



1. DATOS BÁSICOS DEL TFG:

Título: Desarrollo de electrocatalizadores dopados con heteroátomos y carburos de metales de transición para la producción de H₂ verde y CO con relación H₂/CO controlada.

Descripción general (resumen y metodología):

Introducción

La necesidad de avanzar hacia modelos energéticos más sostenibles y de reducir las emisiones de dióxido de carbono (CO₂) ha impulsado el desarrollo de tecnologías electroquímicas capaces de almacenar energía renovable en forma de productos químicos de alto valor añadido. Entre ellas, destaca la producción de hidrógeno verde (H₂) mediante electrólisis del agua, proceso en que la reacción de evolución de hidrógeno (HER, por sus siglas en inglés) desempeña un papel central y cuya eficiencia depende en gran medida del diseño de electrocatalizadores activos, estables y de bajo coste.

De forma complementaria, la reacción de reducción electroquímica de CO₂ (CO₂RR) permite transformar este gas de efecto invernadero en productos de interés industrial, como monóxido de carbono (CO), formiato, metano, alcoholes o hidrocarburos. En particular, la producción de CO junto con H₂ permite obtener gas de síntesis, una mezcla clave para procesos industriales como la síntesis de Fischer-Tropsch o la obtención de metanol. En electrolitos acuosos, la HER y la CO₂RR son reacciones competitivas; sin embargo, esta competencia también puede aprovecharse para diseñar sistemas catalíticos capaces de modular la relación H₂/CO y, por tanto, adaptar la composición del gas de síntesis a distintas aplicaciones [1].

En este contexto, los materiales carbonosos destacan como alternativas prometedoras para el desarrollo de electrocatalizadores, debido a su elevada disponibilidad, estabilidad, conductividad eléctrica, versatilidad estructural y posibilidad de ajustar sus propiedades fisicoquímicas mediante dopado con heteroátomos o incorporación de fases metálicas [2-3]. El dopado con nitrógeno, especialmente la generación de sitios N-piridínicos, se ha relacionado con una mayor selectividad hacia la formación de CO durante la CO₂RR. Por otro parte, los carburos de metales de transición, como los basados en Mo, W, Fe o Co, han demostrado un comportamiento favorable en la HER, al presentar propiedades electrónicas adecuadas para favorecer la adsorción y desorción de intermediarios de hidrógeno [4].

Por ello, este proyecto propone el desarrollo de electrocatalizadores basados en geles de carbono dopados con heteroátomos y carburos de metales de transición, con el fin de combinar sitios activos para la producción de H₂ y CO en un mismo material. La estrategia permitirá estudiar cómo la composición, la estructura porosa, el dopado y la naturaleza de las fases carburadas influyen en la actividad, selectividad y estabilidad electrocatalítica. Los resultados esperados contribuirán al diseño de materiales sostenibles y eficientes para la valorización electroquímica de CO₂ y la producción controlada de mezclas H₂/CO.

Metodología experimental

Se prepararán materiales carbonosos mediante un proceso de polimerización sol-gel de resorcinol y formaldehído, incorporando precursores de metales de transición para favorecer la formación de carburos metálicos tras la carbonización. Posteriormente, los materiales se lavarán, secarán y someterán a tratamientos térmicos bajo atmósfera inerte. La incorporación de nitrógeno se realizará mediante impregnación con una fuente nitrogenada, seguida de un segundo tratamiento térmico, con el fin de generar sitios activos en la matriz carbonosa.

Los materiales obtenidos se caracterizarán mediante técnicas estructurales, texturales y superficiales, como DRX, Raman, XPS, microscopía electrónica y fisisorción de N₂. Finalmente, se evaluará su comportamiento electrocatalítico en las reacciones HER y CO₂RR, analizando parámetros como actividad, estabilidad, eficiencia faradaica y relación H₂/CO, con el objetivo de identificar los materiales más adecuados para la producción controlada de gas de síntesis.

Los materiales obtenidos se caracterizarán mediante técnicas estructurales, texturales y superficiales, como DRX, Raman, XPS, microscopía electrónica y fisisorción de N₂. Finalmente, se evaluará su comportamiento electrocatalítico en las reacciones HER y CO₂RR, analizando parámetros como actividad, estabilidad, eficiencia faradaica y relación H₂/CO, con el objetivo de identificar los materiales más adecuados para la producción controlada de gas de síntesis.

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

Objetivos planteados:

Objetivo general

Desarrollar, caracterizar y evaluar electrocatalizadores de carbono dopados con heteroátomos y carburos de metales de transición para la producción electrocatalítica de H₂ verde y CO, buscando controlar la relación H₂/CO obtenida durante las reacciones simultáneas de evolución de HER y reducción de CO₂ (CO₂RR).

Objetivos específicos

- Diseñar y sintetizar geles de carbono mediante un proceso sol-gel dopados con heteroátomos, principalmente nitrógeno, e incorporar precursores de metales de transición
- Caracterizar fisicoquímicamente los materiales obtenidos mediante técnicas como espectroscopía Raman, espectroscopía fotoelectrónica de rayos X (XPS), difracción de rayos X (DRX), microscopía electrónica (SEM/TEM) y fisisorción de N₂, con el fin de relacionar composición, textura y estructura con el comportamiento catalítico.
- Evaluar la actividad electrocatalítica de los materiales en la reacción de evolución de hidrógeno (HER) y en la reducción de CO₂ (CO₂RR), empleando técnicas electroquímicas.
- Determinar la selectividad hacia H₂ y CO, así como la relación H₂/CO obtenida, mediante el análisis de los productos generados y el cálculo de eficiencias faradaicas.
- Establecer relaciones estructura-actividad que permitan comprender el papel de los sitios nitrogenados y de los carburos metálicos en la modulación de la HER y la CO₂RR.

Bibliografía básica:

Bibliografía

[1] L.D. Ramírez-Valencia, E. Bailón-García, A.I. Moral-Rodríguez, F. Carrasco-Marín, A.F. Pérez-Cadenas, Electrochemical reduction of CO₂ to syngas using carbon gels-green graphene composites as metal free electrocatalyst, J. Power Sources 645 (2025) 237189. <https://doi.org/10.1016/J.JPOWSOUR.2025.237189>.

[2] L.D. Ramírez-Valencia, E. Bailón-García, F. Carrasco-Marín, A.F. Pérez-Cadenas, From CO₂ to Value-Added Products: A Review about Carbon-Based Materials for Electro-Chemical CO₂ Conversion, Catalysts 2021, Vol. 11, Page 351 11 (2021) 351. <https://doi.org/10.3390/CATAL11030351>.

[3] S. Li, J. Yang, C. Song, Q. Zhu, D. Xiao, D. Ma, Iron Carbides: Control Synthesis and Catalytic Applications in CO_x Hydrogenation and Electrochemical HER, Advanced Materials 31 (2019) 1901796. <https://doi.org/10.1002/ADMA.201901796>.

[4] H. Zhang, S. Min, F. Wang, Z. Zhang, C. Kong, Efficient electrocatalytic CO₂ reduction to CO with high selectivity using a N-doped carbonized wood membrane, New Journal of Chemistry 44 (2020) 6125-6129. <https://doi.org/10.1039/D0NJ00538J>.

[1] L.D. Ramírez-Valencia, E. Bailón-García, A.I. Moral-Rodríguez, F. Carrasco-Marín, A.F. Pérez-Cadenas, Electrochemical reduction of CO₂ to syngas using carbon gels-green graphene composites as metal free electrocatalyst, J. Power Sources 645 (2025) 237189.

<https://doi.org/10.1016/J.JPOWSOUR.2025.237189>.

- [2] L.D. Ramírez-Valencia, E. Bailón-García, F. Carrasco-Marín, A.F. Pérez-Cadenas, From CO₂ to Value-Added Products: A Review about Carbon-Based Materials for Electro-Chemical CO₂ Conversion, Catalysts 2021, Vol. 11, Page 351 11 (2021) 351. <https://doi.org/10.3390/CATAL11030351>.
- [3] S. Li, J. Yang, C. Song, Q. Zhu, D. Xiao, D. Ma, Iron Carbides: Control Synthesis and Catalytic Applications in CO_x Hydrogenation and Electrochemical HER, Advanced Materials 31 (2019) 1901796. <https://doi.org/10.1002/ADMA.201901796>.
- [4] H. Zhang, S. Min, F. Wang, Z. Zhang, C. Kong, Efficient electrocatalytic CO₂ reduction to CO with high selectivity using a N-doped carbonized wood membrane, New Journal of Chemistry 44 (2020) 6125–6129. <https://doi.org/10.1039/D0NJ00538J>.

Recomendaciones y orientaciones para el estudiante:

Plazas: 1

2. DATOS DEL TUTOR/A:

Nombre y apellidos: ESTHER BAILÓN GARCÍA

Ámbito de conocimiento/Departamento: QUÍMICA INORGÁNICA

Correo electrónico: estherbg@ugr.es

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

Nombre y apellidos: ADRIANA ISABEL MORAL RODRÍGUEZ

Ámbito de conocimiento/Departamento: QUÍMICA INORGÁNICA

Correo electrónico: amoral@ugr.es

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: