

**TEMAS PENDIENTES DE INSCRIBIR
DPTO DE QUÍMICA INORGÁNICA**

NÚMERO	TEMA	TUTOR(S) ACADÈMIC(S)	TUTOR EXTERN (si escau)
2	Separación de fármacos quirales mediante reconocimiento molecular usando redes metaloorgánicas	Sergio Tatay Aguilar	
5	Diseño de imanes moleculares basados en complejos de transición de espín como prototipos de supercapacitores espintrónicos.	Joan Cano Boquera	
6	Influencia del método de síntesis en la actividad catalítica de nanopartículas de Pt depositadas sobre partículas de óxidos metálicos recubiertas con polidopamina frente a la reducción de nitroareños	M ^a Angeles Ubeda Picot (Q.I) Francisco Pérez Pla (Q.F)	
7	Nuevos materiales basados en redes metal-orgánicas multifuncionales con iones lantánidos	Isabel Castro Bleda	
9	Crecimiento de cristales iónicos laminares para la obtención de materiales magnéticos análogos al grafeno	Efrén Navarro Moratalla	
11	Síntesis y caracterización de nuevos complejos de Re(IV) basados en oxalato	Francisco José Martínez Lillo	
12	Semiconductores híbridos para aplicación en células solares	Michele Sessolo	
15	Disseny químic de dispositius intel·ligents amb materials bidimensionals per a aplicacions en tecnologies de la informació	José Jaime Baldoví Jachán	
16	Estudio de propiedades electrónicas y magnéticas de sistemas metalo-orgánicos con interés en magnónica	José Jaime Baldoví Jachán	
17	Funcionalización química de materiales bidimensionales basados en bismuto con moléculas inorgánicas	José Jaime Baldoví Jachán	
18	Estudio de deformaciones mecánicas en materiales bidimensionales inorgánicos de interés en magnónica	José Jaime Baldoví Jachán	
20	Síntesis y caracterización de redes magnéticas porosas de lantanoideos con ligandos de tipo anilato y distintos coligandos.	Samia Benmansour/ Carlos José Gómez García	
26	Estudio del estado fundamental en moléculas de valencia mixta en función de algún estímulo externo	Juan Modesto Clemente Juan	
30	Diseño y preparación de matrices poliméricas híbridas. Inclusión de sistemas inorgánicos que aporten propiedades específicas.	Antonio L.Ribera Hermano	
31	Síntesis de hidróxidos laminares basados en Fe(III) y Cr(III) para conseguir líquidos de espín cuánticos hexagonales.	Antonio L.Ribera Hermano	
32	Síntesis de hidróxidos laminares basados en Cu(II) y Mn(II) para conseguir líquidos de espín cuánticos triangulares.	Antonio L.Ribera Hermano	
33	Preparación de fotocatalizadores basados en Hidróxidos Dobles Laminares (LDHs) de Zn y Cr para la reacción de fotorreducción de CO ₂ .	Antonio L.Ribera Hermano	
34	Preparación de electrocatalizadores basados en Hidróxidos Dobles Laminares (LDHs) que contengan V en su estructura para catalizar el proceso de disociación del agua (water splitting) y la reacción de electrorreducción de CO ₂ .	Antonio L.Ribera Hermano	
35	Síntesis y caracterización de polioxometalatos con Pb(II) fotoluminiscentes	Carlos Gimenez Saiz	
36	Síntesis y caracterización de polioxometalatos con Bi(III) fotoluminiscentes	Carlos Gimenez Saiz	
37	Síntesis y caracterización de materiales conductores basados en polioxometalatos	Carlos Gimenez Saiz	
41	Pasivación de la perovskita 3D con materiales 2D para fabricar y caracterizar Células Solares altamente eficientes y estables	Pedro Amorós del Toro	
42	Perovskitas de Sn de baja dimensionalidad para aplicaciones optoelectrónicas	Pedro Amorós del Toro	
44	Materiales moleculares inteligentes: Polímeros termosensibles con funciones ópticas y magnéticas	Francisco Manuel Romero Martínez	
45	Diseño y construcción de un robot dispensador de líquidos para química combinatoria dinámica	Francisco Manuel Romero Martínez	
47	Desarrollo de materiales moduladores de la actividad enzimática	José Vicente Ros Lis	
48	Preparación y ensayo de materiales de interés biomédico	José Vicente Ros Lis	
51	Síntesis de polímeros de coordinación con ligandos aminoácidos (bioMOFS) con aplicaciones catalíticas y descontaminación de aguas	Marta Viciano Chumillas Emilio Pardo Marín	
56	Avances en la procesabilidad de hidróxidos laminares bidimensionales en películas delgadas para aplicaciones en energía y en recubrimientos funcionales.	Eugenio Coronado Miralles	
57	Materiales laminares bidimensionales basados en metales de transición para conversión y almacenamiento de energía	Eugenio Coronado Miralles	
58	Síntesis de nanomateriales híbridos a base de fullerenos multicapa (carbon nano onions) para aplicaciones en nanomedicina	Eugenio Coronado Miralles	

TRABAJO FINAL DE GRADO
GRADO EN QUÍMICA

TUTOR/A ACADÉMICO/A: Sergio Tatay Aguilar

TUTOR/A ACADÉMICO/A (si procede):

TUTOR/A EXTERNO/A (si procede):

TÍTULO

Separación de fármacos quirales mediante reconocimiento molecular usando redes metaloorgánicas

OBJETIVOS

Las redes metalorgánicas (Metal-Organic Frameworks) son compuestos altamente porosos capaces de adsorber un amplio abanico de moléculas huésped. En este trabajo experimental estudiaremos cómo esta capacidad se ve influenciada por la quiralidad de la molécula huésped.

METODOLOGÍA

Como anfitriones usaremos MOF basados en ligandos de tipo aminoácido. Estudiaremos la capacidad de estos MOFs para hospedar diferentes fármacos de relevancia mediante dicroísmo circular. Para un mismo fármaco estudiaremos además como la absorción depende de factores como la concentración, el tiempo y el disolvente utilizados.



