



# GRADO EN INGENIERÍA DE MATERIALES

Curso 2021-22

## Ficha de Trabajo Fin de Grado

<b>DEPARTAMENTO:</b>	Química Inorgánica		
<b>TÍTULO:</b>	Difracción de electrones en subóxidos de metales de transición		
<b>TITLE:</b>	Electron diffraction in transition metal suboxides		
<b>SUPERVISOR/ES:</b>	Elizabeth Castillo Martínez Miguel Angel Alario y Franco		
<b>E-MAIL SUPERVISOR/ES</b>	<a href="mailto:ecastill@ucm.es">ecastill@ucm.es</a> <a href="mailto:maaf@ucm.es">maaf@ucm.es</a>		
<b>NÚMERO DE PLAZAS:</b>	1		
<b>TIPO DE TFG:</b>	Experimental <input type="checkbox"/>	Bibliográfico X	Simulación X
<b>ASIGNACIÓN DE TFG:</b>	Selección directa <input type="checkbox"/>	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 comparación con las experimentales.
- Análisis de espectros de pérdida de electrones (EELS) de los mismos subóxidos.

### METODOLOGÍA:

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 analizará los estados de oxidación del metal en 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 electrides” npj Computational Materials 70 (2018).
- (2) <https://www.mccormick.northwestern.edu/materials-science/crystalmaker/>



# GRADO EN INGENIERÍA DE MATERIALES

Curso 2021-22

## Ficha de Trabajo Fin de Grado

<b>DEPARTAMENTO:</b>	Química Inorgánica		
<b>TÍTULO:</b>	Compatibilidad de materiales electrodo con distintos electrolitos en baterías de ion litio.		
<b>TITLE:</b>	Compatibility of electrode materials with different electrolytes in lithium-ion batteries.		
<b>SUPERVISOR/ES:</b>	M <sup>ª</sup> Luisa López García e Inmaculada Álvarez Serrano		
<b>E-MAIL SUPERVISOR/ES</b>	<a href="mailto:marisal@ucm.es">marisal@ucm.es</a> , <a href="mailto:ias@ucm.es">ias@ucm.es</a>		
<b>NÚMERO DE PLAZAS:</b>	1		
<b>TIPO DE TFG:</b>	Experimental <input checked="" type="checkbox"/>	Bibliográfico <input type="checkbox"/>	Simulación <input type="checkbox"/>
<b>ASIGNACIÓN DE TFG:</b>	Selección directa <input type="checkbox"/>	Selección por expediente <input checked="" type="checkbox"/>	

### OBJETIVOS:

Se abordará la caracterización estructural, microestructural y electroquímica de materiales de electrodo (ánodos, cátodos) para baterías de ion litio y se evaluará su compatibilidad con distintos electrolitos con objeto de optimizar la eficiencia electroquímica del dispositivo.

### METODOLOGÍA:

Los materiales de electrodo se caracterizarán mediante difracción de rayos X (DRX) y microscopía electrónica (EM). Se construirán baterías de dichos materiales con distintos electrolitos y se realizará la caracterización electroquímica de las mismas mediante ciclos galvanostáticos.

### BIBLIOGRAFÍA:

- Xu, K. (2014). Electrolytes and interphases in Li-ion batteries and beyond. *Chemical reviews*, 114(23), 11503-11618.
- Álvarez-Serrano, I., Arillo, M. Á., López, M. L., Martín, P., & Marín, C. P. (2010). Bases y aplicaciones de dispositivos energéticos electroquímicos. *Anales de la Real Sociedad Española de Química* (No. 2, pp. 121-128). Real Sociedad Española de Química.



# GRADO EN INGENIERÍA DE MATERIALES

Curso 2021-22

## Ficha de Trabajo Fin de Grado

<b>DEPARTAMENTO:</b>	Química Inorgánica		
<b>TÍTULO:</b>	Síntesis y estudio de muestras que muestran superparamagnetismo.		
<b>TITLE:</b>	Synthesis and study of samples showing superparamagnetism.		
<b>SUPERVISOR/ES:</b>	Josefa Isasi Marín		
<b>E-MAIL SUPERVISOR/ES</b>	isasi@ucm.es		
<b>NÚMERO DE PLAZAS:</b>	1		
<b>TIPO DE TFG:</b>	Experimental <input checked="" type="checkbox"/>	Bibliográfico <input type="checkbox"/>	Simulación <input type="checkbox"/>
<b>ASIGNACIÓN DE TFG:</b>	Selección directa <input checked="" type="checkbox"/>	Selección por expediente <input type="checkbox"/>	

### OBJETIVOS:

Preparar muestras de óxido de hierro y de ferritas de níquel, caracterizarlas estructuralmente y estudiar su comportamiento magnético

### METODOLOGÍA:

Se sintetizarán muestras magnéticas nanoparticuladas que serán caracterizadas por difracción de rayos X, espectroscopía infrarroja y medidas magnéticas.

