| NÚM | TEMA | TUTOR(S) ACADÈMIC(S) | TUTOR EXTERN (si escau) | DEPARTAMENTO |
|---|---|---|---|---|
| 1 | Nanomateriales y sensores | José Vicente Ros Lis | | Q.Inorgànica |
| 2 | Síntesis de nanomateriales mesoporosos silíceos de alta superficie y sus aplicaciones en algunos sectores emergentes | Jamal El Haskouri | | Q.Inorgànica |
| | | | | |
| 4 | Biodiseño de cristales porosos flexibles | Carlos Martí Gastaldo | | Q.Inorgànica |
| 5 | Diseño Computacional de Sistemas Complejos de Aminas con Redes Metal-Orgánicas de Titanio para la Captura Selectiva d | Carlos Martí Gastaldo | | Q.Inorgànica |
| 6 | Control de morfología y química superficial en cristales porosos | Carlos Martí Gastaldo | | Q.Inorgànica |
| | | | | |
| 8 | Materiales magnéticos multifuncionales basados en MCOFs y MOFs con propiedades luminiscentes | Joan Cano Boquera | | Q.Inorgànica |
| 9 | Química huesped-anfitrión de MOFs y su uso como reactores químicos | Emilio Pardo Marín | | Q.Inorgànica |
| 10 | Investigación de la interacción de complejos metálicos con ADN G-cuádruplex | Jorge Gonzalez García | | Q.Inorgànica |
| 11 | Desarrollo de sondas de ADN/ARN no-canónico | Jorge Gonzalez García | | Q.Inorgànica |
| 12 | Desarrollo de inhibidores de la telomerasa | Jorge Gonzalez García | | Q.Inorgànica |
| 13 | Encapsulación de biomoléculas en polímeros de coordinación porosos | Jesus Ferrando Soria (QI)-José Manuel Herrero (QA) | | Q.Inorgànica |
| 14 | Síntesis y caracterización de redes metal-orgánicas con metalloligandos basados en oxamatos | Jesús Ferrando Soria | | Q.Inorgànica |
| 15 | Síntesis de nanomateriales basado en bismuto para aplicaciones biomédicas | Matteo Andrea Lucherelli- Gonzalo Abellán Sáez | | Q.Inorgànica |
| | | | | |
| 17 | Síntesis y caracterización de polioxometalatos con Pb(II) fotoluminiscentes | Carlos Giménez Saiz | | Q.Inorgànica |
| 18 | Perovskitas procesadas con solventes verdes | Teresa Ripollés Sanchis- Jamal El Haskouri | | Q.Inorgànica |
| 19 | Síntesis de monocapas autoensambladas que actúan como contactos selectivos de huecos en dispositivos optoelectrónicos | Teresa Ripollés Sanchis- Rafael Abargues López | | Q.Inorgànica |
| 20 | Síntesis de nanocristales de perovskita 0D para dispositivos optoelectrónicos | Teresa Ripollés Sanchis- Rafael Abargues López | | Q.Inorgànica |
| 21 | Síntesis in-situ de nanocomposites luminiscentes de perovskitas en matrices para dispositivos optoelectronicos de alta eficie | Teresa Ripollés Sanchis- Rafael Abargues López | | Q.Inorgànica |
| 22 | Diseño, síntesis y caracterización de heteroestructuras basadas en sistemas laminares para generar catalizadores activos en fotorreducción de dióxido de carbono. | Antonio Luis Ribera Hermano | | Q.Inorgànica |
| 23 | Diseño, síntesis y caracterización de fotocatalizadores para "energy conversion reactions" basados en Hidróxidos Dobles Laminares (LDHs). | Antonio Luis Ribera Hermano | | Q.Inorgànica |
| 24 | Redes covalentes porosas para el almacenamiento y detección de hidrógeno | Francisco Manuel Romero Martinez | | Q.Inorgànica |
| | | | | |

VNIVERSITAT DE 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**

Nanomateriales y sensores

**OBJECTIUS**

Desarrollo y ensayo de nanomateriales y/o sensores aplicados

**METODOLOGIA**

Búsqueda bibliográfica
Síntesis de materiales
Caracterización de materiales
Ensayos de actividad
Elaboración de informes

UNIVESITAT DE VALÈNCIA · DEPARTAMENT DE QUÍMICA INORGÀNICA

(segell del Departament)

VNIVERSITAT DE VALÈNCIA Facultat de Química

# TRABAJO FINAL DE GRADO
## GRADO EN QUÍMICA

**TUTOR/A ACADÉMICO/A:** JAMAL EL HASKOURI BENNAGI

**TUTOR/A ACADÉMICO/A (si procede):**

**TUTOR/A EXTERNO/A (si procede):**

**Departamento:** QUÍMICA INORGÁNICA

**TÍTULO**

Síntesis de nanomateriales mesoporosos silíceos de alta superficie y sus aplicaciones en algunos sectores emergentes

**OBJETIVOS**

Los objetivos de este tema consisten en la preparación de materiales mesoporosos de alta superficie a base de silicio puro o dopado con otros metales o elementos de transición. Después de caracterizar estos materiales de los llevara a alguna pruebas en algunos sectores como biomedicina o agricultura

**METODOLOGÍA**

La metodología consiste en la síntesis de nuevos materiales por el método de los atranos o de Stôber.
Caracterizar estos materiales por diferentes técnicas como rayos X, adsorción, desorción de nitrógeno, EDAX, SEM, TEM, mapping, DLS para tamaño de partícula.
Después de la caracterización, se harán algunas pruebas de estos materiales para comprobar sus actividades.

UNIVERSITAT DE VALÈNCIA · DEPARTAMENT DE QUÍMICA INORGÀNICA

(Sello del Departamento)

VNIVERSITAT DE VALÈNCIA Facultat de Química

# TRABAJO FINAL DE GRADO
## GRADO EN QUÍMICA

**TUTOR/A ACADÉMICO/A:** CARLOS MARTÍ GASTALDO

**TUTOR/A ACADÉMICO/A (si procede):**

**TUTOR/A EXTERNO/A (si procede):**

**Departamento:** Química Inorgánica

**TÍTULO**

BIODISEÑO DE CRISTALES POROSOS FLEXIBLES

**OBJETIVOS**

-Introducción a los principios que controlan la respuesta estructural y estabilidad química en MOFs flexibles.
-Introducción a la síntesis de amino ácidos sintéticos adaptados para la formación de cristales porosos.
-Introducción a la determinación estructural: resonancia magnética nuclear (NMR), espectrometría de masas (ICP-MS), análisis elemental (CHN) y espectroscopia de infrarrojos por transformada de Fourier (FT-IR).

**METODOLOGÍA**

Los amino ácidos sintéticos se sintetizarán en escala multi-gramo a partir de precursores comerciales. Cada ruta y grupos protectores usados se adaptarán a las necesidades impuestas por la interferencia de las cadenas laterales de los distintos amino ácidos propuestos. Esta batería de ligandos se analizará con RMN, ICP-MS, análisis elemental (CHN) e infrarrojo. La librería de amino ácidos sintéticos generados se usarán para demostrar su compatibilidad con la formación de redes metal-orgánicas por reacción solvotermal con sales metálicas para la formación de fases cristalinas haciendo uso de una plataforma robotizada de síntesis.

UNIVESITAT DE VALÈNCIA · DEPARTAMENT DE QUÍMICA INORGÀNICA

(Sello del Departamento)

VNIVERSITAT DE VALÈNCIA Facultat de Química

# TEMA TREBALL FI DE GRAU
# GRAU EN QUÍMICA

**TUTOR/A ACADÈMIC/A:** Carlos Marti Gastaldo

**TUTOR/A ACADÈMIC/A (si escau):**

**TUTOR/A EXTERN/A (si escau):**

## TÍTOL

Diseño Computacional de Sistemas Complejos de Aminas con Redes Metal-Orgánicas de Titanio para la Captura Selectiva de Dióxido de Carbono.

## OBJECTIUS

1. Identificar las aminas y la estabilidad de las redes metal-orgánicas de titanio (Ti-MOF) que potencialmente podrían interaccionar fuertemente entre si.

2. Estudiar la incorporación de las aminas en los Ti-MOFs a través de métodos de química computacional.

3. Estudiar la estabilidad termodinámica e identificar las interacciones directoras del sistema amina-Ti-MOFs.

4. Correlacionar el número de grupos aminos adsorbidos en Ti-MOFs con la capacidad de interaccionar con las moléculas de dióxido de carbono.

## METODOLOGIA

1. Revisión bibliográfica de las aminas usadas para capturar dióxido de carbono en MOFs.

2. Estudio conformacional de las moléculas seleccionadas en el paso 1, usando técnicas computacionales. Se usaran programas de visualización de estructuras tales como Materials Studio, vmd, gdis, and gview.

