



1. DATOS BÁSICOS DEL TFG:

Título: Desarrollo de fotocatalizadores moleculares para reacciones redox

Descripción general (resumen y metodología):

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. La utilización de luz como fuente de energía para la conversión redox de sustratos tanto orgánicos (p.ej. alquenos o alquinos) o inorgánicos (p.ej. CO_2 o N_2) por medio de la fotocatalisis y electrocatalisis 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 carga a los sustratos deseados y (3) regenerar su estado inicial. Este proyecto tiene como objetivo desarrollar compuestos moleculares con propiedades físicas y químicas apropiadas para su uso como catalizadores redox.

Metodología:

El estudiante estará inicialmente involucrado en la preparación y caracterización de compuestos de coordinación donde aprenderá en primer lugar las técnicas típicas de síntesis y purificación aplicadas en este campo. 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. El estudiante también 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 para la conversión redox de sustratos modelo.

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

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

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 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 de coordinación.
- 2-Estudiar las propiedades fotofísicas y electroquímicas de estos compuestos.
- 3-Aplicar los compuestos desarrollados para la conversión redox electro/fotocatalítica de sustratos

modelo.

Bibliografía básica:

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

Lanzilotta, W. N., Christiansen, J., Dean, D. R. & Seefeldt, L. C. Evidence for coupled electron and proton transfer in the [8Fe-7S] cluster of nitrogenase. Biochemistry 37, 11376–11384 (1998).

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:

Será beneficioso un entendimiento previo general acerca de las reacciones catalíticas así como de química de la coordinación.

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: