

INDICE

1. Introducción general.....	1
1.1. Energía solar y fotosíntesis artificial.....	5
1.2. Transformación de dióxido de carbono.....	12
1.2.1. Reducción fotocatalítica del CO ₂	13
1.2.2. Materiales fotocatalíticos empleados para la reducción del CO ₂	13
1.3. Disociación fotocatalítica del agua.....	14
1.3.1. Materiales fotocatalíticos empleados para la disociación del agua.....	15
1.4. Aspectos generales de los clústeres de metales de transición.....	15
1.4.1. Clústeres hexanucleares.....	17
1.4.1.1. Clústeres octaédricos de molibdeno.....	18
1.4.1.2. Clústeres octaédricos de tántalo.....	19
1.4.2. Aplicaciones de los clústeres octaédricos de Mo y Ta en fotosíntesis artificial.....	21
1.5. Referencias.....	22
2. Objetivos.....	31
2.1. Objetivo general.....	33
2.2. Objetivos específicos.....	33
3. Sección experimental.....	35
3.1. Productos Químicos.....	37
3.2. Procedimientos de síntesis de materiales.....	38
3.2.1. Síntesis de los clústeres octaédricos de molibdeno y tántalo.....	38
3.2.2. Síntesis de los soportes: g-C ₃ N ₄ y OG.....	42
3.2.3. Síntesis de los materiales híbridos.....	44
3.3. Técnicas de caracterización.....	44
3.4. Metodologías de estudio de los materiales en procesos de fotosíntesis artificial.....	61
3.5. Técnicas de seguimiento de las reacciones fotocatalíticas.....	65
3.6. Diseño de experimentos.....	69
3.7. Referencias.....	73

4. Clústeres octaédricos yodados de Mo₆ soportados en Fe-g-C₃N₄ para la fotorreducción selectiva de CO₂ a CO.....	77
4.1. Introducción.....	79
4.2. Síntesis y caracterización.....	83
4.3. Reducción fotocatalítica de CO₂.....	91
4.4. Determinación de las propiedades fotofísicas.....	101
4.5. Conclusiones.....	105
4.6. Referencias.....	108
5. Clústeres octaédricos bromados de Ta₆ como fotocatalizadores para la generación de H₂.....	115
5.1. Introducción.....	117
5.2. Síntesis y caracterización.....	118
5.2.1. Difracción de rayos X en polvo (DRXP) – Análisis termogravimétrico (TGA).....	118
5.2.2. Espectroscopía UV-Vis en disolución y de reflectancia difusa (DRS).....	119
5.2.3. Espectroscopía infrarroja por transformada de Fourier (FTIR) y Raman.....	121
5.2.4. Microscopía Electrónica de Barrido (SEM) y espectroscopía de rayos X por dispersión de energía (EDX).....	122
5.3. Estudio fotocatalítico de la HER.....	123
5.3.1. Reactividad y actividad catalítica hacia la generación de hidrógeno.....	123
5.3.2. Posibles especies involucradas en la generación de hidrógeno.....	135
5.4. Conclusiones.....	141
5.5. Referencias.....	143
6. Clústeres octaédricos bromados de Ta₆ soportados en OG para la generación fotocatalítica de H₂.....	147
6.1. Introducción.....	149
6.2. Síntesis y caracterización.....	151
6.2.1. Análisis por DRXP.....	151
6.2.2. Espectroscopía UV-Vis DRS-.....	152
6.2.3. Espectroscopías FTIR y Raman.....	154

6.2.4. Análisis SEM y EDX.....	157
6.2.5. Análisis elemental y de superficie específica.....	159
6.3. Estudio de los nanomateriales $\{Ta_6Br_{12}^I\}@OG$ en la HER.....	159
6.4. Conclusiones	164
6.5. Referencias	166
7. Estudio de las propiedades fotoluminiscentes de los clústeres octaédricos bromados de Ta_6.....	171
7.1. Introducción.....	173
7.2. Propiedades luminiscentes de las especies $\{Ta_6Br_{12}^I\}^{2+}$	174
7.3. Análisis computacional de la emisión del clúster $\{Ta_6Br_{12}^I\}^{2+}$	180
7.4. Modificación de la intensidad de la emisión por procesos de transferencia electrónica: efecto de dadores-aceptores y reactividad con ROS.....	181
7.5. Conclusiones.....	188
7.6. Referencias.....	190
8. Conclusiones Generales.....	193
9. Lista de Publicaciones.....	197

