



Ficha de Trabajo Fin de Grado

DEPARTAMENTO:	Química Inorgánica		
TÍTULO:	Nuevas tendencias, estrategias y oportunidades en materiales termoeléctricos		
TITLE:	New trends, approaches and opportunities in thermoelectric materials		
SUPERVISOR/ES:	Jesús Prado Gonjal		
NÚMERO DE PLAZAS:	1		
TIPO DE TFG	Experimental ☐	Bibliográfico ☒	Simulación ☐
ASIGNACIÓN DE TFG:	Selección directa ☐	Selección por expediente ☒	

OBJETIVOS:

- Estudio de materiales termoeléctricos para aprovechamiento de calor residual.
- Optimización de las propiedades termoeléctricas de los materiales estudiados por distintas aproximaciones (nanoestructuración, PGEC, ...).
- Evaluación de los materiales propuestos para su posible implementación en módulos termoeléctricos.
- Búsqueda de aplicaciones novedosas de dispositivos termoeléctricos.

METODOLOGÍA:

- Búsqueda, organización y análisis de datos publicados en trabajos de investigación.

BIBLIOGRAFÍA:

1. Snyder, G. J., & Toberer, E. S. (2008). Complex thermoelectric materials. *Nature Materials*, 7(2), 105
2. Freer, R., & Powell, A. V. (2020). Realising the potential of thermoelectric technology: a Roadmap. *Journal of Materials Chemistry C*, 8(2), 441-463.
3. Yang, L., Chen, Z. G., Dargusch, M. S., & Zou, J. (2018). High performance thermoelectric materials: progress and their applications. *Advanced Energy Materials*, 8(6), 1701797.



GRADO EN INGENIERÍA DE MATERIALES curso 2020-21

Ficha de Trabajo Fin de Grado

DEPARTAMENTO:	Química Inorgánica		
TÍTULO:	Difracción de electrones en subóxidos de metales de transición		
TITLE:	Electron diffraction in transition metal suboxides		
SUPERVISOR/ES:	Elizabeth Castillo Martínez Miguel Angel Alario y Franco		
NÚMERO DE PLAZAS:	1		
TIPO DE TFG	Experimental ☐	Bibliográfico X	Simulación X
ASIGNACIÓN DE TFG:	Selección directa ☐	Selección por expediente x	

OBJETIVOS:

- Realizar una búsqueda bibliográfica de las publicaciones acerca de las estructura y microestructura de subóxidos de metales de transición.
- Simulación de la difracción de electrones en determinadas estructuras cristalinas de subóxidos de metales de transición y compararlas con las experimentales para establecer la microestructura real.

METODOLOGÍA:

Se realizará una búsqueda bibliográfica de las estructuras conocidas para subóxidos de metales de transición (en particular de Ti, V y Fe). El estudiante se familiarizará con la búsqueda de artículos en revistas científicas y en buscadores tipo Web of Science o Scopus. Así mismo aprenderá la interpretación de la difracción de electrones en estructuras cristalinas y la deducción de grupos espaciales a partir de las condiciones de extinción. El estudiante simulará la difracción de electrones de las estructuras propuestas con software como SingleCrystal de CrystalMaker® y deducirá la estructura experimental a partir de la comparación de los diagramas de difracción de electrones simulados con los experimentales, ya disponibles. Si hubiera tiempo el estudiante establecerá y representará las Funciones de Localización Electrónica ELF de las estructuras propuestas.

BIBLIOGRAFÍA:

(1)X. Zhong, M. Xu, L. Yang, M. Zhang, H. Liu, Y. Ma "Predicting the structure and stability of titanium oxide electriles" npj Computational Materials 70 (2018).

(2) <https://www.mccormick.northwestern.edu/materials-science/crystalmaker/>



GRADO EN INGENIERÍA DE MATERIALES curso 2020-21

Ficha de Trabajo Fin de Grado

DEPARTAMENTO:	QUÍMICA INORGÁNICA		
TÍTULO:	OPTIMIZACIÓN DE ELECTROLITOS SÓLIDOS DE Li PARA BATERÍAS EN ESTADO SÓLIDO		
TITLE:	OPTIMIZATION OF Li SOLID ELECTROLYTES FOR ALL SOLID STATE BATTERIES		
SUPERVISOR/ES:	ESTER GARCÍA GONZÁLEZ / SUSANA GARCÍA MARTÍN		
NÚMERO DE PLAZAS:	1		
TIPO DE TFG	Experimental ☐	Bibliográfico ☒	Simulación ☒
ASIGNACIÓN DE TFG:	Selección directa ☒	Selección por expediente ☐	

OBJETIVOS:

Tomando como punto de partida un material conductor iónico de Li reportado en la literatura con buenas propiedades como electrolito sólido, se propondrá una posible modificación en la composición química con objeto de aumentar la ventana electroquímica del material manteniendo una alta conductividad iónica y se simulará el efecto de esa modificación en la estructura cristalina (difracción de RX y de electrones) y en las propiedades eléctricas (diagramas de impedancia compleja).

Los objetivos concretos son:

- Conocer el estado actual de los tipos de materiales que son competitivos para actuar como electrolitos sólidos de Li
- Comprender la interrelación existente entre la estructura cristalina, la composición química y las propiedades funcionales de un material conductor iónico.

