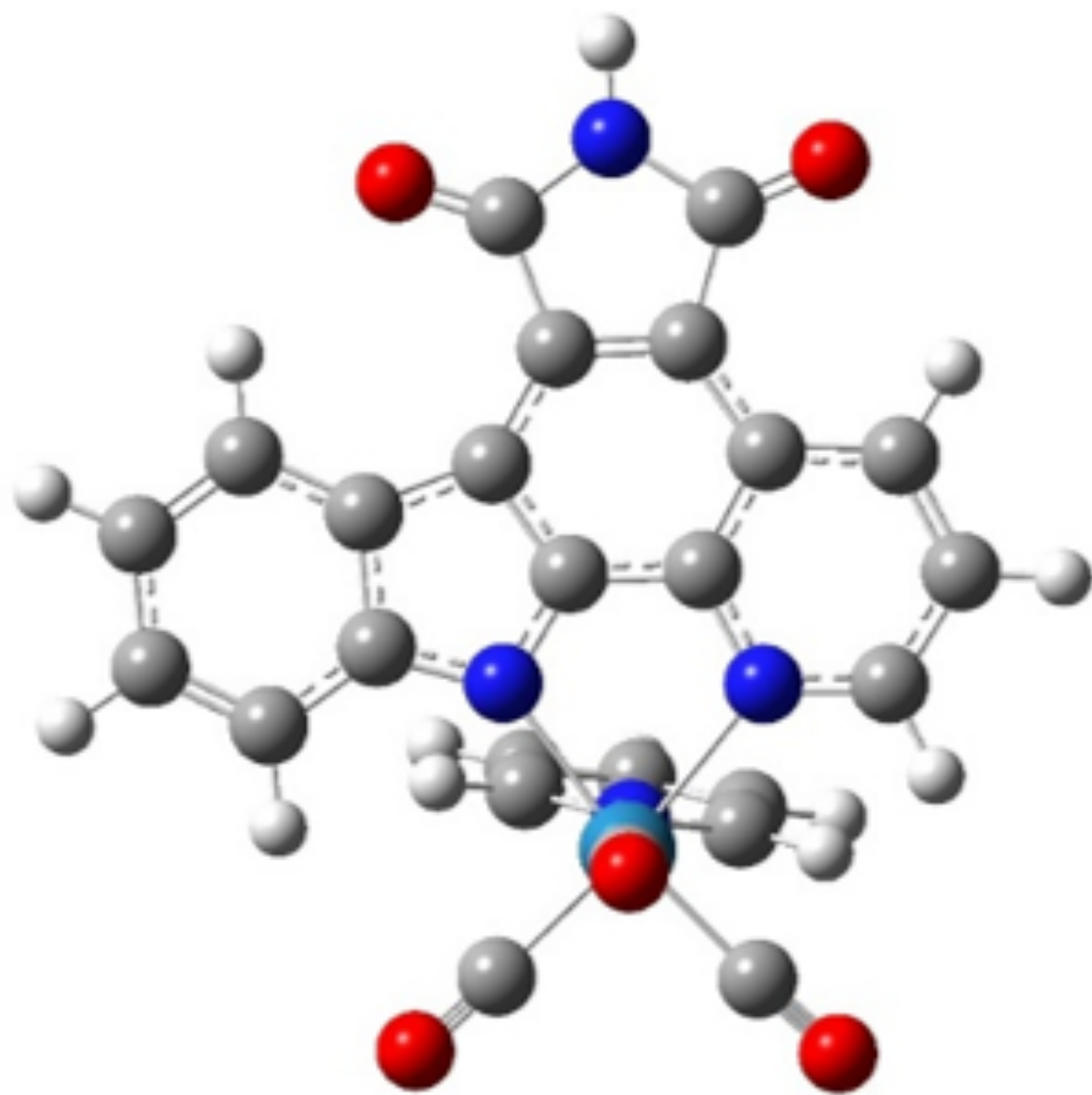
Generación de ROS (PDT)



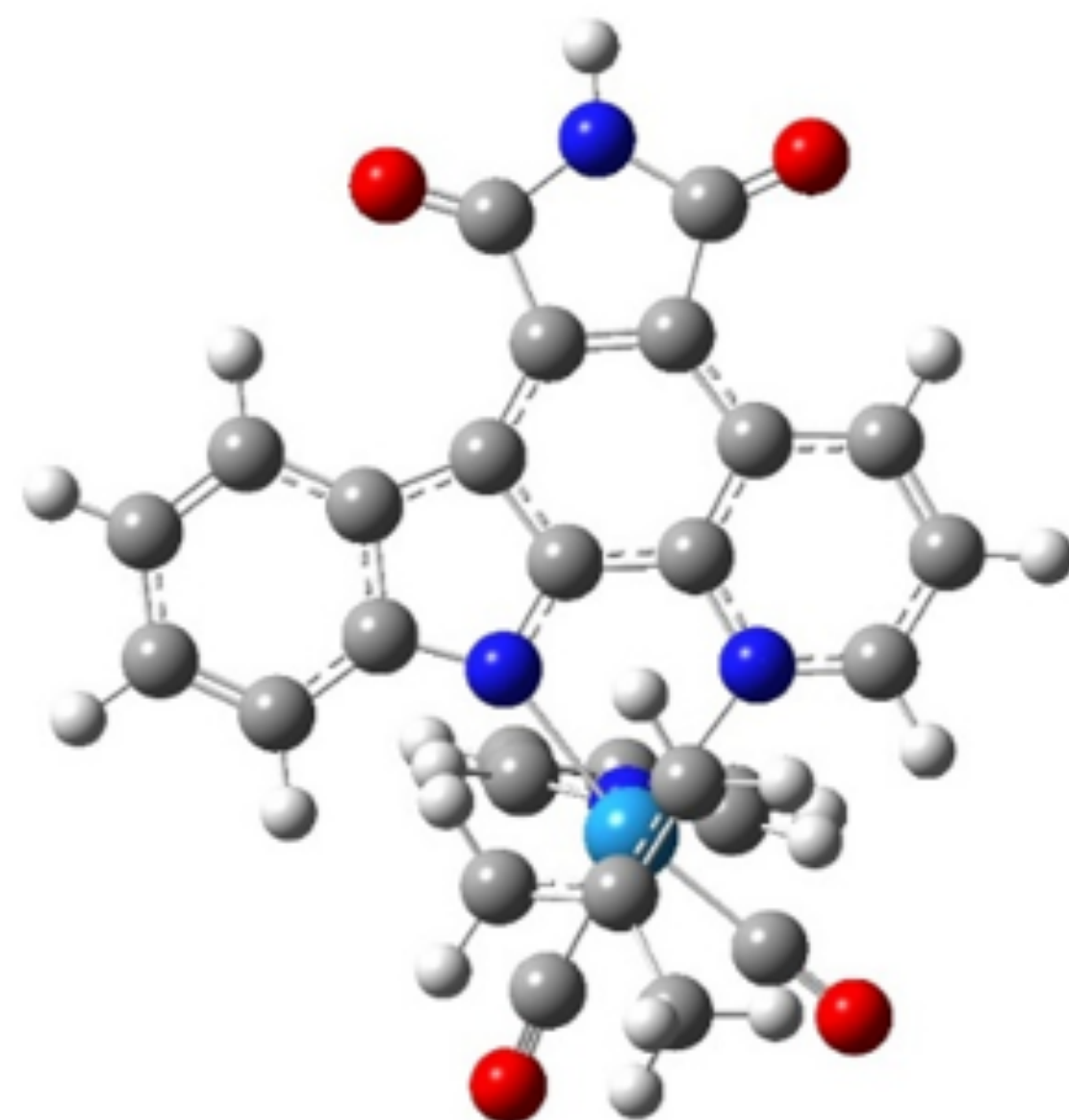
Alineación niveles de energía (DSSC)



Moléculas base estudiadas

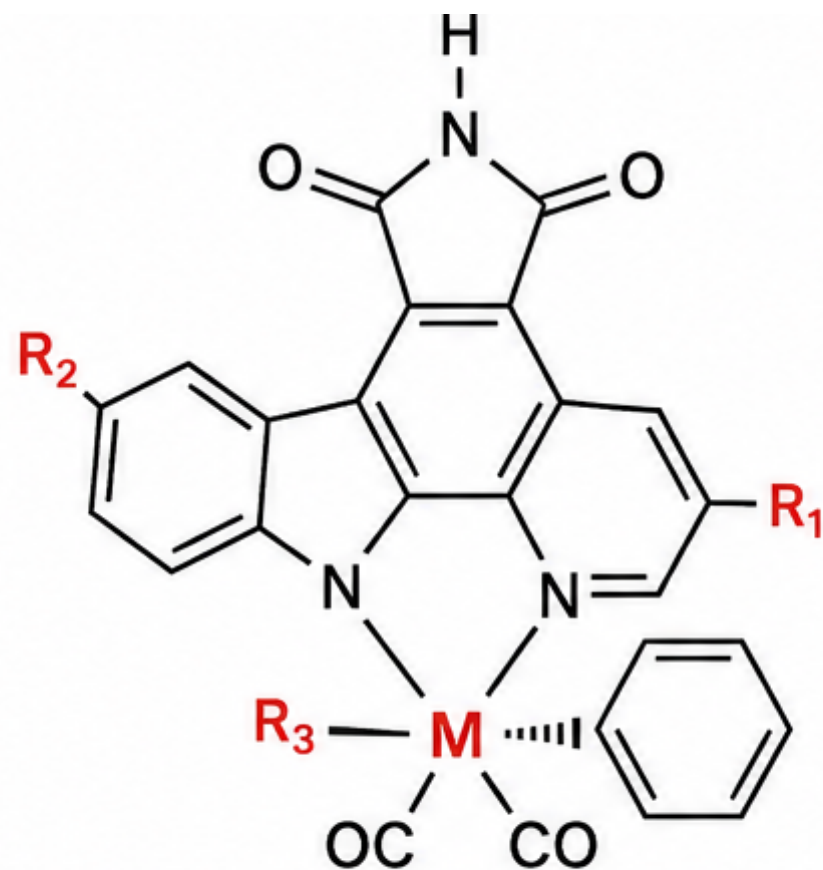


$[\text{Re}(\text{CO})_3(\text{epycb})\text{py}]$



$[\text{W}(\text{CO})_2(\eta^3\text{-C}_4\text{H}_7)(\text{epycb})\text{py}]$

Selección de sustituyentes



Objetivo: reducir el gap energético HOMO–LUMO para desplazar la longitud de onda máxima de absorción hacia el rojo.

Sustituyentes empleados:



F: aceptor de densidad electrónica → estabiliza LUMO



OMe: donador de densidad electrónica → desestabiliza HOMO

	Re → R ₃ = CO		W → R ₃ = metilalilo	
	R ₁	R ₂	R ₁	R ₂
-F	F	H	F	H
-OMe	H	OMe	H	OMe
-F-OMe	F	OMe	F	OMe

Conclusiones

Resultado principal	Conclusión
λ_{max} Re = 505 nm	Menor absorción visible
λ_{max} W = 705 nm	Mejor aprovechamiento de la luz
F + OMe	Desplazamiento al rojo
$\Delta E(T_1-S_0) > 22.5$ kcal/mol	Generación de 1O_2
HOMO/LUMO adecuados	Aptos para DSSC

Los complejos de W(II), especialmente los sustituidos, presentan las propiedades más prometedoras para aplicaciones fotoinducidas en PDT y DSSC.