3. Estudio de estabilidad de Ti-MOFs. Se optimizaran las geometrías del los cristales con técnicas de campo de fuerza implementadas en códigos tal como GULP.

4. Calculo de la energía de interacción entre las aminas y los Ti-MOFs mas estables (segun el paso 2) usando métodos de Química Clásica.

5. Calcular la energía de adsorción del CO2 en los sistemas mas estables (identificados en el paso 4) amina-Ti-MOFs

6. Comparación de los resultados teóricos con los trabajos experimentales de nuestro grupo FuniMAT (www.icmol.es/funimat).

UNIVERSITAT DE VALÈNCIA · DEPARTAMENT DE QUÍMICA INORGÀNICA

(segell del Departament)

VNIVERSITAT DE VALÈNCIA Facultat de Química

# TRABAJO FINAL DE GRADO
## GRADO EN QUÍMICA

**TUTOR/A ACADÉMICO/A:** CARLOS MARTÍ GASTALDO

**TUTOR/A ACADÉMICO/A (si procede):**

**TUTOR/A EXTERNO/A (si procede):**

**Departamento:** Química Inorgánica

**TÍTULO**

Control de morfología y química superficial en cristales porosos

**OBJETIVOS**

-Introducción a los principios que controlan la síntesis modulada de redes metal-orgánicas (MOFs).
-Introducción a la síntesis de colorantes orgánicos.
-Introducción a la determinación estructural: difracción de rayos X, resonancia magnética nuclear (NMR), espectrometría de masas (ICP-MS), análisis elemental (CHN) y espectroscopia de infrarrojos por transformada de Fourier (FT-IR).
-Introducción al uso de fluorescencia confocal.

**METODOLOGÍA**

Los cristales porosos de tipo MOF (metal-organic framework) se prepararán en base a la metodología descrita por el grupo. Para controlar la morfología de cristal, variabilidad entre cubo, cubo truncado, cuboactedro, octaedro truncado u octaedro, se usará síntesis solvotermal con variaciones en la naturaleza y concentración del modulador. La identificación de fase y confirmación de la pureza del MOF así como el estudio de su morfología se realizará con difracción de rayos X, termogravimetría, isotermas de adsorción de gases, microscopía óptica y electrónica de barrido. Para demostrar el control de las caras cristalográficas sobre la quñimica superficial del material, se harán reaccionar cristales con morfología variable con moléculas orgánicas de alta fluorescencia. Estas últimas se prepararán de acuerdo con metodologías descritas y se analizará con RMN, ICP-MS, análisis elemental (CHN) e infrarrojo. Para discriminar la reactividad de caras cristalográficas concretas en el cristal se usará microscopía confocal.

(Sello del Departamento)

VNIVERSITAT DE VALÈNCIA Facultat de Química

# TRABAJO FINAL DE GRADO
# GRADO EN QUÍMICA

**TUTOR/A ACADÉMICO/A:** Joan Cano Boquera

**TUTOR/A ACADÉMICO/A (si procede):**

**TUTOR/A EXTERNO/A (si procede):**

**Departamento:** Química Inorgánica

**TÍTULO**

Materiales magnéticos multifuncionales basados en MCOFs y MOFs con propiedades luminiscentes

**OBJETIVOS**

1) Síntesis de Covalent Organic Frameworks (COFs) con centros coordinantes
2) Síntesis de MCOFs.
3) Síntesis de Metal-Organic Frameworks (MOFs) y Mixed Metal-Organic Frameworks (M' MOFs).
4) Caracterización de los compuestos obtenidos
5) Estudio de propiedades magnéticas, y foto o electroluminiscentes

**METODOLOGÍA**

La metodología usada se basa en varios aspectos:
1) Uso de rutas sintéticas bien conocidas en Química Orgánica a partir de pequeñas unidades elegidas según el diseño molecular previo.
2) Uso de rutas sintéticas de Química de Coordinación adaptadas al ión metálico elegido y otras particulares para sistemas poco solubles (solvothermal and grinding syntheses).
3) Caracterización estructural por difracción de rayos-X sobre monocristal (XRD) y polvo (PXRD).
4) Caracterización por espectroscopía IR, 1H NMR y EXD, análisis elemental y termogravimétrico.
5) Caracterización con magnetómetros SQUID y PPMS y espectroscopía EPR.
6) Caracterización propiedades fotoluminiscentes con espectrofluorímetro.

