



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 fotocatalizadores basados en cajas metalorgánicas para conversión de energía solar		
CÓDIGO TFG <sup>(1)</sup>	QI-18	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			
DEPARTAMENTO			
CARGO <sup>(4)</sup>			
TELÉFONO		E-MAIL	
<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 progreso hacia un futuro sostenible está principalmente limitado por nuestra capacidad para cambiar los modelos energéticos e industriales incorporando recursos renovables y reduciendo la contaminación derivada, tarea en la que la investigación química juega un papel fundamental.

La conversión de energía solar para la generación de combustibles renovables y productos de alto valor añadido es una de las alternativas al uso de recursos fósiles más prometedoras para abastecer nuestras necesidades de energía, materias primas y productos químicos. En particular, la utilización de luz como fuente de energía para la transferencia de protones y electrones a sustratos insaturados, tanto orgánicos (p.ej. alquenos o alquinos) o inorgánicos (p.ej. CO<sub>2</sub> o N<sub>2</sub>) por medio de fotocatalisis es un campo en crecimiento exponencial ya que permite la síntesis sostenible de productos industrialmente relevantes (p.ej. etileno o amoniaco) y el almacenamiento de la energía solar en combustibles *verdes* (p.ej. metanol).

Para dicho fin, un fotocatalizador debe de (1) absorber luz visible, (2) generar estados excitados de alta energía capaces de transferir electrones y protones a los sustratos deseados y (3) regenerar su estado inicial mediante la oxidación de un donador de electrones sacrificial, idealmente agua. Las cajas metalorgánicas, compuestos moleculares formados por nodos metálicos y ligandos orgánicos puente, han demostrado propiedades prometedoras en los tres aspectos mencionados, convirtiéndolas en excelentes candidatos para desarrollar sistemas fotocatalíticos. La absorción de luz visible por parte de los ligandos orgánicos, típicamente anillos aromáticos, induce un salto electrónico hacia los nodos metálicos generando una especie excitada con separación de cargas que es altamente reactiva en procesos redox: el nodo metálico adquiere un elevado carácter reductor, capaz de transferir electrones hacia un sustrato, mientras que el ligando oxidado resultante tiene un fuerte carácter oxidante, capaz de extraer un electrón regenerando así el catalizador.

Este proyecto tiene como objetivo aprovechar estas propiedades fotofísicas y redox de las cajas metalorgánicas para explorar nueva reactividad fotocatalítica de relevancia en los procesos de conversión y almacenamiento de energía solar.

### Objetivos.

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

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

1-Desarrollar y caracterizar nuevos compuestos basados en cajas metalorgánicas.

2-Estudiar las propiedades fotofísicas y electroquímicas de estos compuestos.

3-Aplicar las cajas metalorgánicas desarrolladas para la reducción fotocatalítica de compuestos orgánicos modelo.

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

El estudiante estará inicialmente involucrado en la preparación y caracterización de cajas 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 estructurales y electrónicas de estos compuestos mediante su caracterización espectroscópica empleando diversas técnicas analíticas entre las que se incluyen difracción de rayos X, RMN o espectroscopía electrónica

Tras confirmar la generación de los materiales específicos, el estudiante abordará el estudio fotofísico y electroquímico de sus propiedades. Esto incluye la obtención de los espectros de absorción y emisión de los compuestos, la medición del tiempo de vida de los correspondientes estados excitados, el estudio de los procesos redox presentes, y finalmente el cálculo de las propiedades termodinámicas relevantes a reacciones redox tanto del estado fundamental como del estado excitado.

Por último, el estudiante explorará la actividad fotocatalítica de estas cajas para la reducción de compuestos orgánicos modelo incluyendo diferentes grupos funcionales insaturados como cetonas, olefinas o iminas. Estos experimentos incluyen la optimización de condiciones de reacción considerando aspectos como: tipo de sustrato, fuente de luz, disolvente, donadores sacrificiales de protones y de electrones. Además, esto permitirá al estudiante adquirir habilidades en el uso de líneas Schlenk para trabajar en atmósfera inerte, y procedimientos de purificación y análisis de los productos de reacción como cromatografía de gases y líquidos.

Por último, el estudiante participará tanto en los procesos creativos del proyecto, como la búsqueda de plataformas prometedoras, como en los de análisis de datos y discusión de resultados incluyendo reuniones de grupo, 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**)