

Identificación del proyecto

Nombre del proyecto

Modelización de Propiedades Fundamentales y Aplicaciones de Óxidos Metálicos Moleculares, Nanoestructuras de Carbono y sus Híbridos (MODMOCAN)

Expediente numero

PID2023-149905NB-I00



Descripción del proyecto

El proyecto actual es continuación del proyecto PID2020-112762GB-I00, liderado por los mismos IPs, con líneas de investigación enmarcadas en temáticas similares, pero con nuevos sistemas, propiedades e hipótesis de partida generadas por la estrecha relación con nuestros colaboradores experimentales. Nuestra propuesta se basa en el estudio computacional de diferentes nanoestructuras que son relevantes en áreas como la catálisis, el magnetismo, la electroquímica, la información cuántica o la biomedicina, entre otras. Trata de abordar problemas con especial relevancia en energía y medio ambiente, pero principalmente en la frontera del conocimiento de la ciencia fundamental. La amplia experiencia y el carácter interdisciplinario del grupo de investigación hace posible abordar el estudio de sistemas de elevada complejidad como los aquí propuestos 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 nanoestructuras de carbono, principalmente la nueva familia de los actínido-fullerenos endoédricos, fullerenos que contienen átomos de Th o U, dímeros de actínido-lantánido o clústeres de los tipos UN, U₂N, U₂O o U₂C, así como sistemas con alcalinotérreos y lantánidos. Concretamente, estudiaremos la formación del enlace en los dímeros An-Ln y Ln-Alcalinotérreo confinados en interior de los fullerenos, así como las propiedades magnéticas de estos compuestos que contienen electrones desapareados deslocalizados entre los metales del dímero confinado. También se profundizará en la comprensión de nuevos actínido-clusterfullerenos sintetizados recientemente. Mejorar la funcionalización de metalofullerenos endoédricos es fundamental para potenciar sus posibles aplicaciones. Con este objetivo trataremos de analizar los diferentes factores que afectan a la regioselectividad en los actínido-fullerenos, así como en los nitruros de lantánido-fullerenos catiónicos y neutros.

El segundo bloque se dedica a la modelización y comprensión de los polioxometalatos (POMs) en solución. Se propondrá una estrategia computacional basada en datos de simulaciones de dinámica molecular (DM) que incorpora el efecto de la naturaleza de los contracaciones para simular el entorno del soluto y se desarrollará un código para automatizar este proceso con el mínimo input por parte del usuario. También se definirá un protocolo general para simulaciones de DM en líquidos iónicos basados en POMs para tener una mejor comprensión y predicción de sus propiedades.

El último bloque se dedica a la modelización electrocatalítica de procesos que respetan el medio ambiente y de alto valor añadido. Más concretamente, se analizará el diferente comportamiento en la oxidación catalítica de agua por parte de un conjunto de POMs de tipo sándwich que son muy similares entre ellos y se establecerán reglas sencillas que permitan explicar este diferente comportamiento.

También se propondrán mecanismos para la reducción electroquímica de CO₂ y la reducción de N₂ con catalizadores basados en POMs y la generación de H₂ y de amoníaco en medio ácido electrocatalizada por metalofullerenos endoédricos. Finalmente, se estudiarán las propiedades catalíticas en reacciones ORR y OER de un híbrido de nanotubo-POM, que conecta los dos tipos de nanoestructuras estudiadas en esta propuesta.

Financiación

Entidad financiadora

MICIU/AEI/10.13039/501100011033, por FEDER, UE y por el FSE+

Importe

173.375,00