

## Identificación del proyecto

### Nombre del proyecto

Nuevos Horizontes en la Química de los Polioxometalatos y las Nanoformas de Carbono:  
Modelización de Propiedades Fundamentales y Aplicaciones Tecnológicas

### Expediente numero

PID2020-112762GB-I00



## Descripción del proyecto

El proyecto es en parte continuación de proyectos anteriores relacionados con las propiedades fundamentales de polioxometalatos y nanoestructuras de carbono, así como con algunas de sus aplicaciones tecnológicas. La amplia experiencia y el carácter interdisciplinario del grupo de investigación, formado por especialistas en diferentes áreas de la química computacional, hace posible abordar el estudio de sistemas de elevada complejidad como los propuestos en este proyecto y poder así acercarnos a las fronteras del conocimiento actual en estos campos. El proyecto está dividido en tres grandes bloques y consta de diez tareas.

El primer bloque se dedica a la caracterización de la estructura y las propiedades físicas de nuevos compuestos de carbono, principalmente la nueva familia de los actinido-fullerenos endoédricos, i.e. fullerenos que contienen átomos de actínidos como Th o U, dímeros de actínido-lantánido o clústeres de los tipos U<sub>2</sub>N, U<sub>2</sub>O o U<sub>2</sub>C. Concretamente, estudiaremos la formación del enlace en los dímeros An-Ln confinados en el reducido espacio interior del fullereno, así como las nuevas propiedades magnéticas de estos interesantes compuestos que contienen un elevado número de electrones desapareados localizados en el dímero confinado. También se profundizará en la comprensión de nuevos sistemas sintetizados recientemente. Mejorar la funcionalización de los metalofullerenos endoédricos es fundamental para potenciar sus posibles aplicaciones. Con este objetivo trataremos de analizar los diferentes factores que afectan a la reactividad de los actinido-fullerenos, que se ha visto recientemente que son más reactivos que sus análogos lantanidofullerenos.

Finalmente, se estudiará la formación y crecimiento de metalofullerenos dopados con boro, con nuevas e interesantes propiedades.

El segundo bloque se dedica a la modelización y comprensión de los polioxometalatos (POMs) en solución y como constituyentes de materiales. Intentaremos avanzar en la modelización de soluciones iónicas acuosas y no-acuosas procurando introducir el efecto del tamaño del catión y de la fuerza iónica en el tratamiento computacional del solvente, poniendo énfasis en el caso de las soluciones noacuosas.

Por otro lado, abordaremos el estudio de POMs funcionales para ser usados en dispositivos o en materiales 3D como el polioxovanadato de Lindqvist depositado en una superficie de oro o MOFs basados en polioxopaladatos con posibles aplicaciones en computación cuántica.

El último bloque se dedica a la modelización electrocatalítica y fotocatalítica de procesos de alto valor añadido. Más concretamente, planeamos explorar procesos de transferencia electrónica con activación electroquímica. De esta manera, analizaremos la capacidad de los POMs que contienen Fe como catalizadores en la oxidación de agua, la reducción de dióxido de carbono y la oxidación reversa de monóxido de carbono usando POMs substituidos con metales de transición, así como la generación de hidrógeno en medio ácido electrocatalizada por metalofullerenos endoédricos. Además, intentaremos racionalizar, en base a la teoría de Marcus, los procesos de transferencia electrónica (dador-aceptor) fotoactivados en una serie de POMs decorados con antenas de luz.

## Financiación

### Entidad financiadora

Proyecto PID2020-112762GB-I00 financiado por MCIN/ AEI /10.13039/501100011033

### Importe

139.150,00 €