

PROPUESTAS de TRABAJO FIN DE MASTER. CURSO 2023/24

Trabajos no concertados

1. Procesado industrial de aleaciones cobre aluminio

Directora: María Victoria Biezma Moraleda. *e-mail:* maria.biezma@unican.es

Tutor: Emilio Placer Maruri. *e-mail:* eplacer@casusopropellers.com

Centro: Universidad de Cantabria.

Resumen Las aleaciones cobre-aluminio son sistemas complejos, que basan sus propiedades en la adición de elementos de aleación estrictamente seleccionados, tales como níquel, hierro, manganeso y cinc, fundamentalmente. Con ello se obtienen los denominados bronce de elevada aleación, entre los que destacan los bronce al níquel y aluminio, NAB (*nickel aluminium bronzes*) con excelentes propiedades tribológicas, (desgaste, cavitación, erosión, etc.), y de resistencia a la corrosión, en particular en medio marino. La principal aplicación de estos sistemas se encuentra en ámbito naval, desde hélices, bombas, rodetes, etc.

Dichas aleaciones se obtienen por diferentes procesos tanto clásicos de moldeo, empleando diferentes técnicas como de manufactura aditiva. Todo ello deriva en la generación de defectología durante su procesado que hay que conocer, controlar y, sobre todo, evitar, pues podría generar fallos en servicio de los componentes empleados.

El presente TFM se estudiarán aleaciones NAB de moldeo en arena y se analizarán los defectos obtenidos, tanto internos como externos, realizando un mapa de los mismos en componentes empleados en ámbito naval, investigando las causas de su formación.

Hay posibilidad de realizar parte del TFM en la empresa Casuso Propellers, Cantabria, con una ayuda de 450 euros.

2. Magnetic nanostructured TiO₂ composites for photocatalysis

Director: Manuel de Pedro del Valle. *e-mail:* manuel.depedro@unican.es

Co-Director: Ignacio Hernández Campo. *e-mail:* hernandi@unican.es

Centro: Universidad de Cantabria.

Resumen Titanium dioxide with particle size in the range of 20 nm is a widely studied material due to its applications in photocatalysis including pollutants degradation and CO₂ conversion to fuels. This project aims at introducing magnetic nanoparticles in a nano-TiO₂-carbon based composite and test the performance of the new material in photocatalysis applications.

The introduction of small magnetic particles can be employed for purification, recuperation and consequent reutilization of the catalysts. Moreover, some of the metallic or oxide materials which are typically used (such as Ni, or Fe₂O₄) have important catalytic activity themselves. The inclusion of these materials via polymeric stabilization via emulsifiers like carboxymethyl cellulose or similar precursors resulting in a carbon-based composite allows to inhibit surface oxidation and to overcome aggregation. We will employ simple synthetic methods at ambient and high temperatures to produce the nanoparticles and composites.

The interaction of the TiO₂ with magnetic materials and carbon-based species within the composite and its effect in the optical and photocatalytic properties will be studied.

To execute this project several experimental techniques will be used mainly based on structural, magnetic and optical analysis. Microscopy, including electron microscopy could be also applied. Synthesis and material characterization will be crucial as well as the study of the physical-chemical, optical and magnetic characterization through macroscopic techniques.

3. Gold and Silver nanoparticles in TiO₂ composites for sensing and catalytic applications

Directora: Marta Norah Sanz Ortiz. *e-mail:* sanzmn@unican.es

Co-Director: Ignacio Hernández Campo. *e-mail:* hernandi@unican.es

Centro: Universidad de Cantabria.

Resumen Noble metal nanoparticles are of interest in sensing applications due to the interesting optical and chemical properties, which can be engineered to pursue detection of several biologic or chemical agents. For instance, they can be surface-functionalised through a number of ligands and they present a Surface Plasmon Resonance that confers them a deep colour with strong sensitivity to aggregation and surrounding media. Moreover, noble metal particles have been of use as catalyst in many processes of interest, particularly for energy production and material purification.

Titanium dioxide, TiO₂, in the forms of anatase and rutile is also a material with photocatalytic properties (ranging from CO₂ conversion to fuels), as well as the basis for low cost dye-sensitised solar cells applications. Many attempts to improve its performance have aimed at including noble metals in order to combine capabilities.

We have recently produced nano-TiO₂ with Copper nanoparticles on a Carbon support with enhanced photocatalytic activity through a simple hydrothermal method. The aim of this project is to introduce noble metal nanoparticles particles in the TiO₂-Carbon composite for sensing and catalytic applications.

TiO₂ shows photocatalytic activity at excitation wavelengths around the UV. This presents a number of challenges that could be overcome by excitation at longer wavelengths. We will aim at obtaining sensitisation and therefore opto-electronic processes (like photovoltaics or catalysis) at wavelengths in the visible range via the interaction of TiO₂ with noble particles and selected dyes. Conversely, we will study the influence of the TiO₂ and optically active molecules in the optical and electronic properties of the noble metal particles, that could have an impact on their sensing capabilities.

We will focus on the systematic synthesis and material characterisation of the composites and the optical characterisation of the products, and will analyse the performance of selected instances in optical-based applications like sensing or photocatalysis.

4. Magnetismo de bandas en aleaciones nanométricas de NiB obtenidas por rutas químicas sencillas

Director: Luis Fernández Barquín. *e-mail:* barquinl@unican.es

Centro: Universidad de Cantabria.

Resumen El magnetismo se suele estudiar a nivel de grado, master e, incluso, doctorado, asociado a la existencia de espines localizados en los iones magnetógenos. Esta visión es cómoda e intuitiva, pero en el caso de materiales 3d metálicos no es suficientemente correcta. En esos casos es necesario utilizar el modelo de Stoner asociado al magnetismo de bandas. Esta utilización conecta el Magnetismo con la Física de la Materia Condensada puesto que en el caso más simple (paramagnético de Pauli) tenemos configuraciones de las bandas electrónicas dependientes del estado de espín (positivo o negativo). En este sentido, los materiales amorfos ferromagnéticos fueron muy estudiados en los 70 y 80 del pasado siglo. Sin embargo, algunos detalles asociados a la existencia de magnetismo itinerante (de bandas) se dejaron de lado y no existen muchos estudios. En particular, las aleaciones de NiB presentan características fundamentales todavía muy desconocidas. El trabajo consistirá en sintetizar aleaciones amorfas de NiB nanométricas y mixtas de NiB amorfo + Ni cristal por reducción química. El NiB amorfo presenta paramagnetismo de Pauli asociado a los electrones itinerantes. El Ni metálico es un ferromagnético fuerte

también de carácter itinerante. El estudio de caracterización consistirá en realizar medidas de difracción de rayos X y medidas de imanación DC y susceptibilidad AC en muestras en polvo. Con los resultados se tratará de entender la modificación de las propiedades magnéticas con el tamaño, en muestras con tamaños menores a 50 nm. Este trabajo experimental tiene un carácter fundamental que podría ser muy atrayente para estudiantes del Máster.

5. Caracterización de la degradación del papel dieléctrico en transformadores de potencia por medio del ensayo Small-Punch

Director: Isidro A. Carrascal Vaquero. *e-mail:* carrasci@unican.es

Co-director: Borja Arroyo Martínez. *e-mail:* arroyob@unican.es

Centro: Universidad de Cantabria.

Resumen El objetivo del proyecto es plantear un método de análisis quasi-no-destrutivo del grado de deterioro del papel que se utiliza como aislante en transformadores eléctricos, debido a la exposición al aceite y a la temperatura generada durante el servicio. Existen trabajos previos donde se materializa la caracterización y distinción de diversos grados de deterioro de papel de transformador, los cuales han sido llevados a cabo mediante ensayos de tracción con probetas convencionales, consiguiéndose estimar parámetros resistentes tales como el límite elástico o la resistencia a tracción, pudiéndose obtener su evolución con el grado de deterioro.

Por otro lado, el ensayo alternativo Small Punch, recientemente normalizado, consiste en el punzonado de una probeta plana de 10mmx10mm de sección y 0.5mm de espesor deformándola hasta su rotura, obteniéndose una curva de la fuerza aplicada frente al desplazamiento de la zona punzonada en la misma; a partir de ella pueden estimarse propiedades en tracción tales como el límite elástico o la tensión de rotura para materiales metálicos. Más recientemente, el ensayo Small Punch ha sido validado para su empleo en la caracterización en ambientes agresivos y situaciones sometidas a fragilización, posibilitándose la distinción de diferentes grados de deterioro, con parámetros como el descenso de la energía bajo la curva de ensayo.

En base a todo ello, en este proyecto se plantea la caracterización de diversos grados de deterioro de papel de transformador mediante ensayos Small Punch, y la posterior correlación de estos resultados con los obtenidos anteriormente mediante ensayos de tracción. Todo ello con el fin de validar la idoneidad de esta técnica alternativa en esta aplicación, y, si es posible, derivar correlaciones experimentales para la estimación de parámetros resistentes en tracción tales como el límite elástico y la tensión de rotura, y con ello su evolución con el grado de deterioro.

Lo anterior posibilitará la evaluación en servicio del papel de transformador obteniéndose una muestra muy pequeña que no comprometa la integridad del mismo, es decir, que se puedan ensayar muestras de papel periódicamente mientras el transformador está en servicio para evaluar el decremento de sus propiedades hasta el instante de su retirada. Dicho en otras palabras, se posibilitará, en base a la pequeña cantidad de material, el establecimiento de un programa de vigilancia del grado de deterioro del papel de transformadores en servicio.

6. Propiedades magneto-estructurales en aleaciones metamagnéticas con memoria de forma

Director: Jon Gutiérrez. e-mail: jon.gutierrez@ehu.eus

Co-directora: Patricia Lázpita. e-mail: patricia.lazpita@ehu.eus

Centro: Universidad del País Vasco UPV/EHU.