### BIBLIOGRAFÍA:

Arévalo-Cid, P., Isasi, J., Alcolea Palafox, M., F. Martín-Hernández, F. (2020). Comparative structural, morphological and magnetic study of  $MFe_2O_4$  nanopowders prepared by different synthesis routes. *Materials Research Bulletin*. 123, 110726.

P. Arévalo, J. Isasi, A. Caballero, F. Martín. R. G. Effects of shell-thickness on the powder morphology, magnetic behavior and stability of the chitosan-coated  $Fe_3O_4$  nanoparticles. Efecto del espesor del recubrimiento en la morfología del polvo, el comportamiento magnético y la estabilidad de nanopartículas de  $Fe_3O_4$  recubiertas con quitosano. *Boletín de la Sociedad Española de Cerámica y Vidrio*. Available online 2011



# GRADO EN INGENIERÍA DE MATERIALES

Curso 2021-22

## Ficha de Trabajo Fin de Grado

<b>DEPARTAMENTO:</b>	Química inorgánica		
<b>TÍTULO:</b>	Materiales termoeléctricos: convirtiendo calor residual en electricidad		
<b>TITLE:</b>	Thermoelectric materials: converting waste heat into electricity		
<b>SUPERVISOR/ES:</b>	Jesús Prado Gonjal		
<b>E-MAIL SUPERVISOR/ES</b>	jpradogo@ucm.es		
<b>NÚMERO DE PLAZAS:</b>	1		
<b>TIPO DE TFG:</b>	Experimental <input type="checkbox"/>	Bibliográfico <input checked="" type="checkbox"/>	Simulación <input type="checkbox"/>
<b>ASIGNACIÓN DE TFG:</b>	Selección directa <input type="checkbox"/>	Selección por expediente <input checked="" type="checkbox"/>	

### OBJETIVOS:

- Estudio del estado del arte de materiales termoeléctricos para aprovechamiento de calor residual.
- Búsqueda de estrategias de 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 2021-22

## Ficha de Trabajo Fin de Grado

<b>DEPARTAMENTO:</b>	Química Inorgánica		
<b>TÍTULO:</b>	Nanocápsulas moleculares: obtención, estudio y aplicaciones		
<b>TITLE:</b>	Molecular nanocapsules: preparation, study and applications		
<b>SUPERVISOR/ES:</b>	Cristián Cuerva de Alaíz / María del Carmen Torralba Martínez		
<b>E-MAIL SUPERVISOR/ES</b>	<a href="mailto:c.cuerva@ucm.es">c.cuerva@ucm.es</a> / <a href="mailto:torralba@ucm.es">torralba@ucm.es</a>		
<b>NÚMERO DE PLAZAS:</b>	1		
<b>TIPO DE TFG:</b>	Experimental <input checked="" type="checkbox"/>	Bibliográfico <input checked="" type="checkbox"/>	Simulación <input type="checkbox"/>
<b>ASIGNACIÓN DE TFG:</b>	Selección directa <input type="checkbox"/>	Selección por expediente <input checked="" type="checkbox"/>	

### OBJETIVOS:

Obtención de micro y nanocápsulas aprovechando el comportamiento de autoensamblado molecular de ciertos compuestos de coordinación de Pd(II) y/o Pt(II)

### METODOLOGÍA:

- Se llevará a cabo una revisión bibliográfica de los métodos de síntesis más adecuados para la obtención de nanocristales micelares.
- Se obtendrán compuestos de Pd(II) y/o Pt(II) con cadenas alifáticas extensas y alta capacidad de autoensamblarse.
- Se prepararán nanocristales huecos (nanocápsulas) utilizando microemulsiones como nanoreactores para potenciales aplicaciones como el transporte de fármacos o bioimagen.
- Se analizará el efecto del método de síntesis en el tamaño de las partículas, se evaluará su estabilidad coloidal y su repercusión sobre las propiedades del nanomaterial.

### BIBLIOGRAFÍA:

- C. Cuerva, J. Fernández-Lodeiro, M. Cano, J. L Capelo-Martínez, C. Lodeiro. *Nano Research*, 2021, 14, 245.
- H. Hirao, H. Tsukamoto, T. Ikeda, T. Haino. *Chem. Commun.*, 2020, 56, 1137.