UNIVESITAT DE VALÈNCIA · DEPARTAMENT DE QUÍMICA INORGÀNICA

(Sello del Departamento)

VNIVERSITAT DE VALÈNCIA Facultat de Química

# TRABAJO FINAL DE GRADO
# GRADO EN QUÍMICA

**TUTOR/A ACADÉMICO/A:** Emilio Pardo Marín

**TUTOR/A ACADÉMICO/A (si procede):**

**TUTOR/A EXTERNO/A (si procede):**

**Departamento:** Química Inorgánica

**TÍTULO**

Química huesped-anfitrión de MOFs y su uso como reactores químicos

**OBJETIVOS**

- Preparación de nuevos polímeros de coordinación porosos (en inglés MOFs) con gran robustez, estabilidad en agua, cristalinidad y con la funcionalización adecuada para su uso como reactores químicos

**METODOLOGÍA**

- Preparación de ligandos orgánicos amediante técnicas de síntesis orgánica.
- Preparación de MOFs utilizando métodos racionales de autoensamblaje racionales.
- Caracterización de los materiales sintetizados por difracción en rayos X, ATG, IR, isotermas de adsorción etc.
- Uso de MOFs como reactores químicos y estudio de su química huesped-anfitrión.

UNIVESITAT DE VALÈNCIA · DEPARTAMENT DE QUÍMICA INORGÀNICA

(Sello del Departamento)

VNIVERSITAT DE VALÈNCIA Facultat de Química

**TRABAJO FINAL DE GRADO**
**GRADO EN QUÍMICA**

**TUTOR/A ACADÉMICO/A:** JORGE GONZÁLEZ GARCÍA

**TUTOR/A ACADÉMICO/A (si procede):**

**TUTOR/A EXTERNO/A (si procede):**

**Departamento:** DEPARTAMENTO DE QUÍMICA INORGÁNICA

**TÍTULO**

INVESTIGACIÓN DE LA INTERACCIÓN DE COMPLEJOS METÁLICOS CON ADN G-CUÁDRUPLEX

**OBJETIVOS**

Preparación de complejos metálicos, evaluación de la interacción con estructuras no-canónicas de ADN (ej. G-cuádruplex...) y análisis de los datos.

**METODOLOGÍA**

*Síntesis, purificación y caracterización de complejos metálicos.
*Evaluación de la interacción con ADN/ARN mediante técnicas biofísicas (UV-Vis, fluorescencia, electroforesis y curvas térmicas).
*Tratamiento y análisis de los datos.

UNIVESITAT DE VALÈNCIA · DEPARTAMENT DE QUIMICA INORGÀNICA ·

(Sello del Departamento)

VNIVERSITAT DE VALÈNCIA Facultat de Química

**TRABAJO FINAL DE GRADO**
**GRADO EN QUÍMICA**

**TUTOR/A ACADÉMICO/A:** JORGE GONZÁLEZ GARCÍA

**TUTOR/A ACADÉMICO/A (si procede):**

**TUTOR/A EXTERNO/A (si procede):**

**Departamento:** DEPARTAMENTO DE QUÍMICA INORGÁNICA

**TÍTULO**

DESARROLLO DE SONDAS DE ADN/ARN NO-CANÓNICO

**OBJETIVOS**

(1) Evaluar el comportamiento fotoquímico de una libreria de sondas fluorescentes en disolución
(2) Determinar la afinidad de sondas fluorescentes por ADN no-canónico
(3) Evaluar la capacidad de la libreria de sondas fluorescentes para detectar ADN no-canónica in vitro y en células

**METODOLOGÍA**

1) Determinación de la interacción de una libreria de sondas fluorescentes con ADN y ARN no-canónico (tipo horquilla, G-quadruplex, i-motif, triple ADN) mediante espectroscopía de fluorescencia, UV-Vis y dicroismo circular.
(2) Evaluación de la estabilización inducida de una libreria de sondas fluorescentes con ADN y ARN no-canónico (tipo horquilla, G-quadruplex, i-motif, triple ADN) a través de UV fusión y FRET.
(3) Estudio de la movilidad en geles de agarosa/acrilamida de los complejos formados entre una libreria de sondas fluorescentes con ADN y ARN no-canónico.
(4) Localización celular de las sondas fluorescentes en células tumorales mediante microscopia confocal de fluorescencia.
(5) Evaluación de la viabilidad celular en un panel de células tumorales y no tumorales mediante ensayos de citotoxicidad MTS o MTT.

(Sello del Departamento)

VNIVERSITAT DE VALÈNCIA Facultat de Química

**TRABAJO FINAL DE GRADO**
**GRADO EN QUÍMICA**

**TUTOR/A ACADÉMICO/A:** JORGE GONZÁLEZ GARCÍA

**TUTOR/A ACADÉMICO/A (si procede):**

**TUTOR/A EXTERNO/A (si procede):**

**Departamento:** DEPARTAMENTO DE QUÍMICA INORGÁNICA

**TÍTULO**

DESARROLLO DE INHIBIDORES DE LA TELOMERASA

**OBJETIVOS**

Evaluar la interacción de unas moléculas orgánicas con ADN telomérico y análisis de datos.

**METODOLOGÍA**

*Evaluación de la interacción con ADN/ARN telomérico mediante técnicas biofísicas (UV-Vis, fluorescencia, electroforesis y curvas térmicas).
*Tratamiento y análisis de los datos.

UNIVESITAT DE VALÈNCIA · DEPARTAMENT DE QUÍMICA INORGÀNICA ·

(Sello del Departamento)

VNIVERSITAT DE VALÈNCIA Facultat de Química

**TRABAJO FINAL DE GRADO**
**GRADO EN QUÍMICA**

**TUTOR/A ACADÉMICO/A:** Jesús Ferrando Soria

**TUTOR/A ACADÉMICO/A (si procede):** José Manuel Herrero

**TUTOR/A EXTERNO/A (si procede):**

**Departamento:** Inorgànica i Analítica

**TÍTULO**

Encapsulación de biomoléculas en polímeros de coordinación porosos

**OBJETIVOS**

- Preparación de materiales basados en estructuras metal-orgánicas sostenibles (bioMOFs).
- Encapsulación de proteínas en los materiales desarrollados.
- Desarrollo del método analítico para la determinación del contenido de proteínas encapsuladas.

**METODOLOGÍA**

- Revisión bibliográfica sobre los antecedentes relativos a la encapsulación de proteínas en bioMOFs.
- Caracterización morfológica de los materiales sintetizados mediante diversas técnicas instrumentales.
- Evaluación de las proteínas encapsuladas en los materiales diseñados mediante electroforesis capilar.
- Validación de la metodología analítica propuesta.
- Preparación, discusión y revisión del proyecto final.

UNIVESITAT DE VALÈNCIA · DEPARTAMENT DE QUIMICA INORGANICA

(Sello del Departamento)

VNIVERSITAT DE VALÈNCIA Facultat de Química

## TEMA TREBALL FI DE GRAU
## GRAU EN QUÍMICA

**TUTOR/A ACADÈMIC/A:** Jesus Ferrando Soria

**TUTOR/A ACADÈMIC/A (si escau):**

**TUTOR/A EXTERN/A (si escau):**

**TÍTOL**

Síntesis y caracterización de redes metal-orgánicas con metalloligandos basados en oxamatos

**OBJECTIUS**

- Sintetizar y cristalizar compuestos de coordinación con ligandos basados en oxamato.
- Caracterización estructural.
- Medida e interpretación de las medias físicas

**METODOLOGIA**

- Iniciación a los procesos de síntesis y cristalización de complejos metálicos con metales de transición y ligandos derivados de aminoácidos.
- Medida e interpretación de propiedades físicas diversas.
- Uso de programas informáticos para el análisis de estructuras cristalinas.

UNIVESITAT DE VALÈNCIA · DEPARTAMENT DE QUIMICA INORGÀNICA

(segell del Departament)

VNIVERSITAT DE VALÈNCIA Facultat de Química

## TEMA TREBALL FI DE GRAU
## GRAU EN QUÍMICA

**TUTOR/A ACADÈMIC/A:** LUCHERELLI Matteo Andrea

**TUTOR/A ACADÈMIC/A (si escau):** Gonzalo Abellán

**TUTOR/A EXTERN/A (si escau):**

**TÍTOL**

Síntesis de nanomateriales basado en bismuto para aplicaciones biomédicas

**OBJECTIUS**

Este TFG se centrará en el desarrollo de nanomateriales basados en bismuto mediante un enfoque de síntesis coloidal. Se prestará especial atención a la introducción de moléculas orgánicas con grupos funcionales para su posterior modificación química. El estudiante aprenderá sobre la síntesis de nanopartículas y su caracterización a través de diferentes técnicas microscópicas, espectroscópicas y analíticas.