(Sello del Departamento)

VNIVERSITAT DE VALÈNCIA Facultat de Química

TEMA TREBALL FI DE GRAU GRAU EN QUÍMICA

TUTOR/A ACADÈMIC/A: Joan Cano Boquera

TUTOR/A ACADÈMIC/A (si escau):

TUTOR/A EXTERN/A (si escau):

TÍTOL

Diseño de imanes moleculares basados en complejos de transición de espín como prototipos de supercapacitores espintrónicos.

OBJECTIUS

Imanes moleculares ("single-molecule magnets", SMMs) y complejos de transición de espín ("spin crossover", SCO) son las unidades de menor tamaño con potencial aplicación como dispositivos espintrónicos y en el procesamiento cuántico de la información. Estos sistemas serán aprovechados para el diseño de un componente esencial de cualquier circuito espintrónico, capaz de almacenar y proveer grandes cantidades de carga: los supercapacitores.

METODOLOGIA

- 1) Síntesis y cristalogénesis de complejos de Fe(II) y Co(II) que presentan transición de espín y relajación lenta de la magnetización.
- 2) Caracterización estructural y química mediante difracción de rayos-X de monocristal, técnicas analíticas y espectroscópicas.
- 3) Estudio de las propiedades magnéticas y electroquímicas a través de métodos magnetométricos y potenciostáticos.
- 4) Prueba de concepto de un supercapacitor/interruptor molecular cuántico.



VNIVERSITAT DE VALÈNCIA Facultat de Química

TEMA TREBALL FI DE GRAU GRAU EN QUÍMICA

TUTOR/A ACADÈMIC/A: M^a Ángeles Úbeda Picot (Q.I)

TUTOR/A ACADÈMIC/A (si escau): Francisco Pérez Plá (Q.F)

TUTOR/A EXTERN/A (si escau):

TÍTOL

Influencia del método de síntesis en la actividad catalítica de nanopartículas de Pt depositadas sobre partículas de óxidos metálicos recubiertas con polidopamina frente a la reducción de nitroarenos.

OBJECTIUS

- Síntesis de partículas de óxidos metálicos y su recubrimiento con polidopamina (PDA).
- Deposición de nanopartículas de Pt sobre la superficie de la PDA mediante diversas técnicas sintéticas.
- Caracterización estructural de los materiales sintetizados.
- Determinación de la actividad catalítica de los materiales sintetizados frente a la reducción de nitroarenos.

METODOLOGIA

(1) Síntesis de materiales: técnicas estándar de síntesis. Utilización de líneas anaeróbicas.

(2) Caracterización de materiales: Determinación del área específica y porosidad del material a partir de la isoterma de adsorción de N₂. Determinación termogravimétrica de la masa de PDA. Determinación del tamaño de las partículas del material dispersado en el reactor por DLS. Determinación de la dispersión superficial y composición relativa de las nanopartículas de Pt mediante EDX SEM. Determinación del tamaño y estructura de las nanopartículas metálicas mediante HRTEM.

(3) Determinación de la actividad catalítica: Seguimiento de la reacción por HPLC y espectrofotometría DA UV-vis. Realización de experimentos de reciclabilidad del catalizador.



VNIVERSITAT DE VALÈNCIA (ò*) Facultat de Química

TEMA TREBALL FI DE GRAU GRAU EN QUÍMICA

TUTOR/A ACADÈMIC/A: Isabel Castro Bleda

TUTOR/A ACADÈMIC/A (si escau):

TUTOR/A EXTERN/A (si escau):

TÍTOL

Nuevos materiales basados en redes metal-orgánicas multifuncionales con iones lantánidos.

OBJECTIUS

Diseño, preparación y estudio de nuevas familias de redes metal-orgánicas n-dimensionales luminiscentes y/o magnéticas como prototipos de refrigerantes magnéticos multifuncionales.

METODOLOGIA

- 1) Síntesis y cristalogénesis de redes n-dimensionales variando las proporciones de diferentes iones lantánidos y ligandos oxalato para que pueda alcanzarse la multipropiedad.
- 2) Caracterización estructural mediante difracción de rayos-X de polvo y de monocristal de las redes sintetizadas.
- 3) Caracterización por microscopía electrónica (EDX) para análisis de la proporción entre los iones lantánidos que aportarán la multipropiedad.
- 3) Estudio de las propiedades luminiscentes, magnéticas y magneto-calóricas de los sistemas sintetizados.



(segell del Departament)

TEMA TREBALL FI DE GRAU GRAU EN QUÍMICA

TUTOR/A ACADÈMIC/A: Efrén Navarro Moratalla

TUTOR/A ACADÈMIC/A (si escau):

TUTOR/A EXTERN/A (si escau):

TÍTOL

Crecimiento de cristales iónicos laminares para la obtención de materiales magnéticos análogos al grafeno

OBJECTIUS

1. Obtención de monocristales de alta calidad y gran tamaño de las sales magnéticas de interés.
2. Aislamiento de un cristal de una sola capa atómica de los cristales iónicos.
3. Encapsulación del cristal y caracterización química y física del sistema.

METODOLOGIA

Se emplearán distintas técnicas de crecimiento cristalino (cristalización a partir del fundido, Bridgman,...) para la síntesis de cristales laminares iónicos. En particular serán de interés los clorocromatos magnéticos de metales alcalinos: por ejemplo el sistema de potasio (K_2CrCl_4). Con el fin de obtener cristales estequiométricos y de gran tamaño y calidad, primeramente se analizarán los diagramas de fases, se plantearán las estequiometrías partiendo de sus componentes elementales y se optimizarán las condiciones de reacción (temperaturas, gradientes,...). Los cristales se crecerán durante el curso de varios días en el interior de ampollas de sílice fundida. Las distintas muestras producidas se caracterizarán por medio de técnicas básicas de análisis químico y físico de materiales (microscopías electrónicas, difracción de rayos X, análisis de metales,...).

Una vez obtenidas unas condiciones satisfactorias de crecimiento, las muestras de alta cristalinidad se someterán a un proceso de exfoliación micromecánica para el aislamiento de monocapas. La tendencia a la oxidación de estos compuestos hará necesario el uso de técnica de atmósfera inerte para la manipulación de los cristales. Los cristales de tan solo unas pocas capas de espesor se encapsularán convenientemente en preparación para su caracterización física por métodos ópticos.



**TEMA TREBALL FI DE GRAU
GRAU EN QUÍMICA**

TUTOR/A ACADÈMIC/A: Francisco José Martínez Lillo

TUTOR/A ACADÈMIC/A (si escau):

TUTOR/A EXTERN/A (si escau):

TÍTOL

Síntesis y caracterización de nuevos complejos de Re(IV) basados en oxalato

OBJECTIUS

El objetivo general del trabajo será sintetizar y caracterizar nuevos complejos mononucleares de renio(IV) con oxalato que presenten propiedades interesantes en diferentes campos de investigación. Una vez estudiados y caracterizados se planteará, como un objetivo adicional, el uso de estos complejos como metaloligandos hacia iones metálicos 3d y 4f para la obtención de sistemas polinucleares.

METODOLOGIA

La metodología a seguir será la siguiente:

- (1) Síntesis de complejos mononucleares de renio(IV), a partir de aniones hexahalorenato, sustituyendo ligandos de tipo ion haluro ($X = \text{Cl}$ y Br) por oxalato.
- (2) Cristalogénesis de los complejos mediante diferentes técnicas de cristalización.
- (3) Caracterización de estos sistemas mediante técnicas experimentales complementarias, tales como espectroscopías IR y UV-visible, microscopía electrónica (SEM), difracción de rayos X de polvo y de monocristal (XRD), magnetómetro SQUID, y voltamperometría cíclica (CV).
- (4) Estudio magneto-estructural de los complejos obtenidos.



(segell del Departament)

TEMA TREBALL FI DE GRAU GRAU EN QUÍMICA

TUTOR/A ACADÈMIC/A: Michele Sessolo

TUTOR/A ACADÈMIC/A (si escau):

TUTOR/A EXTERN/A (si escau):

TÍTOL

Semiconductores híbridos para aplicación en células solares

OBJECTIUS

Este proyecto pretende desarrollar perovskitas híbridas semiconductoras con propiedades mejoradas, con el fin de incorporarlas en dispositivos optoelectrónicos de alta eficiencia. El grupo MOED (www.moed.es) es líder a nivel mundial en la preparación de dispositivos de perovskita con técnicas de deposición de alto vacío. El objetivo es desarrollar materiales con propiedades mejoradas, que sean aptos para la preparación tanto de células solares como de fotodetectores.

METODOLOGIA

- 1) Selección de halogenuros metálicos y ligandos orgánicos
- 2) Deposición de los materiales, caracterización química y estructural mediante difracción de rayos X y microscopia electrónica.
- 3) Estabilización estructural y/o pasivación de defectos electrónicos
- 4) Incorporación de los materiales en dispositivos optoelectrónicos



(segell del Departament)

TEMA TREBALL FI DE GRAU GRAU EN QUÍMICA

TUTOR/A ACADÈMIC/A: José Jaime Baldoví Jachán

TUTOR/A ACADÈMIC/A (si escau):

TUTOR/A EXTERN/A (si escau):

TÍTOL

Disseny químic de dispositius intel·ligents amb materials bidimensionals per a aplicacions en tecnologies de la informació

OBJECTIUS

- Disseny d'un material híbrid format per un complex de coordinació amb transició d'espín i un material bidimensional magnètic.
- Determinació de la estructura electrònica de la configuració més estable.
- Estudi de les seues propietats magnètiques

METODOLOGIA

La primera part del treball consistirà en una classificació de diferents molècules amb resposta a estímul extern (llum, calor, pressió, etc.) en funció de la seua temperatura de transició de fase i la seua estabilitat en una superfície. Posteriorment es realitzaran simulacions per ordinador de les estructures seleccionades sobre una superfície de un material bidimensional magnètic amb l' objectiu de determinar quina es la configuració més estable. Una vegada dissenyat el nostre dispositiu per ordinador, s' estudiaran les seues propietats magnètiques.



TEMA TREBALL FI DE GRAU GRAU EN QUÍMICA

TUTOR/A ACADÈMIC/A: José Jaime Baldoví Jachán

TUTOR/A ACADÈMIC/A (si escau):

TUTOR/A EXTERN/A (si escau):

TÍTOL

Estudio de propiedades electrónicas y magnéticas de sistemas metalo-orgánicos con interés en magnónica

OBJECTIUS

- Cálculo de estructura electrónica de sistemas metalo-orgánicos basados en metales de transición.
- Análisis de los efectos del campo cristalino en la estructura electrónica
- Determinación del canje magnético entre los diferentes centros.

METODOLOGIA

El estudiante se familiarizará en cálculos de primeros principios basados en teoría de funcional de densidad para resolver la estructura electrónica de sistemas magnéticos basados en materiales metalorgánicos (Perlepe et al., Science, 2020, 370, 6516; Pedersen et al., Nature Chemistry, 2018, 10, 1056). Se analizarán los efectos del campo cristalino en la distribución de orbitales a partir de un estudio de la densidad de estados. Posteriormente, se calcularán las constantes de canje magnético entre los diferentes centros. Esto nos permitirá avanzar en el conocimiento de estas familias para aplicaciones en magnónica basada en moléculas.



TEMA TREBALL FI DE GRAU GRAU EN QUÍMICA

TUTOR/A ACADÈMIC/A: José Jaime Baldoví Jachán

TUTOR/A ACADÈMIC/A (si escau):

TUTOR/A EXTERN/A (si escau):

TÍTOL

Funcionalización química de materiales bidimensionales basados en bismuto con moléculas inorgánicas

OBJECTIUS

- Diseñar sistemas híbridos de bismuto con superficie funcionalizada por moléculas magnéticas.
- Determinación de su estructura electrónica
- Estudio de los estados de superficie.

METODOLOGIA

Se diseñará un material formado por unas pocas láminas de bismuto coordinadas a diferentes complejos de coordinación. Estudiaremos el tuneo de las propiedades del material 2D a través de la determinación de la estructura electrónica por métodos de primeros principios basados en teoría del funcional de densidad. Posteriormente, estudiaremos los estados de superficie para resolver el efecto de los sistemas químicos anclados en la superficie en la conductividad del material.



TEMA TREBALL FI DE GRAU GRAU EN QUÍMICA

TUTOR/A ACADÈMIC/A: José Jaime Baldoví Jachán

TUTOR/A ACADÈMIC/A (si escau):

TUTOR/A EXTERN/A (si escau):

TÍTOL

Estudio de deformaciones mecánicas en materiales bidimensionales inorgánicos de interés en magnónica

OBJECTIUS

- Aprender a simular diferentes deformaciones mecánicas (e.g. presión axial, estiramiento uniaxial) en materiales bidimensionales antiferromagnéticos.
- Determinación de la energía de las diferentes configuraciones magnéticas en función de la deformación aplicada.
- Análisis de la estructura electrónica.

METODOLOGIA

El alumno se familiarizará con diferentes tipos de deformaciones mecánicas aplicadas a materiales bidimensionales. En concreto nos centraremos en la familia de los fosfocalcogenuros de metales de transición (MPS3). Estos sistemas están recibiendo una atención considerable debido a sus propiedades antiferromagnéticas en la monocapa, sus propiedades ópticas y su estabilidad al aire. Estudiaremos diferentes configuraciones magnéticas en función de la deformación aplicada. Estudiaremos el efecto de la distorsión aplicada a través de la evolución de la estructura electrónica.



TRABAJO FINAL DE GRADO
GRADO EN QUÍMICA

TUTOR/A ACADÉMICO/A: Samia Benmansour

TUTOR/A ACADÉMICO/A (si procede): Carlos J. Gómez

TUTOR/A EXTERNO/A (si procede):

TÍTULO

Síntesis y caracterización de redes magnéticas porosas de lantanoides con ligandos de tipo anilato y distintos coligandos.

OBJETIVOS

- 1- Síntesis y de polímeros de coordinación porosos con ligandos de tipo anilato y distintos coligandos con metales lantanoides como Dy.
- 2- Estudio de la estructura de los polímeros sintetizados.
- 3- Caracterización de las propiedades magnéticas de los compuestos obtenidos.

METODOLOGÍA

Síntesis de los polímeros de coordinación porosa en forma de monocristales usando técnicas de evaporación lenta y técnicas de difusión en tubo largo (conocida como layering). Caracterización de los materiales sintetizados por medio de diversas técnicas como IR, análisis elemental, difracción de R-X de polvo y monocristal. Medida de las propiedades magnéticas en un susceptómetro de tipo SQUID y en un equipo de tipo PPMS para medidas magnéticas con campo alterno (AC).



(Sello del Departamento)

VNIVERSITAT DE VALÈNCIA Facultat de Química

TEMA TREBALL FI DE GRAU GRAU EN QUÍMICA

TUTOR/A ACADÈMIC/A: Juan Modesto Clemente Juan

TUTOR/A ACADÈMIC/A (si escau):

TUTOR/A EXTERN/A (si escau):

TÍTOL

Estudio del estado fundamental en moléculas de valencia mixta en función de algún estímulo externo

OBJECTIUS

En este proyecto se propone estudiar de forma teórica moléculas de valencia mixta modelo donde se controle su estado fundamental de espín mediante la aplicación de algún estímulo externo (por ejemplo, un campo eléctrico).

METODOLOGIA

Se propondrá moléculas modelo, por ejemplo basadas en polioxometalatos de valencia mixta, y diferentes organizaciones espaciales entre ellas. Para estudiar las diferentes estructuras y predecir su comportamiento magnético se utilizará la aproximación teórica de un Hamiltoniano efectivo molecular total (se utilizarán para ello los programas MAGPACK y MVPACK desarrollados por el grupo) a partir de parámetros microscópicos (canje magnético, transferencia electrónica, repulsión de Coulomb, energía orbital).

A partir de estos cálculos se pretende obtener las condiciones que deben cumplir estas moléculas para poder controlar el estado fundamental mediante la aplicación de un estímulo externo.



(segell del Departament)

TEMA TREBALL FI DE GRAU GRAU EN QUÍMICA

TUTOR/A ACADÈMIC/A: Antonio L. Ribera Hermano

TUTOR/A ACADÈMIC/A (si escau):

TUTOR/A EXTERN/A (si escau):

TÍTOL

Diseño y preparación de matrices poliméricas híbridas. Inclusión de sistemas inorgánicos que aporten propiedades específicas.

OBJECTIUS

Diseñar y preparar materiales inorgánicos con estructura laminar, principalmente sistemas basados en Hidróxidos Dobles Laminares (LDHs) que contengan metales de transición capaces de aportar propiedades específicas a la matriz polimérica .

METODOLOGIA

La primera etapa consistirá en la preparación de LDHs en los que se incluyan en la red de hidróxidos metales de transición que puedan aportar propiedades específicas al material híbrido. La síntesis de los sistemas LDH se intentará utilizando varios métodos: i) método tradicional de precipitación a pH constante; ii) método de coprecipitación con urea como generador de pH básico; iii) método hidrotermal utilizando hexametilentetramina, HTM, para generar pH básico.

Los sistemas LDH serán caracterizados mediante técnicas convencionales (difracción de RX, análisis elemental, SEM, espectroscopia IR, análisis termogravimétrico, etc.) mientras que se utilizarán técnicas más específicas, como microscopia electrónica de transmisión (TEM), propiedades texturales, espectroscopia fotoelectrónica de RX y espectroscopia UV-Vis para el estudio de propiedades.

Por último, se diseñarán estrategias para conseguir la inclusión de los sistemas inorgánicos en las matrices poliméricas, buscando una sinergia que dote a las matrices poliméricas híbridas de las propiedades específicas que aportan los sistemas LDH.

TEMA TREBALL FI DE GRAU GRAU EN QUÍMICA

TUTOR/A ACADÈMIC/A: Antonio L. Ribera Hermano

TUTOR/A ACADÈMIC/A (si escau):

TUTOR/A EXTERN/A (si escau):

TÍTOL

Síntesis de hidróxidos laminares basados en Fe(III) y Cr(III) para conseguir líquidos de espín cuánticos hexagonales.

