



# GRADO EN INGENIERÍA DE MATERIALES

Curso 2024-25

## Ficha de Trabajo de Fin de Grado

<b>Departamento:</b>	Química Inorgánica (Fac. CC. Químicas)
<b>Título:</b>	Fronteras de grano en conductores iónicos cerámicos y vitrocerámicos
<b>Title:</b>	Grain Boundaries in ceramic and vitroceramic ionic conductors
<b>Tutor/es:</b>	Ester García González / Susana García Martín
<b>E-mail tutor/es:</b>	esterg@ucm.es; sgmartin@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>	Asignación directa <input type="button" value="v"/>

### Objetivos:

Las fronteras de grano en materiales cerámicos y vitrocerámicos constituyen una fuente casi inagotable de modificaciones en las propiedades macroscópicas de los mismos. Físicamente, son regiones de discontinuidad estructural y/o química que concretamente, en el ámbito de los conductores iónicos, tienen un gran impacto en las propiedades de transporte, negativo habitualmente pero también muy positivo en un número creciente de ejemplos. En este contexto, el trabajo a realizar consistirá en desarrollar bibliográficamente un estudio actualizado de la relevancia de la naturaleza química y estructural de las fronteras de grano así como de la posibilidad de manipular ambos aspectos para optimizar las propiedades buscadas. Aunque circunscrito al ámbito de materiales para la energía, el trabajo parte del manejo de conceptos generales de gran utilidad en la Ingeniería de Materiales.

### Metodología:

Partiendo del estado del arte para conocer el tema y su contexto, el/la estudiante deberá elegir los términos de búsqueda más adecuados que le conduzcan a desarrollar el objetivo central y que también le permitan enlazar con otros conceptos relevantes para lo que se investiga. Tras este proceso, la lectura crítica de las investigaciones encontradas es una etapa clave que permitirá seleccionar los resultados. Para ello, el/la estudiante deberá emplear, además de su criterio, los parámetros establecidos para valorar la calidad de las publicaciones científicas. Los resultados del trabajo quedarán reflejados en la memoria final, en la que además de los aspectos comentados se valorará la interpretación de las ideas encontradas y como se ha profundizado en su contexto. Las tutoras guiarán al/la estudiante a lo largo del proceso, estableciendo reuniones periódicas para evaluar las habilidades que va adquiriendo.

### Bibliografía:

1. W.Xie, Z. Deng, Zh. Liu, T. Famprakis, Keith T. Butler, P. Canepa, *Effects of Grain Boundaries and Surfaces on Electronic and Mechanical Properties of Solid Electrolytes*, Adv. Energy Mater. **2024**, 2304230
2. V.A. Vizgalov, T. Nestler, A. Vyalikh, I.A. Bobrikov, O. Ivankov, V. Petrenko, M.V. Avdeev, L.V. Yashina, D.M. Itkis, *The role of glass crystallization processes in preparation of high Li-conductive NASICON-type ceramics*, CrystEngComm, **2019**, 21, 3106-3115
3. Shanshan Duan et al, *Selective doping to relax glassified grain boundaries substantially enhances the ionic conductivity of LiTi<sub>2</sub>(PO<sub>4</sub>)<sub>3</sub> glass-ceramics*, Journal of Power Sources **2020**, 449, 227574



# GRADO EN INGENIERÍA DE MATERIALES

Curso 2024-25

## Ficha de Trabajo de Fin de Grado

<b>Departamento:</b>	Química Inorgánica (Fac. CC. Químicas)
<b>Título:</b>	Preparación y estudio de muestras magnéticas
<b>Title:</b>	Preparation and study of magnetic samples
<b>Tutor/es:</b>	Josefa Isasi Marín
<b>E-mail tutor/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>	Asignación directa

### Objetivos:

Obtención de muestras magnéticas de óxidos de hierro no funcionalizadas y funcionalizadas con sustancias inorgánicas/orgánicas.

Caracterización estructural y de la microestructura de los polvos obtenidos.

Estudio de la viabilidad de las muestras funcionalizadas obtenidas como membranas de adsorción de cationes.

### Metodología:

Tras el correspondiente estudio de revisión bibliográfica, se procederá a la preparación de muestras magnéticas empleando métodos de síntesis distintos y variando condiciones de reacción buscando una morfología del polvo diferente. Las muestras obtenidas como fases puras serán caracterizadas por DRX, FTIR e imágenes de TEM .

### Bibliografía:

- [1] A. V. Samrot, C. S. Sahithya, J. Selvarani A, S. K. Purayil, and P. Ponnaiah, "A review on synthesis, characterization and potential biological applications of superparamagnetic iron oxide nanoparticles," *Current Research in Green and Sustainable Chemistry*, vol. 4. Elsevier B.V., Jan. 01, 2021. doi: 10.1016/j.crgsc.2020.100042.