METODOLOGÍA:

El trabajo comenzará con una revisión bibliográfica detallada, que permita al estudiante tener una idea clara y concreta de las propiedades físicas y químicas que debe reunir un material para ser considerado un electrolito sólido y de qué tipo de materiales se contemplan actualmente como los más adecuados para actuar como electrolitos en baterías de estado sólido de Li. Se va a seleccionar un material como punto de partida y a partir de aquí se proponen posibles modificaciones en la composición química, y seleccionando una de ellas se utilizarán programas de simulación para obtener los difractogramas de rayos X y de electrones correspondientes, así como los diagramas de impedancia compleja.

BIBLIOGRAFÍA:

“Review on solid electrolytes for all-solid-state lithium-ion batteries” F. Zhenga, M. Kotobukia, S. Songa, Man On Laia, L. Lu, Journal of Power Sources 389 (2018) 198–213.

“Fundamentals of inorganic solid-state electrolytes for batteries” T. Famprikis, P. Canepa, J. A. Dawson, M. Saiful Islam and C. Masquelier, Nature Materials 18, 2019, 1278–1291.



GRADO EN INGENIERÍA DE MATERIALES curso 2020-21

Ficha de Trabajo Fin de Grado

DEPARTAMENTO:	QUÍMICA INORGÁNICA		
TÍTULO:	PREPARACIÓN Y ESTUDIO DE ESTRUCTURAS CORE-SHELL		
TITLE:	PREPARATION AND STUDY OF CORE-SHELL STRUCTURES		
SUPERVISOR/ES:	JOSEFA ISASI MARÍN		
NÚMERO DE PLAZAS:	1		
TIPO DE TFG	Teórico- Experimental ☒	Bibliográfico ☐	Simulación ☐
ASIGNACIÓN DE TFG:	Selección directa ☒	Selección por expediente ☐	

OBJETIVOS:

1. Preparación de muestras de núcleos magnéticos con pequeño tamaño de partícula.
2. Caracterización de las muestras sintetizadas.
3. Ensayos de recubrimiento y funcionalización de las muestras magnéticas que hayan resultado ser las óptimas.

METODOLOGÍA:

Tras una amplia revisión bibliográfica sobre el tema, se procederá a realizar las síntesis pertinentes. Las muestras sintetizadas se caracterizarán por difracción de rayos X y espectroscopía infrarroja. A continuación, se llevarán a cabo varios ensayos de recubrimiento y funcionalización, pasando a caracterizar las muestras obtenidas por espectroscopía infrarroja y, si fuera posible, también por microscopia electrónica de transmisión.

BIBLIOGRAFÍA:

- [3] A. Ali, H. Zafar, M. Zia, I. ul Haq, A. R. Phull, J. S. Ali, A. Hussain. *"Synthesis, characterization, applications, and challenges of iron oxide nanoparticles"* Nanotechnology Sci Appl. (2016) 1-26.
- [4] W. Wu, Z. Wu, T. Yu, C Jiang. W. -S. Kim. *"Recent progress on magnetic iron oxide nanoparticles: synthesis, surface functional strategies and biomedical applications"*. Science and Technology of Advanced Materials 16 (2) (2015) 1-229.



Ficha de Trabajo Fin de Grado

DEPARTAMENTO:	QUÍMICA INORGÁNICA		
TÍTULO:	ÓXIDOS DE METALES DE TRANSICIÓN PARA LA PRODUCCIÓN DE HIDRÓGENO A PARTIR DE AGUA		
TITLE:	TRANSITION METAL OXIDES APPLIED TO WATER SPLITTING FOR HYDROGEN PRODUCTION		
SUPERVISOR/ES:	ELENA ARROYO DE DOMPABLO / KHALID BOULAHYA		
NÚMERO DE PLAZAS:	1		
TIPO DE TFG	Experimental ☐	Bibliográfico ☒	Simulación ☒
ASIGNACIÓN DE TFG:	Selección directa ☐	Selección por expediente ☒	

OBJETIVOS:

En este trabajo se investigarán materiales para la producción de hidrógeno a partir de la disociación del agua, mediante **fotocatalizadores y/o ciclos termoquímicos**. Las **perovskitas** ABO_3 (donde B hace referencia al metal de transición) han sido propuestas como materiales prometedores para estas aplicaciones. Gracias a su capacidad para admitir sustituciones parciales de A y B por otros cationes de diferente tamaño y carga, se pueden modificar las **propiedades de interés**: band-gap, ventana de estabilidad electroquímica, temperaturas de operación en ciclos termoquímicos, estabilidad térmica ...

Los objetivos de este proyecto son :

- 1) Revisión del estado del arte de materiales para estas aplicaciones
- 2) Introducción a **técnicas de cálculo avanzado** que permitan anticipar las propiedades de los materiales a partir de su composición y estructura.

METODOLOGÍA:

El proyecto se iniciará con una revisión bibliográfica exhaustiva, que permitirá seleccionar materiales ABO_3 de **interés formativo**. Se utilizará el cálculo computacional basado en la **Teoría del Funcional de la Densidad** (DFT en la literatura inglesa) para estudiar propiedades relevantes (band gap, ventana electroquímica, energías de formación de vacantes óxido, reversibilidad...). El estudio estructural de los materiales se abordará combinando DFT con software de simulación de difractogramas.

BIBLIOGRAFÍA:

High-Throughput Computational Screening of Perovskites for Thermochemical Water Splitting Applications, Emery et al, Chem. Mater. 28, 2016