**METODOLOGIA**

El trabajo se realizará en los laboratorios del grupo 2D Chem, en el Instituto de Ciencia Molecular (ICMol).
El trabajo se compondrá de dos tareas principales: 1) síntesis coloidal y 2) caracterización de nanomateriales.
El estudiante desarrollará conocimientos en química orgánica, síntesis de nanomateriales y caracterización de materiales, como TEM, XPS, Raman, XRD, FT-IR, UV-VIS, fluorimetría, entre otros.

UNIVESITAT DE VALÈNCIA · DEPARTAMENT DE QUÍMICA INORGÀNICA

(segell del Departament)

VNIVERSITAT DE VALÈNCIA Facultat de Química

# TRABAJO FINAL DE GRADO
# GRADO EN QUÍMICA

**TUTOR/A ACADÉMICO/A:** Carlos Giménez Saiz

**TUTOR/A ACADÉMICO/A (si procede):**

**TUTOR/A EXTERNO/A (si procede):**

**Departamento:** Química Inorgánica

**TÍTULO**

Síntesis y caracterización de polioxometalatos con Pb(II) fotoluminiscentes

**OBJETIVOS**

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

**METODOLOGÍA**

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 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.

UNIVESITAT DE VALÈNCIA · DEPARTAMENT DE QUIMICA INORGÀNICA

(Sello del Departamento)

VNIVERSITAT DE VALÈNCIA Facultat de Química

# TEMA TREBALL FI DE GRAU
# GRAU EN QUÍMICA

**TUTOR/A ACADÈMIC/A:** Teresa Ripollés Sanchis, Jamal El Haskouri

**TUTOR/A ACADÈMIC/A (si escau):**

**TUTOR/A EXTERN/A (si escau):**

**TÍTOL**

Perovskitas procesadas con solventes verdes

**OBJECTIUS**

Células solares de perovskita de alto rendimiento con bajo coste y fabricación con disolventes verde son muy deseados, pero están limitados por la dificultad del control de la morfología y sus mecanismos.
Para abordar este problema, aquí estudiaremos el efecto de los anti-solventes y disolventes verdes en la formación de la película de perovskita.

**METODOLOGIA**

(i) Selección de disolventes polares apróticos verdes para disolver los precursores de la perovskita.

(ii) Selección de los anti-disolventes orgánicos verdes capaces de sintetizar perovskitas optimizadas.

(iii) Preparación de capas de perovskitas con la selección de (i) y (ii) mediante el spin-coater.

(iv) Caracterización completa de las películas optimizadas por diferentes técnicas avanzadas: SEM, difracción de rayos X, espectroscopía UV-Vis, fotoluminiscencia.

UNIVERSITAT DE VALÈNCIA DEPARTAMENT DE QUÍMICA INORGÀNICA

(segell del Departament)

VNIVERSITAT DE VALÈNCIA Facultat de Química

## TEMA TREBALL FI DE GRAU
## GRAU EN QUÍMICA

**TUTOR/A ACADÈMIC/A:** Rafael Abargues López, Teresa Ripollés Sanchis

**TUTOR/A ACADÈMIC/A (si escau):**

**TUTOR/A EXTERN/A (si escau):**

**TÍTOL**

Síntesis de monocapas autoensambladas que actúan como contactos selectivos de huecos en dispositivos optoelectrónicos

**OBJECTIUS**

Los materiales más utilizados como capa conductora de huecos, ej PTAA, y PEDOT:PSS, en dispositivos fotovoltaicos son poco estables en el medio ambiente y además, son caros. Por ello, surge una nueva familia de materiales llamados 'monocapas autoensambladas' adecuada para ser contacto que transporta huecos en dispositivos fotovoltaicos. Este TFG se centrará en la síntesis y caracterización del MeO-2PACz y sus derivados.

**METODOLOGIA**

La metodología de este TFG será la síntesis del MeO-2PACz mediante dos métodos diferentes, revestimiento por inmersión (dip-coating) o por rotación (spin-coating). Veremos qué comportamiento tiene la perovskita de haluro de plomo depositada en la superficie de la lámina transportadora de huecos MeO-2PACz.
Entre las tareas que el/la estudiante deberá de realizar son: i) decidir qué método de síntesis es más idóneo, ii) concentración óptima, iii) tratamiento térmico adecuado, iv) estabilidad de la capa con y sin perovskita, v) caracterizar la parte óptica, electrónica, morfológica y estructural.

UNIVESITAT DE VALÈNCIA · DEPARTAMENT DE QUÍMICA INORGÀNICA ·

(segell del Departament)

VNIVERSITAT DE VALÈNCIA Facultat de Química

# TEMA TREBALL FI DE GRAU
# GRAU EN QUÍMICA

**TUTOR/A ACADÈMIC/A:** Rafael Abargues López, Teresa Ripollés Sanchis

**TUTOR/A ACADÈMIC/A (si escau):**

**TUTOR/A EXTERN/A (si escau):**

**TÍTOL**

Síntesis de nanocristales de perovskita 0D para dispositivos optoelectrónicos

**OBJECTIUS**

Las perovskitas 0D se presentan con aniones octaédricos de haluro metálico aislados rodeados de cationes orgánicos o inorgánicos, donde los excitones están fuertemente confinados a cada octaedro. El principal objetivo de este TFG es la síntesis y caracterización de la perovskita compuesta por TEA4SnBr6 en el interior de matrices metalorgánicas como estrategia para formar una estructura 0D.

**METODOLOGIA**

Este trabajo de TFG se llevará a cabo dentro de una caja seca con condiciones atmosféricas controladas. La síntesis de la perovskita TEA4SnBr6 se realizará en disolución dentro de una matriz metalorgánica. La optimización de la síntesis tendrá en cuenta diversos factores, entre ellos, el porcentaje de TEA óptimo para conseguir una estructura 0D.
Para comprobar su estabilidad, se realizará un estudio en diferentes concentraciones de humedad para ver el efecto de ésta sobre la óptica, electrónica y morfología de la perovskita sintetizada.

UNIVESITAT DE VALÈNCIA · DEPARTAMENT DE QUÍMICA INORGÀNICA

(segell del Departament)

VNIVERSITAT DE VALÈNCIA Facultat de Química

# TEMA TREBALL FI DE GRAU
# GRAU EN QUÍMICA

**TUTOR/A ACADÈMIC/A:** Rafael Abargues López, Teresa Ripolles Sanchis

**TUTOR/A ACADÈMIC/A (si escau):**

**TUTOR/A EXTERN/A (si escau):**

**TÍTOL**

Síntesis in-situ de nanocomposites luminiscentes de perovskitas en matrices para dispositivos optoelectronicos de alta eficiencia

**OBJECTIUS**

Las perovskitas de haluros metálicos han emergido como uno de los materiales semiconductores con mayor proyección debido a sus excelentes propiedades optoelectrónicas sin precedentes. Ello ha permitido que este tipo de material pueda ser empleado para la fabricación de dispositivo fotovoltaicos, LEDs, fotodetectores y sensores ópticos. El objetivo de este TFG es sintetizar nanocristales de perovskitas en el interior de matrices metalorganicas y de oxidos metálicos para la formacion de capas altamente luminiscentes para la fabricación de dispositivos optolelectronicos tipo LED.

**METODOLOGIA**

La metodología a aplicar consiste en la formulacion de disoluciones precursoras para la sintesis in situ de nanocristales de perovskitas de haluro de plomo en el interior de diferentes matrices metaloorgánicas y óxidos metalicos mediante un proceso desarrollado y patentado por nuestro grupo de investigación.
Las tareas a realizar serán la formulación en disolventes y deposición de precursores mediante spin-coating y otras técnicas. Los disolventes a utilizar deben de ser compatibles químicamente con las perovskitas. Se realizará también la optimización del proceso de deposición y curado mediante técnicas de caracterización óptica (espectroscopía UV-Vis y fotoluminiscencia), morfológica (microscopía electronica) y estructural (difracción de rayos X).
Finalmente se estudiarán sus propiedades conversoras de la luz (rendimiento cuántico de emisión) para evaluar su eficacia y estabilidad.

(segell del Departament)

VNIVERSITAT DE VALÈNCIA Facultat de Química

# TRABAJO FINAL DE GRADO
# GRADO EN QUÍMICA

**TUTOR/A ACADÉMICO/A:** Antonio L. Ribera Hermano

**TUTOR/A ACADÉMICO/A (si procede):**

**TUTOR/A EXTERNO/A (si procede):**

**Departamento:** QUÍMICA INORGÁNICA

**TÍTULO**

Diseño, síntesis y caracterización de heteroestructuras basadas en sistemas laminares para generar catalizadores activos en fotorreducción de dióxido de carbono.

**OBJETIVOS**

Diseño, síntesis y caracterización de heteroestructuras a partir de sistemas laminares como hidróxidos dobles laminares y grafeno, con propiedades fotocatalíticas en reducción de CO2. Los catalizadores sintetizados se caracterizarán mediante las técnicas habituales para este tipo de materiales (PDRX, análisis elemental y SEM) así como técnicas más específicas (espectroscopía UV-Vis, TEM, difracción de electrones, electroquímica, XPS…).

**METODOLOGÍA**

Diseñar. En primer lugar, se establecerán las propiedades requeridas por los catalizadores que intervienen en la reducción fotocatalizada de CO2 y se llevará a cabo un estudio para diseñar los precursores (sistemas LDH y materiales tipo grafeno) que puedan dotarse de estas propiedades. Síntesis. Se prepararán los sistemas LDH precursores en los que coexistan metales de transición en proporciones variables, utilizando dos métodos: i) método de precipitación homogénea con urea como generador de pH básico; ii) método solvotermal con DMF para evitar el apilamiento de capas. En ambos casos, si fuera necesario, se llevará a cabo posteriormente un proceso de delaminación los sistemas LDH precursores. Paralelamente, se prepararán los materiales tipo grafeno, por delaminación de grafito. Caracterización. Los precursores (sistemas LDHs y materiales tipo grafeno) así como las heteroestructuras generadas 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 una exhaustiva caracterización electroquímica.

(Sello del Departamento)

VNIVERSITAT DE VALÈNCIA Facultat de Química

# TRABAJO FINAL DE GRADO
# GRADO EN QUÍMICA

**TUTOR/A ACADÉMICO/A:** Antonio L. Ribera Hermano

**TUTOR/A ACADÉMICO/A (si procede):**

**TUTOR/A EXTERNO/A (si procede):**

**Departamento:** QUÍMICA INORGÁNICA

**TÍTULO**

Diseño, síntesis y caracterización de fotocatalizadores para "energy conversion reactions" basados en Hidróxidos Dobles Laminares (LDHs).

**OBJETIVOS**

Diseño, síntesis y caracterización de hidróxidos dobles laminares con metales de transición activos en fotocatálisis para reacciones como reducción de CO2, water splitting y fijación de nitrógeno. Los catalizadores sintetizados se caracterizarán mediante las técnicas habituales para este tipo de materiales (PDRX, análisis elemental y SEM) así como técnicas más específicas (espectroscopía UV-Vis, TEM, difracción de electrones, electroquímica, XPS...).

**METODOLOGÍA**

Diseñar. En primer lugar, se establecerán las propiedades requeridas por los catalizadores que intervienen en "energy conversion reactions" fotocatalizadas 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 coprecipitación a pH constante; ii) método de precipitación homogénea con urea como generador de pH básico; iii) método solvotermal con DMF para evitar el apilamiento de capas; 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 sistemas LDH preparados 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 una exhaustiva caracterización electroquímica para el estudio de los centros activos.

(Sello del Departamento)

VNIVERSITAT DE VALÈNCIA Facultat de Química

# TRABAJO FINAL DE GRADO
## GRADO EN QUÍMICA

**TUTOR/A ACADÉMICO/A:** Francisco Manuel Romero Martínez

**TUTOR/A ACADÉMICO/A (si procede):**

**TUTOR/A EXTERNO/A (si procede):**

**Departamento:** Química Inorgánica

**TÍTULO**

Redes covalentes porosas para el almacenamiento y detección de hidrógeno

**OBJETIVOS**

Síntesis, caracterización estructural y estudio de las propiedades ópticas de redes metalo-orgánicas ensambladas mediante enlaces de dihidrógeno.
Los enlaces de dihidrógeno son una manera elegante de almacenar hidrógeno gas en sólidos moleculares. Al calentar estos sólidos, los centros H– y H+ pueden reaccionar para liberar el gas. El proceso inverso, llamado hidrogenólisis, también es posible. Nuestro objetivo será asociar esos eventos de captación y liberación de hidrógeno a sondas ópticas y/o magnéticas que nos "informen" de esos fenómenos.

**METODOLOGÍA**

1) Síntesis de ligandos de tipo pirazolilborato mediante procedimientos descritos en la literatura. Caracterización de los ligandos por técnicas de RMN.
2) Síntesis de complejos de Fe(II) a transición de espín con estos ligandos.
3) Construcción de redes metalo-orgánicas mediante cocristalización con dadores de enlace dihidrógeno.
4) Estudios de la absorción y liberación reversible de hidrógeno.
5) Estudio de las propiedades ópticas y magnéticas de estas redes metalo-orgánicas.

UNIVERSITAT DE VALÈNCIA · DEPARTAMENT DE QUÍMICA INORGÀNICA

(Sello del Departamento)