# GRADO EN INGENIERÍA DE MATERIALES

Curso 2024-25

## Ficha de Trabajo de Fin de Grado

<b>Departamento:</b>	Química Inorgánica (Fac. CC. Químicas)
<b>Título:</b>	Materiales termoeléctricos para recuperación de calor residual
<b>Title:</b>	Thermoelectric materials for waste heat recovery
<b>Tutor/es:</b>	Jesús Prado Gonjal
<b>E-mail tutor/es:</b>	jpradogo@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>	Asignación por expediente

### Objetivos:

- Preparación de semiconductores degenerados (óxidos y/o intermetálicos) para la recuperación de energía que se pierde en forma de calor (por ejemplo, para la alimentación de dispositivos Internet of Things (IoT), aprovechamiento del calor generado en motores de combustión) a través del efecto Seebeck.
- Caracterización estructural y microestructural de los materiales sintetizados.
- Estudio de sus propiedades termoeléctricas: coeficiente Seebeck, conductividad eléctrica y conductividad térmica.
- Evaluación de los resultados para la implantación de los materiales en dispositivos termoeléctricos.

### Metodología:

Síntesis: Método cerámico y procedimientos de química rápida (síntesis asistida por microondas, molienda mecánica, combustión, alta presión, etc.)

Sinterización: Spark Plasma Sintering (SPS), "hot-pressing"

Caracterización estructural y microestructural: Difracción de rayos x y refinamiento Rietveld, Microscopía electrónica de barrido (SEM), microscopía electrónica de transmisión (TEM).

Propiedades físicas: medidas de coeficiente Seebeck, conductividad eléctrica y conductividad térmica (laser flash).

### Bibliografía:

1. Snyder, G. J., & Toberer, E. S. (2008). Complex thermoelectric materials. *Nature materials*, 7(2), 105
2. Freer, R., Ekren, D., Ghosh, T., Biswas, K., Qiu, P., Wan, S., ... & Mori, T. (2022). Key properties of inorganic thermoelectric materials—tables (version 1). *Journal of Physics: Energy*, 4(2), 022002.
3. Prado-Gonjal, J., García-Calvo, E., Gainza, J., Durá, O. J., Dejoie, C., Nemes, N. M., ... & Serrano-Sánchez, F. (2024). Optimizing Thermoelectric Properties through Compositional Engineering in Ag-Deficient AgSbTe<sub>2</sub> Synthesized by Arc Melting. *ACS Applied Electronic Materials*. doi.org/10.1021/acsaelm.3c01653



# GRADO EN INGENIERÍA DE MATERIALES

Curso 2024-25

## Ficha de Trabajo de Fin de Grado

<b>Departamento:</b>	Química Inorgánica (Fac. CC. Químicas)
<b>Título:</b>	Síntesis y Caracterización de óxidos de molibdeno: aplicación como electrodos en baterías de zinc.
<b>Title:</b>	Synthesis and Characterization of Molybdenum Oxides: applications as Electrodes in Zinc Batteries
<b>Tutor/es:</b>	M. Luisa López García/Carlos Diaz-Guerra Viejo
<b>E-mail tutor/es:</b>	marisal@ucm.es/cdiazgue@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>	Asignación por expediente

### Objetivos:

#### OBJETIVOS:

- 1) Sintetizar  $\text{MoO}_3$  y composites con grafito y nanotubos de carbono.
- 2) Analizar la estabilidad térmica de los productos obtenidos
- 3) Caracterizar estructural y microestructural los distintos sólidos preparados
- 4) Preparación de los electrodos

Estudio electroquímico de los compuestos preparados

### Metodología:

En el presente trabajo el estudiante utilizará métodos de síntesis de química suave para obtener óxidos de molibdeno y sus composites  
Una vez obtenidos, se aplicara las técnicas de caracterización más adecuadas para analizar las fases obtenidas, estudiar la microestructura de los composites, y su estabilidad térmica.  
Finalmente, se aplicarán las técnicas electroquímicas más adecuadas para estudiar su comportamiento como electrodos en las baterías de Zn.  
Las referencias, indicadas en la bibliografía, muestra al estudiante una visión del trabajo que realizara

### Bibliografía:

- "Stable Manganese-Oxide Composites as Cathodes for Zn-Ion Batteries: Interface Activation from In Situ Layer Electrochemical Deposition under 2 V", I. Álvarez-Serrano, P. Almodóvar, D. A. Giraldo, F. Llopis, B. Solsona, and M.L. López, *Adv. Mater. Interfaces* (2022) 2101924
- "h-MoO<sub>3</sub>/AlCl<sub>3</sub>-Urea/Al: High performance and low-cost rechargeable Al-ion battery", P. Almodóvar, D. Giraldo, C. Díaz-Guerra c, J. Ramírez-Castellanos, J. M. González-Calbet, J. Chacón, M. L. López, *Journal of Power Sources* 516 (2021) 230656



