UNIVERSIDAD DE GRANADA

FACULTAD DE CIENCIAS

Propuesta TFG. Curso 2026/2027

GRADO: Grado en Química

CÓDIGO DEL TFG: 291-097-2026/2027

1. DATOS BÁSICOS DEL TFG:

Título: MOFs heterometálicos de titanio para fotocatálisis: Efecto sinérgico en química radicalaria.

Descripción general (resumen y metodología):

La formación de enlaces carbono-carbono (C-C) es un pilar de la química orgánica, crucial para sintetizar moléculas complejas indispensables en la industria farmacéutica, la ciencia de materiales y los productos naturales. Entre las estrategias recientes, los procesos mediados por radicales son destacados por su capacidad para crear estructuras moleculares complejas bajo condiciones moderadas. La fotocatálisis emerge como un método eficaz para facilitar estos procesos, aprovechando la luz visible para iniciar transferencias de un solo electrón (SET) y generar radicales desde precursores estables. Esto permite la activación de diversos sustratos para formar enlaces C-C y carbono-heteroátomo con elevada eficiencia y selectividad. La sinergia entre metales de transición, como Ni, Cu, Fe e Ir, y fotocatalizadores potencia estas reacciones, aunque se limita mayormente a la catálisis homogénea, dejando a la catálisis heterogénea como un desafío por superar. La química reticular promueve el diseño de materiales metal-orgánicos (MOF) personalizados, cuya versatilidad en estructura y composición químicas es prometedora para diversas aplicaciones industriales.

Metodología:

1. **Investigación bibliográfica sobre procesos radicales:**
    1. Revisión de bibliográfica existente sobre la formación de enlaces C-C mediada por radicales en química.
    2. Análisis de metodologías recientes, centrándose en los procesos que operan en condiciones suaves.
2. **Estudio de la fotocatálisis:**
    1. Investigación sobre el uso de energía luminosa para facilitar reacciones de transferencia electrónica.
    2. Evaluación de fotocatalizadores, incluyendo complejos metálicos y colorantes orgánicos, y su eficiencia en la generación de radicales.
3. **Análisis de la sinergia entre metales y fotocatalizadores:**
    1. Exploración de estudios que muestran la colaboración entre metales de transición y fotocatalizadores.
    2. Comparación de la efectividad en catálisis homogénea vs. heterogénea.
4. **Exploración de la química reticular y MOF:**
    1. Revisión de bibliográfica sobre el diseño y aplicación de estructuras metal-orgánicas.
    2. Investigación sobre cómo las propiedades de los MOF permiten mejorar procesos catalíticos, de almacenamiento y separación.
5. **Síntesis de hallazgos y propuestas futuras:**
    1. Integración de los conocimientos adquiridos para proponer soluciones innovadoras que cierren la brecha entre catálisis homogénea y heterogénea.
    2. Identificación de áreas de mejora y potenciales investigaciones futuras en la formación de enlaces C-C.

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

Objetivos planteados:

Objetivos:

1. Comprender la importancia de la formación de enlaces C-C: Estudiar el papel fundamental de los enlaces carbono-carbono en la síntesis de moléculas complejas para diversas aplicaciones industriales y científicas.
2. Analizar el rol de los procesos mediados por radicales: Evaluar cómo estos procesos facilitan la construcción de arquitecturas moleculares complejas bajo condiciones suaves y su relevancia en la química moderna.
3. Explorar la aplicación de la fotocatálisis: Investigar cómo la energía luminosa puede ser utilizada para iniciar reacciones eficientes y selectivas de formación de enlaces, con énfasis en la activación de una amplia gama de sustratos.
4. Evaluar la interacción entre metales de transición y fotocatalizadores: Examinar cómo esta sinergia puede mejorar la estabilidad de radicales intermedios y facilitar la formación de enlaces, superando las limitaciones actuales de la catálisis homogénea.
5. Investigar el potencial de la química reticular y MOF: Determinar las oportunidades que ofrecen los materiales metal-orgánicos para desarrollar nuevas estrategias catalíticas, y su impacto en la catálisis y en tecnologías de almacenamiento y separación.
6. Proponer soluciones para la integración de catálisis homogénea y heterogénea: Desarrollar estrategias para cerrar la brecha entre estos métodos catalíticos, ampliando las aplicaciones industriales de los procesos de formación de enlaces C-C.

Bibliografía básica:

[1] A) G. A. Molander et al. Science, **2014**, 345, 433. B) T. F. Jamison et al. Organometallics, **2014**, 33, 2012. C) E. Meggers et al. Angew. Chem. Int. Ed., **2016**, 128, 695. D) E. R. Jarvo. Angew. Chem. Int. Ed. **2016**, 55, 2. E) P. S. Baran et al. J. Am. Chem. Soc., **2016**, 138, 2174. F) P. S. Baran et al. Science, **2016**, 321, 801. G) P. S. Baran et al. Angew. Chem. Int. Ed. **2016**, 55, 9676. H) G. C. Fu et al. Science, **2016**, 351, 681. I) P. S. Baran et al. Nature, **2018**, 560, 350.

[2] D. W. C. MacMillan et al. J. Org. Chem., **2016**, 81, 6898.

[3] A) G. Rothenberg, Catalysis: Concepts and Green Applications, Wiley-VCH: Weinheim, **2008**. B) J. Gascon et al, Metal Organic Frameworks as Heterogeneous Catalyst: The Royal Society of Chemistry (Cambridge), **2013**

[4] A) C. Martí-Gastaldo et al. Chem. **2020**, 11, 3110-3131; B) C. Martí-Gastaldo, J. Gascón et al. Chem. Catalysis. **2021**, 1, 364-382. 11873; C) N. M. Padial, C. Martí-Gastaldo et al. J. Am. Chem. Soc. **2023,** 145, 3855–3860.

[5] A) Nocera J. Am. Chem. Soc. **2020,** 142, 17913; B) A. Bunescu et al. Angew. Chem. Int. Ed. **2024**, e202403292

Recomendaciones y orientaciones para el estudiante:

Definir claramente los objetivos, realizar una revisión bibliográfica actualizada, organizar bien la estructura, citar correctamente, mantener un enfoque crítico y consultar con el tutor regularmente son claves para un buen trabajo. Además, es fundamental respetar los plazos, preparar una buena defensa y aprovechar los recursos y apoyos institucionales para asegurar la calidad del TFG.

Plazas: 1

2. DATOS DEL TUTOR/A:

Nombre y apellidos: NATALIA MUÑOZ PADIAL

Ámbito de conocimiento/Departamento: QUÍMICA INORGÁNICA

Correo electrónico: nmpadial@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: MERIEM ZAHRI EL AOUFI

Correo electrónico: meriemza2001@correo.ugr.es