



UNIVERSIDAD
DE GRANADA

PROPUESTA DE TRABAJO FIN DE GRADO

GRADO EN QUÍMICA

CURSO 2023/2024



Facultad de Ciencias

PROPUESTA DEL DEPARTAMENTO/EMPRESA

DATOS BÁSICOS DEL TFG

| | | | |
|---------------------------|---|--------------------------|---|
| TÍTULO TFG | Transferencia acoplada de protones y electrones en procesos catalíticos | | |
| CÓDIGO TFG ⁽¹⁾ | QI-16 | TIPOLOGÍA ⁽²⁾ | C |

⁽¹⁾ A rellenar por la dirección del dpto que vendrá dado como: código del dpto-Nº de orden (p.e.: QA-01)

⁽²⁾ Al final del documento se encuentran las diferentes tipologías

| | | |
|--------------|---|-------------------------------------|
| OFERTADO POR | Profesor del Departamento | <input checked="" type="checkbox"/> |
| | Profesor del Departamento junto con Empresa o Institución | <input type="checkbox"/> |

DATOS DE LA ENTIDAD (donde se va a realizar el TFG)

| | | | |
|--|--|---------------------|-------|
| CENTRO (Departamento, institución o empresa) | Química Inorgánica, Facultad de Ciencias, Universidad de Granada | | |
| DIRECCIÓN POSTAL ⁽³⁾ | Av. Fuentenueva sn | | |
| LOCALIDAD ⁽³⁾ | Granada | C.P. ⁽³⁾ | 18071 |

⁽³⁾ A rellenar en el caso de realizarse en una empresa

DATOS DEL TUTOR

| | | | |
|--|----------------------------|--------|--|
| TUTOR 1 (Tutor académico en caso de realizar el TFG en una empresa o institución) | | | |
| NOMBRE Y APELLIDOS | Pablo Garrido Barros | | |
| DEPARTAMENTO | Química Inorgánica | | |
| CARGO ⁽⁴⁾ | Investigador Ramón y Cajal | | |
| TELÉFONO | 958 24 33 22 | E-MAIL | pgarridobarros@ugr.es |

Rellenar en caso de haber un segundo tutor

| | | | |
|---|--|--------|--|
| TUTOR 2 | | | |
| NOMBRE Y APELLIDOS | | | |
| DEPARTAMENTO | | | |
| CARGO ⁽⁴⁾ | | | |
| TELÉFONO | | E-MAIL | |
| TUTOR DE LA EMPRESA O INSTITUCIÓN (Rellenar en caso de realizar el TFG en una empresa o institución) | | | |
| NOMBRE Y APELLIDOS | | | |
| TITULACIÓN | | | |
| TELÉFONO | | E-MAIL | |

⁽⁴⁾ Catedrático, Profesor Titular, Profesor Contratado Doctor,....

MEMORIA DE LA PROPUESTA DE TFG

Introducción.

La mayoría de los procesos químicos de relevancia en la obtención y aprovechamiento de energía implican la transferencia de protones y electrones, tanto en el caso de sistemas artificiales desarrollados por los humanos como en procesos biológicos que ocurren de forma natural. Un ejemplo de esto es la fotosíntesis natural, donde el centro activo del fotosistema II oxida agua a oxígeno generando protones y electrones que posteriormente se emplean en la reducción de CO_2 para generar los compuestos necesarios para el desarrollo de las plantas. De igual forma, la fotosíntesis artificial es una estrategia desarrollada por los científicos que pretende imitar el proceso natural como método de aprovechamiento de energía solar renovable para la generación de combustibles limpios y sostenibles.

De esta forma, entender el mecanismo fundamental por el que los protones y electrones se transfieren es de vital importancia para comprender el funcionamiento de los sistemas catalíticos, tanto naturales como artificiales, y desarrollar nuevos procesos con eficiencia y actividad mejorada que permitan una expansión de estas alternativas sostenibles de aprovechamiento energético. Un camino de reacción que ha demostrado jugar un papel fundamental en numerosas reacciones es lo que se conoce como transferencia acoplada de electrones y protones (PCET por sus siglas en inglés), en el que un protón y un electrón se transfieren de forma conjunta a una molécula sustrato en un solo paso de reacción. Este tipo de reactividad ofrece importantes ventajas frente al mecanismo equivalente en el que el protón y el electrón se transfieren en pasos subsecuentes y diferenciados de reacción (ET-PT o PT-ET por sus siglas en inglés), ya que en este último se generan intermedios de alta energía con carga electrónica (positiva o negativa). Los procesos PCET permiten evitar esos intermedios energéticos.

A pesar de la aparente simplicidad de estas reacciones, los procesos PCET suponen desafíos fundamentales emocionantes tanto desde un punto de vista teórico, considerando una visión microscópica y cuántica del proceso, como práctico, referido a los criterios de diseño de catalizadores que permitan acceder a estos caminos de reacción más favorables. Por tanto, este proyecto pretende realizar una revisión bibliográfica de los sistemas catalíticos relevantes a procesos energéticos como ruptura de agua, reducción de CO_2 o reducción de N_2 en los que las etapas PCET jueguen un papel fundamental.

Objetivos.

Objetivo general del TFG: que el estudiante obtenga una visión completa del desarrollo de un trabajo de revisión bibliográfica en el campo de la catálisis para aplicaciones energéticas y proporcionar las herramientas necesarias para la búsqueda, análisis y discusión de resultados previamente publicados desde un punto de vista crítico para ofrecer una perspectiva de utilidad al campo de investigación.

Para ello, este proyecto consta de tres objetivos científicos específicos:

- 1-Entender los principios fundamentales de los procesos PCET.
- 2-Evaluar las implicaciones en el desarrollo de catalizadores que permitan acceder a procesos PCET.
- 3-Explorar las aplicaciones más relevantes de los procesos PCET en catálisis para la obtención de combustibles renovables.

Resumen de los trabajos a realizar por el estudiante/Plan de trabajo.

El estudiante estará inicialmente involucrado en la búsqueda bibliográfica de artículos científicos centrados en el estudio fundamental de procesos PCET y su aplicación en procesos químicos de relevancia a la conversión de energía renovable realizando una primera lectura diagonal. En base a esta búsqueda, el estudiante se involucrará en el desarrollo de un esquema organizativo de la información para desarrollar un documento final similar a un artículo de revisión.

Con esta plantilla de revisión, el estudiante realizará una lectura más profunda de la bibliografía seleccionada y extraerá de forma esquemática la información más relevante y los puntos críticos a discutir. Este proceso se aplicará a cada una de las secciones acordadas de las que dispondrá el documento.

De forma paralela, el estudiante comenzará con la tarea de escritura desde un punto de vista objetivo que permita al lector acceder de forma rápida y directa a la información más relevante de los correspondientes trabajos científicos, pero añadiendo un toque crítico que ofrezca la perspectiva del autor de la revisión en un contexto amplio del tema de investigación.

Finalmente, el estudiante incluirá una sección de conclusiones y perspectiva de futuro donde se intentará dar un resumen objetivo e integrado del ámbito de estudio y una visión más personal de las direcciones y oportunidades futuras.

Una vez cumplimentado deberá ser enviado junto con el resto de las propuestas del departamento en formato pdf (Word transformado en pdf, NO escaneado) al correo: gradoquimica@ugr.es. El nombre de cada fichero debe de coincidir con el código del TFG.

TIPOLOGÍA⁽²⁾

- A.** Trabajos de investigación con orientación básica o aplicada, cuya temática se relacione con los contenidos de la titulación, como:
- A1.** Estudio de casos, teóricos o prácticos, relacionados con la temática del Grado, a partir de material ya disponible en los Centros.
 - A2.** Trabajos experimentales, de toma de datos de campo, de laboratorio, etc.
 - A3.** Elaboración de guías prácticas relacionadas con la temática del Grado.
- B.** Trabajos científico-técnicos representativos del ejercicio profesional para el que capacita la titulación, como:
- B1.** Elaboración de un informe o un proyecto de naturaleza profesional.
 - B2.** Elaboración de un plan de empresa.
 - B3.** Simulación de encargos profesionales.
- C.** Trabajos bibliográficos (**C**)