# GRADO EN INGENIERÍA DE MATERIALES

Curso 2024-25

## Ficha de Trabajo de Fin de Grado

<b>Departamento:</b>	Química Inorgánica (Fac. CC. Químicas)
<b>Título:</b>	Materiales ferroeléctricos para transistores de efecto de campo
<b>Title:</b>	Ferroelectric Materials for Field Effect Transistors
<b>Tutor/es:</b>	Miguel Tinoco Rivas / Almudena Torres Pardo
<b>E-mail tutor/es:</b>	mitinoco@ucm.es / atorresp@ucm.es
<b>Número de plazas:</b>	1
<b>Tipo de TFG:</b>	Experimental <input type="checkbox"/> Bibliográfico <input checked="" type="checkbox"/> Simulación <input checked="" type="checkbox"/>
<b>Asignación de TFG:</b>	Asignación por expediente

### Objetivos:

- Identificar los materiales ferroeléctricos que se emplean actualmente en transistores de efecto de campo con distintas aplicaciones (almacenamiento de datos, sensores o células solares entre otros).
- Identificar las características estructurales y composicionales que permiten su comportamiento ferroeléctrico.

### Metodología:

Se llevará a cabo una búsqueda bibliográfica donde el estudiante se familiarizará con la búsqueda de información en revistas científicas empleando bases de datos (Web of Science, Scopus). El estudiante identificará las estructuras cristalinas de los materiales seleccionados haciendo uso de programas de representación de estructuras como Vesta<sup>®</sup>, Diamond<sup>®</sup> o CrystalMaker<sup>®</sup>. Además, identificará las características estructurales y composicionales que permiten el carácter polar en los diferentes materiales a partir de la simulación e interpretación de diagramas de difracción de rayos X y de electrones de las estructuras propuestas mediante diferentes softwares.

### Bibliografía:

Rabe, K M.; *et al.* "Novel Functionality in Switchable Polar Materials" *Advanced Electronic Materials* 8, 2200146 (2022)  
Yang, Q. *et al.* "Ferroelectricity in layered bismuth oxide down to 1 nanometer" *Science* 379, 1218 (2023)



# GRADO EN INGENIERÍA DE MATERIALES

Curso 2024-25

## Ficha de Trabajo de Fin de Grado

<b>Departamento:</b>	Química Inorgánica (Fac. CC. Químicas)
<b>Título:</b>	Redes Metal-orgánicas (MOF) como electrodos en baterías recargables de ión metálico
<b>Title:</b>	Metal Organic Frameworks as electrodes in rechargeable metal-ion batteries
<b>Tutor/es:</b>	Elizabeth Castillo Martínez / Víctor Durán Egido
<b>E-mail tutor/es:</b>	ecastill@ucm.es / vduran01@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>	Asignación por expediente

### Objetivos:

Se llevará a cabo la optimización del proceso de reducción química de materiales basados en redes metal-orgánicas, insertando iones Li<sup>+</sup>, Na<sup>+</sup> o K<sup>+</sup> en su estructura cristalina. Tras esto, se estudiará la influencia de esta inserción química en el almacenamiento electroquímico de energía de los materiales preparados, utilizándolos como cátodos en baterías de ion-Li, ion-Na e ion-K, y usando si fuera posible electrolitos poliméricos que permitan obtener una eficiente batería de estado sólido.

### Metodología:

- Caracterización estructural de los materiales por difracción de rayos X (DRX), espectroscopía infrarroja (FTIR) y análisis termogravimétrico (ATG)
- Análisis elemental por técnicas de fluorescencia de rayos X (FRX) y espectroscopía de emisión atómica con plasma de acoplamiento inductivo (ICP-OES)
- Caracterización eléctrica y electroquímica por técnicas de voltametría cíclica y ciclado galvanostático.
- Medidas de susceptibilidad magnética frente a temperatura y Magnetización frente a campo magnético.

### Bibliografía:

- Xie, L. S., Skorupskii, G. & Dincă, M. Electrically Conductive Metal-Organic Frameworks. *Chemical Reviews* 120, 8536–8580 (2020).
- Baumann, A. E., Burns, D. A., Liu, B. & Thoi, V. S. Metal-organic framework functionalization and design strategies for advanced electrochemical energy storage devices. *Communications Chemistry* 2, (2019).
- Yang, Q. et al. Fe-Based metal-organic frameworks as functional materials for battery applications. *Inorganic Chemistry Frontiers* 9, 827–844 (2022).