



## 1. DATOS BÁSICOS DEL TFG:

**Título:** Desarrollo de sistemas catalíticos de oxidación de amoníaco como potencial vector energético

**Descripción general** (resumen y metodología):

La necesidad de encontrar alternativas sostenibles y renovables a los combustibles fósiles es una realidad que se hace más evidente y urgente cada día debido al avance del calentamiento global y sus consecuencias irreversibles.

El uso de amoníaco como vector energético es una estrategia prometedora que está captando la creciente atención del sector químico debido a su alta densidad energética y su facilidad relativa de transporte y almacenamiento en comparación con otros combustibles verdes como el hidrógeno. Mediante la reducción electroquímica del nitrógeno del aire se puede obtener de forma sostenible amoníaco para su posterior uso como combustible renovable o portador de hidrógeno capaz de generar H<sub>2</sub> in situ. Su carácter líquido a temperaturas y presiones cercanas a las condiciones ambientales hacen que su transporte y almacenamiento sea más sencillo, requiriendo infraestructuras similares a las de los combustibles fósiles actuales.

Sin embargo, el uso de este amoníaco como combustible o portador de hidrógeno está condicionado por el desarrollo de sistemas catalíticos de oxidación eficientes y selectivos, que oxiden NH<sub>3</sub> para liberar la correspondiente energía y protones (o H<sub>2</sub>) y generen los productos nitrogenados deseados, idealmente N<sub>2</sub> para un proceso circular y limpio. En este contexto, el uso de complejos de coordinación basados en metales de transición abundantes es una estrategia prometedora que permite el diseño racional de catalizadores con actividad y selectividad adaptados a las necesidades de reacción. Además, el estudio del mecanismo mediante técnicas espectroscópicas ofrece la oportunidad de comprender los factores que juegan un papel fundamental en la catálisis y establecer relaciones estructura-actividad para el desarrollo de generaciones subsecuentes de catalizadores mejorados.

Este proyecto tiene como objetivo el diseño de catalizadores moleculares para la oxidación de amoníaco y la generación de N<sub>2</sub> e H<sub>2</sub>, explotando así la capacidad de este compuesto como combustible renovable y portador de hidrógeno. Se explorarán dos estrategias alternativas que incluyen oxidación electrocatalítica y fotocatalítica.

### **Metodología:**

El estudiante estará inicialmente involucrado en la preparación y caracterización de complejos de coordinación donde aprenderá en primer lugar las técnicas típicas de síntesis y purificación, como síntesis orgánica de ligandos, técnicas Schlenk y cromatografía. 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.

Una vez obtenidos los compuestos objetivo, 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 electrocatalítica de oxidación de amoníaco utilizando celdas electroquímicas integradas para la obtención de N<sub>2</sub> e H<sub>2</sub>. Estos experimentos incluyen la optimización de condiciones de reacción considerando aspectos como: potenciales de oxidación, disolvente, electrodos, electrolito y concentración de los componentes. De forma

paralela, se explorará la viabilidad de una estrategia fotocatalítica, donde el uso de fotosensibilizadores y aceptores sacrificiales de electrones establecerá un ciclo catalítico cerrado. Además, esto permitirá al estudiante adquirir habilidades en el uso de líneas Schlenk para trabajar en atmósfera inerte, procedimientos de purificación y análisis de los productos de reacción como cromatografía de gases y líquidos.

Por último, 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 incluyendo reuniones de grupo, lo que dará lugar a una experiencia completa de la actividad científica en el campo de la investigación química.

**Tipología:** Trabajos experimentales, de toma de datos de campo o de laboratorio.

**Objetivos planteados:**

Objetivo general del TFG: que el estudiante obtenga una visión global del desarrollo de un trabajo de investigación en el campo de la catálisis redox para aplicaciones energéticas y proporcionar una formación completa en cuanto a técnicas experimentales, 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 complejos de coordinación basados en metales de transición abundantes y amoníaco como ligando.

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

3-Aplicar estos complejos para la oxidación electrocatalítica y fotocatalítica de amoníaco y generar N<sub>2</sub> e H<sub>2</sub>.

**Bibliografía básica:**

Peter L. Dunn, Brian J. Cook, Samantha I. Johnson, Aaron M. Appel, and R. Morris Bullock. J. Am. Chem. Soc. 2020, 142, 42, 17845-17858

**Recomendaciones y orientaciones para el estudiante:**

Interés y/o conocimiento previo acerca del ciclo catalítico de conversión de especies de nitrógeno

**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:**