



1. DATOS BÁSICOS DEL TFG:

Título: Conversión de energía solar mediante fotocatalisis

Descripción general (resumen y metodología):

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. CO₂ o N₂) por medio de fotocatalisis es un campo en crecimiento exponencial ya que permite la síntesis sostenible de productos industrialmente relevantes (p.ej. etileno o amoníaco) 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 el estudio teórico/computacional de la actividad fotocatalítica de cajas metalorgánicas de relevancia en los procesos de conversión y almacenamiento de energía solar.

Metodología:

El estudiante estará inicialmente involucrado en el modelado de cajas metalorgánicas utilizando mecánica cuántica donde se familiarizará con la metodología DFT y los programas de cálculo (Gaussian) y visualización (GaussView y Chemcraft) de resultados. Aprovechando este conocimiento, el estudiante profundizará en la evaluación de las propiedades termodinámicas de estos sistemas, especialmente aquellas relacionadas con los procesos redox presentes y las características ácido-base en los diferentes estados de reacción.

Para obtener información de los estados excitados de estos sistemas, el estudiante abordará su estudio mediante TD-DFT para explorar las diferentes excitaciones posibles con luz visible, los estados más estables, y sus correspondientes propiedades termodinámicas relevantes a la reactividad fotocatalítica.

Por último, el estudiante explorará el mecanismo de reacción de estos sistemas metalorgánicos para la reducción de sustratos orgánicos modelos, lo que incluye identificar los estados reactivos, los pasos de reacción incluyendo transferencia de electrones y protones, la regeneración del catalizador, y los productos e intermedios más favorables.

El estudiante participará tanto de los procesos creativos del proyecto como la proposición de mecanismos viables de reacción, 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 computacional.

Tipología: Estudio de casos, teóricos o prácticos, relacionados con la temática del Grado.

Objetivos planteados:

Objetivo general del TFG: que el estudiante obtenga una visión completa del desarrollo de un trabajo de investigación en el campo de la química cuántica computacional para modelar reacciones catalíticas de relevancia para conversión energética y proporcionar una formación completa en cuanto a técnicas computacionales 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-Modelar la estructura y propiedades químicas de cajas metalorgánicas mediante mecánica cuántica, en específico la metodología "Density Functional Theory (DFT)"

2-Evaluar las propiedades fotofísicas y del estado excitado mediante "Time Dependent-DFT (TD-DFT)".

3-Estudiar el mecanismo de reacción del proceso de reducción fotocatalítica de substratos orgánicos.

Bibliografía básica:

1- Delgado, P. et al. ACS Appl. Mater. Interfaces **2022**, 14, 26501-26506

2-Nocera, D. G. Proton-Coupled Electron Transfer: The Engine of Energy Conversion and Storage. J. Am. Chem. Soc. **2022**, 144, 3, 1069-1081

3- Lennox, J. C.; Kurtz, D. A.; Huang, T.; Dempsey, J. L. Excited-State Proton-Coupled Electron Transfer: Different Avenues for Promoting Proton/Electron Movement with Solar Photons. ACS Energy Lett. **2017**, 2 (5), 1246-1256

4- Garrido-Barros, P.; Derosa, J.; Chalkley, M.; Peters, J. Tandem electrocatalytic N₂ fixation via concerted proton-electron transfer. **2021**, 609, 71-76

Recomendaciones y orientaciones para el estudiante:

Plazas: 1

2. DATOS DEL TUTOR/A:

Nombre y apellidos: PABLO GARRIDO BARROS

Ámbito de conocimiento/Departamento: QUÍMICA INORGÁNICA

Correo electrónico: pgarridobarros@ugr.es

3. COTUTOR/A DE LA UGR (en su caso):

Nombre y apellidos:

Ámbito de conocimiento/Departamento:

Correo electrónico:

4. COTUTOR/A EXTERNO/A (en su caso):

Nombre y apellidos:

Correo electrónico:

Nombre de la empresa o institución:

Dirección postal:

Puesto del tutor en la empresa o institución:

Centro de convenio Externo:

5. DATOS DEL ESTUDIANTE:

Nombre y apellidos:

Correo electrónico: