



1. DATOS BÁSICOS DEL TFG:

Título: Catalizadores de átomo único (single-atom catalysts, SACs) para reacciones de producción/conversión de energía limpia

Descripción general (resumen y metodología):

Los retos que imponen el modelo energético actual y la sostenibilidad ambiental, de cara a obtener procesos cada vez más limpios y eficientes, ha provocado que haya que buscar soluciones catalíticas que mejoren los procesos de producción y conversión de energía usando materiales que además de eficientes sean económicos y accesibles.

Los catalizadores de átomo único (Single Atom Catalysts, SACs) son una serie de nuevos materiales que están formados por átomos metálicos individuales y aislados (generalmente de platino, hierro o níquel) estabilizados en algún material que ejerce de soporte, como superficies de nanomateriales de carbono dopadas con nitrógeno. De esta manera se minimiza la ratio metal/soporte, pero se maximizan la eficiencia, la actividad y la selectividad. Idealmente, cada átomo metálico constituye un centro activo accesible, evitando la existencia de átomos en el interior de nanopartículas que no son accesibles a los reactivos. Estos centros activos actúan en procesos de electrocatálisis aumentando la eficiencia faradaica y disminuyendo los sobrepotenciales redox, por lo que pueden ser soluciones adecuadas para las reacciones de transferencia de electrones.

Al contrario de lo que puede observarse en sistemas metálicos macroscópicos, los átomos metálicos aislados que dan nombre a este tipo de materiales poseen niveles de energía discretos que pueden modificarse para optimizar la interacción con los reactivos, generando procesos altamente selectivos y eficientes.

Debido a sus propiedades únicas, los SACs han despertado gran interés entre la comunidad científica por su potencial aplicabilidad en reacciones de conversión de energía (como OER, ORR y HER), en procesos de degradación y eliminación de contaminantes y eliminando el hueco existente actualmente entre la catálisis homogénea y heterogénea.

A pesar de que actualmente su estabilidad en condiciones de reacción exigentes sigue siendo una asignatura pendiente y que su producción a una escala masiva tampoco ha sido resuelta, son materiales extremadamente prometedores que pueden aportar nuevas soluciones a los retos tecnológicos del futuro más inmediato.

En este trabajo se propone realizar una revisión bibliográfica exhaustiva del diseño, síntesis y caracterización de este tipo de catalizadores, estudiando los diferentes tipos de SACs y sus métodos de preparación, así como de las áreas en las que pueden ser potencialmente de aplicación.

Para esta revisión bibliográfica se propone usar las bases de datos científicas a las que se puede acceder a través de la FECYT, así como software adecuado para la gestión de recursos bibliográficos.

. Los nanomateriales híbridos buscan ese tipo de sinergia combinando las mejores características de dos materiales distintos en una única estructura que mejore las propiedades de ambos materiales por separado, o que consiga paliar los defectos y problemas que presente uno de ellos.

En este sentido, los nanomateriales híbridos MOF@carbono suponen la combinación de dos materiales totalmente diferentes en una sola nanoestructura que puede llegar a combinar las mejores propiedades de ambos materiales. Por un lado, los MOFs son estructuras porosas regulares formadas por redes tridimensionales que conectan ligandos orgánicos mediante nodos metálicos. Por otro, los nanomateriales de carbono, en sus diferentes formas, presentan un sistema aromático formado por carbonos de tipo sp^2 que tiene propiedades electrónicas específicas adecuadas para

multitud de procesos catalíticos, además de ser materiales con una alta estabilidad química. Combinar ambos materiales formando una nanoestructura ordenada puede generar nuevos materiales híbridos con un prometedor comportamiento como catalizadores, ya que aúnan las propiedades de la estructura regular y de los metales que portan los MOFs con la conductividad eléctrica y química que poseen los materiales de carbono.

En este trabajo bibliográfico se plantea realizar una actualización bibliográfica exhaustiva del punto en que se encuentran las investigaciones para el diseño de materiales híbridos formados por MOFs y nanomateriales carbonosos, revisando las nuevas propuestas, así como las posibles aplicaciones que pueden tener, tanto desde el punto de vista de la catálisis como del de la adsorción. Para esta revisión bibliográfica se propone usar las bases de datos científicas a las que se puede acceder a través de la FECYT, así como software adecuado para la gestión de recursos bibliográficos.

Tipología: Trabajos bibliográficos sobre el estado actual de una temática relacionada con el Grado.

Objetivos planteados:

Hacer una revisión bibliográfica actualizada acerca de los materiales que pueden ser considerados como catalizadores de átomo único (SACs), estudiando su método de preparación, propiedades y actividad catalítica. Analizar las potenciales aplicaciones de este tipo de materiales, discutiendo de manera crítica su aplicabilidad en sistemas reales.

Este objetivo principal lleva asociado que el estudiante aprenda a desarrollar búsquedas de información científica y a identificar los artículos y contribuciones más relevantes dentro de un tema en cuestión (en este caso el de los SACs).

Este objetivo principal, lleva asociados otros más específicos que se enumeran a continuación:

- Aprender a usar las bases de datos científicas más importantes, como Web Of Knowledge y Scopus.
- Realizar búsquedas sistemáticas de bibliografía para encontrar información científica, usando las diferentes herramientas informáticas para discriminarlas.
- Aprender a identificar las contribuciones más relevantes de un campo determinado.
- Utilizar un sistema gestor de referencias para organizar y citar de manera adecuada toda la información extraída de las bases de datos.
- Aprender a resumir el contenido más importante de un artículo, a elaborar resúmenes y a introducir citas bibliográficas de manera correcta y con el formato adecuado.
- Conocer más sobre los SACs, que es uno de los campos de investigación que pueden tener mayor desarrollo dentro de la química de materiales y la catálisis.

Bibliografía básica:

La bibliografía la deberá buscar el estudiante en las bases de datos correspondientes.

Recomendaciones y orientaciones para el estudiante:

Ninguna en especial.

Plazas: 1

2. DATOS DEL TUTOR/A:

Nombre y apellidos: MANUEL JOSÉ PÉREZ MENDOZA

Ámbito de conocimiento/Departamento: QUÍMICA INORGÁNICA

Correo electrónico: mjperez@ugr.es

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

Nombre y apellidos: VÍCTOR KARIM ABDELKADER FERNÁNDEZ

Ámbito de conocimiento/Departamento: QUÍMICA INORGÁNICA

Correo electrónico: victorkarim@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: