



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	Desarrollo de electrodos reticulares activos para catálisis tándem de reducción		
CÓDIGO TFG <sup>(1)</sup>	QI-17	TIPOLOGÍA <sup>(2)</sup>	A2

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

<sup>(2)</sup> 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 <sup>(3)</sup>	Av. Fuentenueva sn		
LOCALIDAD <sup>(3)</sup>	Granada	C.P. <sup>(3)</sup>	18071

<sup>(3)</sup> A rellenar en el caso de realizarse en una empresa

#### DATOS DEL TUTOR

<b>TUTOR 1 (Tutor académico en caso de realizar el TFG en una empresa o institución)</b>			
NOMBRE Y APELLIDOS	Pablo Garrido Barros		
DEPARTAMENTO	Química Inorgánica		
CARGO <sup>(4)</sup>	Investigador Ramón y Cajal		
TELÉFONO	958 24 33 22	E-MAIL	<a href="mailto:pgarridobarros@ugr.es">pgarridobarros@ugr.es</a>

#### Rellenar en caso de haber un segundo tutor

<b>TUTOR 2</b>			
NOMBRE Y APELLIDOS	Jorge Andrés Rodríguez Navarro		
DEPARTAMENTO	Química Inorgánica		
CARGO <sup>(4)</sup>	Catedrático		
TELÉFONO	958248093	E-MAIL	<a href="mailto:jarn@ugr.es">jarn@ugr.es</a>
<b>TUTOR DE LA EMPRESA O INSTITUCIÓN (Rellenar en caso de realizar el TFG en una empresa o institución)</b>			
NOMBRE Y APELLIDOS			
TITULACIÓN			
TELÉFONO		E-MAIL	

<sup>(4)</sup> Catedrático, Profesor Titular, Profesor Contratado Doctor,....

## MEMORIA DE LA PROPUESTA DE TFG

### Introducción.

El uso excesivo de los combustibles fósiles y sus consecuencias ambientales derivadas ha despertado la necesidad de encontrar soluciones alternativas sostenibles basadas en recursos renovables, tarea en la que la investigación química juega un papel fundamental.

La generación de hidrógeno verde constituye hoy en día una de las estrategias más prometedoras para sustituir el uso de recursos fósiles como fuente de energía. La ruptura de la molécula de agua utilizando fuentes renovables como la energía solar plantea un proceso sostenible de generación de  $H_2$  (y  $O_2$ ) que puede ser posteriormente empleado directamente como combustible o agente reductor en procesos de síntesis industriales (p.ej. hidrogenación de compuestos orgánicos insaturados). Sin embargo, el hidrógeno molecular plantea importantes desafíos en cuanto a su almacenamiento y transporte, ya que sus propiedades fisicoquímicas le confieren un gran carácter fugaz y explosivo, y dificultan su almacenamiento en estado líquido debido a su bajo punto de ebullición.

Una estrategia que permite evitar dichos inconvenientes asociados al hidrógeno es su generación *in situ* para su uso subsecuente en los procesos deseados. Compuestos como el agua se podrían emplear como portadores de hidrógeno, ya que su ruptura generaría *in situ* el hidrógeno necesario para el proceso de hidrogenación posterior, estableciendo así un proceso catalítico *tándem*. De esta forma, se pueden sintetizar los mismos productos de interés industrial que utilizan  $H_2$  como materia prima pero evitando la necesidad de almacenar y transportar grandes cantidades de este gas. Además, esta estrategia también ofrece una alternativa al almacenamiento de  $H_2$  gas, ya que se pueden generar productos portadores de hidrógeno líquidos a temperatura ambiente para un mejor transporte de energía. Esta alternativa *tándem*, relativamente inexplorada, se ha comenzado a aplicar en reacciones como la reducción electroquímica de  $N_2$  a amoníaco, aunque su aplicación extendida en síntesis orgánica permanece inmadura.

Los materiales reticulares basados en redes metalorgánicas (MOFs por sus siglas en inglés) son plataformas prometedoras para alcanzar dichos objetivos. El acoplamiento de MOFs activos en procesos de hidrogenación a electrodos activos en la reducción de protones a  $H_2$  ofrece un sistema integrado para generación y aprovechamiento *in situ* de  $H_2$  en procesos de síntesis orgánica de productos químicos finos y/o portadores líquidos de hidrógeno.

### Objetivos.

Objetivo general del TFG: que el estudiante obtenga una visión completa del desarrollo de un trabajo de investigación en el campo de la electrocatálisis para aplicaciones energéticas y proporcionar una formación completa en cuanto a técnicas experimentales y metodologías de análisis de datos y discusión de resultados.

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

- 1-Desarrollar y caracterizar nuevos materiales híbridos de electrodos carbonosos y redes metalorgánicas.
- 2-Estudiar las propiedades estructurales y electroquímicas de estos materiales.
- 3-Aplicar estos nuevos electrodos en procesos *tándem* de catálisis que integren evolución de  $H_2$  e hidrogenación de compuestos orgánicos.

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

El estudiante estará inicialmente involucrado en la preparación y caracterización de redes metalorgánicas donde aprenderá en primer lugar las técnicas típicas de síntesis y purificación aplicadas en este campo, como síntesis solvotermal y cristalización. En segundo lugar, el estudiante estudiará las propiedades de estos compuestos mediante su caracterización estructural y espectroscópica empleando diversas técnicas analíticas, entre las que se incluyen difracción de rayos X, isotermas de adsorción o espectroscopía electrónica. Posteriormente, el estudiante abordará el anclaje de estos materiales en soportes de carbono (glassy carbon) para obtener los electrodos híbridos finales. El éxito de estos procesos se evaluará mediante técnicas de microscopía y análisis químico de la composición (p.ej. ICP-MS).

Tras confirmar la generación de los materiales específicos, el estudiante iniciará el estudio electroquímico de sus propiedades redox en diferentes condiciones de reacción, incluyendo disolvente y pH. Esto incluye la evaluación de la estabilidad frente a potenciales catódicos y condiciones ácidas favorables para la reducción de protones a  $H_2$ . Estos resultados permitirán el cálculo de las propiedades termodinámicas relevantes en las reacciones redox y darán paso a la evaluación de la reactividad electroquímica de hidrogenación de sustratos orgánicos entre los que se explorará diferentes grupos funcionales como cetonas, alquenos, alquinos e iminas.

Por último, el estudiante explorará la generación de compuestos orgánicos de interés basándose en los resultados preliminares de la etapa anterior mediante el proceso planteado de electrocatálisis *tándem*. Estos experimentos incluyen la optimización de condiciones de reacción considerando aspectos como: tipo de sustrato, potencial redox, disolvente, tamaño y estructura del MOF. Además, esto permitirá al estudiante adquirir habilidades en los procedimientos de purificación y análisis de los productos de reacción como cromatografía de gases y líquidos.

El estudiante participará tanto de los procesos creativos del proyecto como la búsqueda de plataformas prometedoras, como en los de análisis de datos y discusión de resultados, lo que dará lugar a una experiencia completa de la actividad científica en el campo de la investigación química.

--

---

**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](mailto:gradoquimica@ugr.es). El nombre de cada fichero debe de coincidir con el código del TFG.**

---

## **TIPOLOGÍA<sup>(2)</sup>**

- 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**)