OBJECTIUS

Sintetizar Hidróxidos Dobles Laminars (LDHs) en los que los cationes metálicos como el Fe (III) o el Cr(III), con valores bajos de momentos magnéticos, permitan estados magnéticos exóticos, como ahora son los líquidos de espín cuánticos.

METODOLOGIA

Para la síntesis de sistemas LDH se han descrito muchos procedimientos, desde los tradicionales en los que el control del pH se lleva a cabo con disoluciones acuosas de NaOH hasta los más recientes en los que se utilizan compuestos ARR (del inglés ammonium releasing reagent), reactivos que por descomposición térmica generan amoníaco, responsable del control del pH del medio. Serán precisamente estos métodos más novedosos los utilizados mayoritariamente para conseguir topografías magnéticas hexagonales.

Desde el punto de vista composicional los sistemas LDH poseen grandes ventajas dado que permiten por una parte la combinación de un número importante de centros metálicos diferentes, en este proyecto se basarán en Fe(III) o Cr(III) y además se pueden conseguir materiales en los que se varía la relación entre los diferentes centros metálicos. Esta última ventaja será utilizada para diseñar las síntesis en las que se variarán las cantidades de Fe(III) o Cr(III) para conseguir las topografías que conlleven la obtención de líquidos de espín cuánticos.

Para la cristalización de estos materiales se utilizarán mayoritariamente autoclaves que permitirán conseguir las elevadas presiones requeridas.

Paralelamente a los procesos de síntesis se realizará la caracterización de los materiales obtenidos por DRX, Análisis elemental, FT-IR, UV-Vis, SQUID, etc.



TEMA TREBALL FI DE GRAU GRAU EN QUÍMICA

TUTOR/A ACADÈMIC/A: Antonio L. Ribera Hermano

TUTOR/A ACADÈMIC/A (si escau):

TUTOR/A EXTERN/A (si escau):

TÍTOL

Síntesis de hidróxidos laminares basados en Cu(II) y Mn(II) para conseguir líquidos de espín cuánticos triangulares.

OBJECTIUS

Sintetizar Hidróxidos Dobles Laminares (LDHs) en los que los cationes metálicos como el Cu(II) o el Mn(II), con valores bajos de momentos magnéticos, permitan conseguir topografías magnéticas exóticas, como ahora son los líquidos de espín cuánticos.

METODOLOGIA

Para la síntesis de sistemas LDH se han descrito muchos procedimientos, desde los tradicionales en los que el control del pH se lleva a cabo con disoluciones acuosas de NaOH hasta los más recientes en los que se utilizan compuestos ARR (del inglés ammonium releasing reagent), reactivos que por descomposición térmica generan amoníaco, responsable del control del pH del medio. Serán precisamente estos métodos más novedosos los utilizados mayoritariamente para conseguir topografías magnéticas triangulares.

Desde el punto de vista composicional los sistemas LDH poseen grandes ventajas dado que permiten por una parte la combinación de un número importante de centros metálicos diferentes, en este proyecto se basarán en Cu(II) o Mn(II) y además se pueden conseguir materiales en los que se varía la relación entre los diferentes centros metálicos. Esta última ventaja será utilizada para diseñar las síntesis en las que se variarán las cantidades de Cu(II) o Mn(II) para conseguir las topografías que conlleven la obtención de líquidos de espín cuánticos.

Para la cristalización de estos materiales se utilizarán mayoritariamente autoclaves que permitirán conseguir las elevadas presiones requeridas.

Paralelamente a los procesos de síntesis se realizará la caracterización de los materiales obtenidos por DRX, Análisis elemental, FT-IR, UV-Vis, SQUID, etc.



TEMA TREBALL FI DE GRAU GRAU EN QUÍMICA

TUTOR/A ACADÈMIC/A: Antonio L. Ribera Hermano

TUTOR/A ACADÈMIC/A (si escau):

TUTOR/A EXTERN/A (si escau):

TÍTOL

Preparación de fotocatalizadores basados en Hidróxidos Dobles Laminare (LDHs) de Zn y Cr para la reacción de fotorreducción de CO_2 .

OBJECTIUS

Diseño, síntesis y caracterización de hidróxidos dobles laminare tri o tetrametálicos que contengan Zn y Cr junto a otros metales de transición en su estructura. Los catalizadores sintetizados se caracterizarán mediante las técnicas habituales para este tipo de materiales (DRX, Análisis Elemental y SEM) así como técnicas más específicas (, Espectroscopía UV-Vis, SEM, TEM – Difracción de Electrones, XPS...).

METODOLOGIA

Diseñar. En primer lugar, se establecerán las propiedades requeridas por los catalizadores que intervienen en la reacción de fotorreducción del CO_2 y se llevará a cabo un estudio para diseñar LDHs que puedan dotarse de estas propiedades.

Síntesis. Se prepararán LDHs, en los que coexistan metales de transición en proporciones variables, utilizando varios métodos: i) método tradicional de precipitación a pH constante; ii) método de coprecipitación con urea como generador de pH básico; iii) método hidrotermal utilizando hexametilentetramina, HTM, para generar pH básico; iv) método solvotermal en metanol que permita el control morfológico del material para conseguir morfologías especiales. Los materiales obtenidos serán sometidos a procesos post-síntesis para generar defectos estructurales que permitan incrementar su actividad catalítica.

Caracterización. Los LDHs serán caracterizados mediante técnicas convencionales (difracción de RX, análisis elemental, SEM, espectroscopia IR, análisis termogravimétrico, etc.) así como por técnicas más específicas, como microscopia electrónica de transmisión (TEM), Difracción de Electrones, propiedades texturales, espectroscopia fotoelectrónica de RX y sobre todo espectroscopia UV-Vis para el estudio de los centros activos.

TEMA TREBALL FI DE GRAU GRAU EN QUÍMICA

TUTOR/A ACADÈMIC/A: Antonio L. Ribera Hermano

TUTOR/A ACADÈMIC/A (si escau):

TUTOR/A EXTERN/A (si escau):

TÍTOL

Preparación de electrocatalizadores basados en Hidróxidos Dobles Laminares (LDHs) que contengan V en su estructura para catalizar el proceso de disociación del agua (water splitting) y la reacción de electrorreducción de CO_2 .

OBJECTIUS

Diseño, síntesis y caracterización de Hidróxidos Dobles Laminares (LDHs) que contengan V junto a otros metales de transición en su estructura. Los catalizadores sintetizados se caracterizarán mediante las técnicas habituales para este tipo de materiales (DRX, Análisis Elemental y SEM) así como técnicas más específicas (Espectroscopia UV-Vis, TEM – Difracción de Electrones, XPS, electroquímica ...).

METODOLOGIA

Diseñar. En primer lugar, se establecerán las propiedades requeridas por los catalizadores que intervienen en el proceso de disociación del agua (water splitting) y la electrorreducción de CO_2 y se llevará a cabo un estudio para diseñar LDHs que puedan dotarse de estas propiedades.

Síntesis. Se prepararán LDHs en los que coexistan metales de transición en proporciones variables, utilizando varios métodos: i) método tradicional de precipitación a pH constante; ii) método de coprecipitación con urea como generador de pH básico; iii) método hidrotermal utilizando hexametilentetramina, HTM, para generar pH básico. Una vez definido el método de síntesis más adecuado para cada material, se llevarán a cabo las síntesis sobre sustratos conductores como Ni Foam, de forma que los catalizadores queden soportados.

Caracterización. Los LDHs serán caracterizados mediante técnicas convencionales (difracción de RX, análisis elemental, SEM, espectroscopia IR, análisis termogravimétrico, etc.) mientras que se utilizarán técnicas más específicas, como microscopia electrónica de transmisión (TEM), Difracción de Electrones, propiedades texturales, espectroscopia fotoelectrónica de RX (XPS) y sobre todo espectroscopia UV-Vis y electroquímica para el estudio de los centros activos.

TEMA TREBALL FI DE GRAU GRAU EN QUÍMICA

TUTOR/A ACADÈMIC/A: Carlos Giménez Saiz

TUTOR/A ACADÈMIC/A (si escau):

TUTOR/A EXTERN/A (si escau):

TÍTOL

Síntesis y caracterización de polioxometalatos con Pb(II) fotoluminiscentes

OBJECTIUS

Obtención, caracterización y purificación de polioxometalatos que contienen Pb(II) y estudiar su luminiscencia.

METODOLOGIA

La síntesis se realizará por reacción de diversos polioxometalatos precursores vacantes con nitrato de plomo(II) en agua y su posterior precipitación con cationes adecuados. Si es necesario se purificarán por recrystalizaciones sucesivas.

La caracterización podrá incluir las siguientes técnicas: espectroscopia IR, espectroscopia UV-vis, análisis por microscopia electrónica, difracción de rayos X y/o espectroscopia de fotoluminiscencia.



(segell del Departament)

VNIVERSITAT DE VALÈNCIA Facultat de Química

TEMA TREBALL FI DE GRAU GRAU EN QUÍMICA

TUTOR/A ACADÈMIC/A: Carlos Giménez Saiz

TUTOR/A ACADÈMIC/A (si escau):

TUTOR/A EXTERN/A (si escau):

TÍTOL

Síntesis y caracterización de polioxometalatos con Bi(III) fotoluminiscentes

OBJECTIUS

Obtención, caracterización y purificación de polioxometalatos que contienen Bi(III) y estudiar su luminiscencia.

METODOLOGIA

La síntesis se realizará por reacción de diversos polioxometalatos precursores vacantes con nitrato de bismuto(III) en agua y su posterior precipitación con cationes adecuados. Si es necesario se purificarán por recristalizaciones sucesivas.

La caracterización podrá incluir las siguientes técnicas: espectroscopia IR, espectroscopia UV-vis, análisis por microscopia electrónica, difracción de rayos X y/o espectroscopia de fotoluminiscencia.



VNIVERSITAT DE VALÈNCIA Facultat de Química

TEMA TREBALL FI DE GRAU GRAU EN QUÍMICA

TUTOR/A ACADÈMIC/A: Carlos Giménez Saiz

TUTOR/A ACADÈMIC/A (si escau):

TUTOR/A EXTERN/A (si escau):

TÍTOL

Síntesis y caracterización de materiales conductores basados en polioxometalatos

OBJECTIUS

Obtener nuevos materiales conductores basados en polioxometalatos, medir su conductividad y resolver su estructura.

METODOLOGIA

Primero se sintetizarán los polioxometalatos en disolución acuosa siguiendo métodos y procedimientos conocidos y se comprobará su pureza mediante IR y análisis por microscopia electrónica. Después se transferirán a fase orgánica para realizar su electrocristalización en presencia de dadores orgánicos de tipo tetratiofulvaleno. Finalmente se medirá su conductividad y estructura cristalina por difracción de rayos X de monocristal.



(segell del Departament)

TRABAJO FINAL DE GRADO GRADO EN QUÍMICA

TUTOR/A ACADÉMICO/A: Pedro Amorós del Toro

TUTOR/A ACADÉMICO/A (si procede):

TUTOR/A EXTERNO/A (si procede):

TÍTULO

Pasivación de la perovskita 3D con materiales 2D para fabricar y caracterizar Células Solares altamente eficientes y estables

OBJETIVOS

La perovskita es un material que ha revolucionado la última década en el campo fotovoltaico debido a sus propiedades ópticas y eléctricas. Sin embargo, debido a sus problemas de degradación frente a la exposición de oxígeno y otros factores, trataremos de mejorar este problema mediante la síntesis de la perovskita (con estructura 3D) pasivando su superficie con materiales que forman capas laminares de 2D.

METODOLOGÍA

La metodología que se llevará a cabo en este trabajo es la preparación de las disoluciones de perovskitas 3D y 2D y su deposición mediante la técnica de 'spin coater'. La pasivación superficial de la perovskita 3D se realizará con una nueva capa de perovskita en 2D, obteniendo una perovskita 3D/2D. Se estudiarán las propiedades fundamentales de dichas láminas mediante numerosas técnicas, por ejemplo, absorbancia, fotoluminiscencia, difracción de rayos X...

Posteriormente, se fabricarán y optimizarán células solares con las perovskitas optimizadas 3D/2D. Por último, estos dispositivos se caracterizarán con técnicas eléctricas.



(Sello del Departamento)

TRABAJO FINAL DE GRADO GRADO EN QUÍMICA

TUTOR/A ACADÉMICO/A: Pedro Amorós del Toro

TUTOR/A ACADÉMICO/A (si procede):

TUTOR/A EXTERNO/A (si procede):

TÍTULO

Perovskitas de Sn de baja dimensionalidad para aplicaciones optoelectrónicas

OBJETIVOS

En la actualidad, las perovskitas compuestas de plomo y haluros son las que mayor eficiencia fotovoltaica presentan. Sin embargo, debido a la presencia del elemento tóxico el plomo, surgen alternativas para ser sustituido, como es el elemento estaño. Uno de los principales objetivos de este trabajo es evitar la rápida reacción de oxidación del Sn^{2+} a Sn^{4+} a través de agentes reductores potentes. Dicha perovskita se optimizará para fabricar dispositivos fotovoltaicos.

METODOLOGÍA

Este trabajo constará de diversas etapas,

- Analizar tipos de agentes reductores potentes para evitar la reacción de oxidación de Sn^{2+} a Sn^{4+} ,
- Síntesis y optimización de perovskitas de Sn mediante la técnica de 'spin coater',
- Las láminas sintetizadas se caracterizarán sus propiedades ópticas, eléctricas y morfológicas mediante la espectroscopía de UV-Visible, fotoluminiscencia, difracción de rayos X,...
- Preparación y optimización de células solares de la perovskita optimizada basada en Sn.
- Caracterización de las células solares de perovskita de Sn mediante técnicas eléctricas.



TEMA TREBALL FI DE GRAU GRAU EN QUÍMICA

TUTOR/A ACADÈMIC/A: FRANCISCO MANUEL ROMERO MARTÍNEZ

TUTOR/A ACADÈMIC/A (si escau):

TUTOR/A EXTERN/A (si escau):

TÍTOL

Materials moleculares inteligentes: Polímeros termosensibles con funciones ópticas y magnéticas

OBJECTIUS

Un polímero termosensible es un polímero que presenta un cambio drástico de sus propiedades físicas con la temperatura. Algunas poliamidas, por ejemplo, son solubles en agua debido a los enlaces de hidrógeno que establecen en disolución. Al calentar por encima de una temperatura crítica, el polímero se contrae y precipita debido a factores entrópicos. Nuestro objetivo es encapsular, en estos polímeros, complejos de transición de espín, que pueden ofrecer una respuesta óptica o magnética a este fenómeno de contracción. Conseguiríamos, por tanto, sensores ópticos y/o magnéticos con un rango de temperatura modulable.

METODOLOGIA

Utilizaremos como polímero termosensible la poli(Nisopropilacrilamida), que presenta una temperatura crítica de 32°C. Para ajustar la temperatura crítica al rango deseado se prepararán copolímeros con otros monómeros de tipo amida o ácido carboxílico, como el ácido metacrílico. La preparación de los polímeros se llevará a cabo utilizando reacciones redox para iniciar la polimerización en fase acuosa. Intentaremos evitar la iniciación radicalaria en fase orgánica, por ser más contaminante. Una vez formados los polímeros, se procederá a la encapsulación de las moléculas magnéticas y a la caracterización y estudio de las propiedades físicoquímicas de estos materiales.



TEMA TREBALL FI DE GRAU GRAU EN QUÍMICA

TUTOR/A ACADÈMIC/A: FRANCISCO MANUEL ROMERO MARTÍNEZ

TUTOR/A ACADÈMIC/A (si escau):

TUTOR/A EXTERN/A (si escau):

TÍTOL

Diseño y construcción de un robot dispensador de líquidos para química combinatoria dinámica.

OBJECTIUS

Hasta ahora, cuando un químico planea una síntesis se basa en su experiencia previa y en la literatura científica para escoger las condiciones que permiten obtener el producto deseado. Con el auge de la ciencia de datos y los avances en robótica, es posible explorar de manera sistemática variables como temperatura, pH, concentración, etc. Nuestro objetivo es diseñar un robot que nos permita hacer esta exploración automática en reacciones de interés en química inorgánica.

METODOLOGIA

Se necesita formación previa del alumno en robótica (que puede ser de tipo autodidacta). Dependiendo de esta experiencia previa, se utilizarán módulos de robótica comerciales, como LEGO MINDSTORMS o kits de tipo ARDUINO.

En primer lugar, se llevará a cabo el ensamblaje de las piezas que constituirán el robot dispensador. A continuación, se realizarán las tareas de programación. El programa a utilizar dependerá también de la experiencia previa que tenga el alumno.

Por último, aplicaremos el uso del robot en reacciones de equilibrio de interés en química inorgánica.



VNIVERSITAT (ò*) E VALÈNCIA] Facultat de Química

TEMA TREBALL FI DE GRAU GRAU EN QUÍMICA

TUTOR/A ACADÈMIC/A: Jose Vicente Ros Lis

TUTOR/A ACADÈMIC/A (si escau):

TUTOR/A EXTERN/A (si escau):

TÍTOL

Desarrollo de materiales moduladores de la actividad enzimática

OBJECTIUS

Preparar y ensayar nanomateriales con capacidad de modulación de la actividad enzimática

METODOLOGIA

Preparación de materiales
Caracterización de materiales
Ensayos de actividad enzimática



(segell del Departament)

VNIVERSITAT (ò*) E VALÈNCIA] Facultat de Química

TEMA TREBALL FI DE GRAU GRAU EN QUÍMICA

TUTOR/A ACADÈMIC/A: Jose Vicente Ros Lis

TUTOR/A ACADÈMIC/A (si escau):

TUTOR/A EXTERN/A (si escau):

TÍTOL

Preparación y ensayo de materiales de interés biomédico

OBJECTIUS

Desarrollar nanomateriales de interés biomédico

METODOLOGIA

Preparación de materiales
Caracterización de materiales
Estudios de actividad de los materiales en patologías de interés



(segell del Departament)

VNIVERSITAT DE VALÈNCIA (ò*) Facultat de Química

TEMA TREBALL FI DE GRAU GRAU EN QUÍMICA

TUTOR/A ACADÈMIC/A: Marta Viciano Chumillas

TUTOR/A ACADÈMIC/A (si escau): Emilio Pardo Marín

TUTOR/A EXTERN/A (si escau):

TÍTOL

Síntesis de polímeros de coordinación con ligandos aminoácidos (bioMOFS) con aplicaciones catalíticas y descontaminación de aguas

OBJECTIUS

El objetivo es desarrollar nuevos polímeros de coordinación o redes metal-orgánicas (MOFs) para estudiar sus aplicaciones potenciales en catalísis y descontaminación de aguas. El trabajo se llevará a cabo en el grupo MUPOMAT (Prof. E. Pardo).

METODOLOGIA

- Síntesis de ligandos orgánicos
- Síntesis de polímeros de coordinación
- Técnicas de cristalización para la caracterización estructural por difracción de rayos X de monocristal
- Caracterización de compuestos (IR, RMN, EDAX, XRPD, TGA)
- Estudios de adsorción de gases



VNIVERSITAT (ò*) E VALÈNCIA Facultat de Química

TEMA TREBALL FI DE GRAU GRAU EN QUÍMICA

TUTOR/A ACADÈMIC/A: Eugenio Coronado Miralles

TUTOR/A ACADÈMIC/A (si escau):

TUTOR/A EXTERN/A (si escau):

TÍTOL

Avances en la procesabilidad de hidróxidos laminares bidimensionales en películas delgadas para aplicaciones en energía y en recubrimientos funcionales.

OBJECTIUS

Dispersión de los hidróxidos laminares en diferentes solventes.
Caracterización y optimización de las dispersiones.
Preparación de las películas delgadas mediante técnicas de deposición tales como recubrimiento por centrifugación, recubrimiento por gota, capa por capa, deposición por cuchilla.
Caracterización de los recubrimientos por diversas microscopias y ángulo de contacto.

METODOLOGIA

El estudiante conocerá los métodos sintéticos empleados para la obtención de los hidróxidos laminares, así como la caracterización fundamental de los mismo. Posteriormente, abordara la preparación de dispersiones estables de los materiales, empleando técnicas de dispersión de sólidos, tales como baño o punta de ultrasonidos, optimizando al mismo tiempo los disolventes a emplear con cada material.

A continuación, abordará la caracterización de las dispersiones mediante dispersión dinámica de la luz, viscosidad, tiempo de floculación, etc. Una vez optimizada la fórmula de las dispersiones se abordará la preparación de las películas delgadas empleando diversas técnicas en función de la aplicación final y el tipo de sustrato empleado.

Por último, se caracterizarán de forma física y química los recubrimientos con microscopias de barrido y de fuerza atómica.

VNIVERSITAT DE VALÈNCIA (ò*) Facultat de Química

TEMA TREBALL FI DE GRAU GRAU EN QUÍMICA

TUTOR/A ACADÈMIC/A: Eugenio Coronado Miralles

TUTOR/A ACADÈMIC/A (si escau):

TUTOR/A EXTERN/A (si escau):

TÍTOL

Materiales laminares bidimensionales basados en metales de transición para conversión y almacenamiento de energía

OBJECTIUS

Diseño y síntesis de hidróxidos laminares basados en metales de transición (Fe, Co, Ni, Zn).
Caracterización estructural y fisicoquímica de los materiales obtenidos.
Estudio de su rendimiento en aplicaciones energéticas: supercondensadores (almacenamiento) y electrólisis, "water splitting" (conversión).

METODOLOGIA

La persona que desarrolle este TFG estará involucrada en el diseño de los materiales, desarrollando la síntesis mediante un método coloidal. Se realizará una evaluación de la cinética de precipitación para entender cómo crecen estos materiales.
Una vez desarrollada y optimizada la síntesis, se procederá a la caracterización estructural y fisicoquímica de los materiales: difracción de rayos X, espectroscopia infrarroja, UV-Vis y XPS; termogravimetría acoplada con cromatografía de gases y espectroscopia de masas, además de diversas microscopías electrónicas (SEM y TEM) y de fuerza atómica (AFM).
A su vez, se realizará una caracterización magnética que permitirá entender las interacciones electrónicas entre los metales utilizados.

Por último, se evaluará el rendimiento de las fases obtenidas como materiales para electrodos. Es decir, se realizará una caracterización electroquímica que permitirá comprender la relación estructura-propiedad y evaluar su comportamiento.

VNIVERSITAT DE VALÈNCIA Facultat de Química

TEMA TREBALL FI DE GRAU GRAU EN QUÍMICA

TUTOR/A ACADÈMIC/A: Eugenio Coronado Miralles

TUTOR/A ACADÈMIC/A (si escau):

TUTOR/A EXTERN/A (si escau):

TÍTOL

Síntesis de nanomateriales híbridos a base de fullerenos multicapa (carbon nano onions) para aplicaciones en nanomedicina

OBJECTIUS

Desarrollo de una nueva metodología de síntesis de nanocebollas de carbono (CNOs).
Completa caracterización de los nano materiales obtenidos mediante diferentes técnicas analíticas y espectroscópicas.
Síntesis orgánica de precursores para la funcionalización de los materiales obtenidos.
Funcionalización y estudio de las propiedades químico-físicas y de la actividad biológica de los nanomateriales desarrollados.

METODOLOGIA

Durante la estancia en el laboratorio el estudiante trabajará en el desarrollo de nuevas metodologías de síntesis de nanocebollas de carbono (CNOs) junto con puntos cuánticos de carbono.

Diferentes técnicas de caracterización serán aplicadas para poder comprobar la modificación efectiva de estos nanomateriales, como por ejemplo: difracción de rayos X, espectroscopia Raman, microscopía electrónica, termogravimetría, XPS, etc.

En una segunda etapa se abordará la síntesis orgánica de pequeñas moléculas para la funcionalización superficial de estos materiales, investigando posteriormente sus propiedades químico-físicas y su actividad biológica (utilizando entre otros, estudios de citotoxicidad en distintas líneas celulares).

