

Identificación del proyecto

Nombre del proyecto

Explorando fronteras en la química de polioxometalatos y en las propiedades de nanoformas de carbono. Conceptos básicos y aplicaciones con alto valor añadido. POMCARVAL.

Expediente numero

CTQ2017-87269-P

Descripción del proyecto

El proyecto es en parte continuación de proyectos anteriores relacionados con la química de polioxometalatos y las propiedades químico-físicas de nanoestructuras de carbono. El proyecto aprovecha el carácter interdisciplinar del grupo, formado por especialistas en áreas diferentes de la química computacional, para poder abordar sistemas de elevada complejidad, y poder así acercarnos a las fronteras del conocimiento actual en estos campos. El proyecto se ha dividido en dos grandes bloques y está conformado por un total de once tareas.

Un primer bloque se dedica al estudio de compuestos de carbono y en concreto al confinamiento de iones y clústeres de metales de transición dentro de cajas de carbono, también conocidos como fullerenos. Entre otros temas, se desea profundizar en los mecanismos de formación de fullerenos y en la comprensión de nuevos sistemas sintetizados recientemente. En contraste con los lantánidos, la química de los actínidos confinados en cavidades ofrece nuevas posibilidades, como es por ejemplo la formación de enlaces U-U o Th-Th, interacciones nunca caracterizadas anteriormente. Aprovechando los últimos avances en la caracterización por "single-molecule atomic-resolution real-time TEM imaging (SMART-TEM)" sobre la reactividad de fullerenos confinados en el interior de nanotubos, se intentará evaluar los factores fundamentales que inciden en esta reactividad.

Finalmente, uno de los aspectos más ambiciosos en esta área se centra en la caracterización de la transferencia de carga en díadas en las que participa un fullereno endoédrico como aceptor, combinando técnicas experimentales y teóricas de alto nivel. También se estudiarán propiedades químico físicas de sistemas basados en interacciones supramoleculares y que tienen interés en medicina y en tecnología.

Un segundo bloque de investigación se centra en analizar la estructura y reactividad de óxidos moleculares también conocidos como polioxometalatos. Además de progresar en la caracterización y comprensión de polioxometalatos reducidos y superreducidos, se profundizará en las reacciones de transferencia electrónica, fundamentales en procesos como son la oxidación de agua y la formación de H₂. Un aspecto fundamental desde un punto de vista teórico es el cálculo de pKa. En general, todavía es difícil obtener predicciones precisas, especialmente para sistemas aniónicos tales como los polioxometalatos. El progreso en este punto junto con la determinación teórica de potenciales de oxi-reducción en función del pH de la solución serán aspectos fundamentales en los que se deberá progresar en los próximos tres años. Todas estas cuestiones se enmarcan en el estudio de reacciones catalíticas o de procesos de interés para la producción y almacenamiento de energía mucho más respetuosos con el medio ambiente.

Además, seguiremos avanzando en la comprensión de la formación de óxidos moleculares de metales de transición, en la que algunos cationes juegan un papel importante, y además intervienen "building blocks" característicos para los que es necesario tener un conocimiento explícito de su estructura y estabilidad.

Financiación

Entidad financiadora

Ministerio de Ciencia e Innovación (MICINN), Agencia Estatal de Investigación (AEI) y Fondo Europeo de Desarrollo Regional (FEDER)

Importe

136.730,00 €



Unión Europea

Fondo Europeo de Desarrollo regional

"Una manera de hacer Europa"

Este proyecto está cofinanciado por el Fondo Europeo de Desarrollo Regional (FEDER). "Una manera de hacer Europa"