Resumen Las aleaciones metamagnéticas con memoria de forma (MMSMAs) representan una nueva clase de materiales multifuncionales que desarrollan efectos de magneto-deformación, magneto-calóricos, y magneto-resistencia gigantes como resultado de la transformación magneto-estructural que presentan. Estas propiedades, de gran interés tecnológico, están estrechamente relacionadas con las inestabilidades estructurales y magnéticas, y son consecuencia de la disminución del ferromagnetismo inducido por la transformación martensítica. Hasta el momento se han realizado avances significativos en el desarrollo de sus propiedades, sin embargo, su implementación en aplicaciones se ve comprometida por su elevada fragilidad. Uno de las posibilidades para superar este hándicap es el desarrollo de heteromateriales compuestos por polímero/partículas de memoria de forma magnética que permita obtener una mejora en sus propiedades mecánicas.

Como un primer paso para el desarrollo de estos materiales, el objetivo de este trabajo es la fabricación y caracterización de partículas de MMSMAs con buenas propiedades para el acoplamiento magnetoestructural.

En particular, se investigarán partículas micro y nanométricas obtenidas a partir de aleaciones de NiMn-X (X = Ga, Sn, In) dopadas con Co y/o Cu, determinando la influencia del modo de fabricación y los tratamientos térmicos en sus propiedades magnéticas y estructurales. Además, se evaluará su viabilidad para el desarrollo de los efectos magnetocalóricos y de magneto-deformación.

El estudiante obtendrá experiencia práctica en técnicas de fabricación de aleaciones tanto en su forma masiva como de partícula (horno de inducción, horno de arco, fabricación mediante enfriamiento ultrarrápido, molino planetario) complementado con técnicas de caracterización como espectroscopía de rayos X de dispersión de energía (EDS), difracción de Rayos X y neutrones, calorimetría diferencial de barrido (DSC), magnetometría de muestra vibrante (VSM), entre otras.

Este trabajo puede contar con una ayuda económica (contactar con los directores).

7. Materiales y sensores magnetoactivos basados en tecnologías de impresión

Directora: Carmen Rial Tubio. e-mail: carmen.rial@bcmaterials.net

Co-director: Jon Gutiérrez. e-mail: jon.gutierrez@ehu.eus

Centro: Universidad del País Vasco UPV/EHU.

Centro externo: BCMaterials.

Resumen En la actualidad, uno de los grandes retos tecnológicos es el desarrollo de nuevos *materiales inteligentes y multifuncionales*, estrechamente relacionados con la evolución de conceptos como la Industria 4.0 e Internet de las Cosas (IoT). La monitorización de magnitudes, tales como temperatura, humedad, y presión, entre otras, es una necesidad creciente, donde los materiales inteligentes juegan un papel esencial. En este sentido, destacan los materiales magnetoactivos, que responden a la aplicación de campos magnéticos, y que tienen múltiples aplicaciones en los sectores de automoción, electrónica o energía, entre otras. Asimismo, el desarrollo de técnicas de impresión ha propiciado el diseño y fabricación de nuevos dispositivos con elevado control de la geometría y la resolución. Sin embargo, es necesario seguir investigando tanto a nivel de

selección de materiales, como en el desarrollo de sistemas complejos 3D que faciliten la integración y adaptación a diferentes geometrías y superficies.

El objetivo de este trabajo es el desarrollo de estructuras multifuncionales con respuesta magnética utilizando tecnologías de impresión, como por ejemplo, *fused deposition modeling* (FDM), escritura directa con tintas (DIW), *piezo-jet* o *spray-printing*. En este contexto, se utilizará un enfoque multidisciplinar que incluye la formulación de tintas que permitan obtener estructuras complejas para inducir respuestas magnetoactivas adecuadas para aplicaciones de sensores y actuadores, y su caracterización químico-física y funcional.

La impresión de dispositivos magnéticos es un ámbito muy reciente, y el desarrollo de nuevos materiales magnéticos funcionales, como imanes duros y blandos avanzados, refrigerantes magnéticos, núcleos, MEMS (sistemas microelectromecánicos) magnéticos y elastómeros, sensores y actuadores, es esencial para mejorar la eficiencia y el rendimiento de los dispositivos magnéticos de alta tecnología

8. Síntesis de vitrímeros biobasados para su aplicación en composites reciclables

Director: Antonio Veloso Fernández. *e-mail:* antonio.veloso@ehu.eus

Centro: Universidad del País Vasco UPV/EHU.

Resumen Los vitrímeros son nuevos materiales que se están desarrollando durante los últimos años y permiten la obtención de polímeros no caducos y almacenables a temperatura ambiente que además pueden ser procesados como los termoplásticos. Debido a la presencia de enlaces dinámicos en la red tridimensional, estos materiales se pueden reprocesar y reciclar. Además, las propiedades mecánicas de los mismos son muy similares a las de los composites termoestables. Así, los vitrímeros sostenibles y reciclables pueden ser transformados mediante termoconformado.

Las tareas a realizar a lo largo del proyecto son:

- Síntesis de vitrímeros reciclables a partir de fuentes renovables para su incorporación en composites.
- Caracterización estructural y de propiedades termomecánicas del vitrímero.
- Formulación de composites a partir de fibras naturales y los vitrímeros sintetizados.
- Caracterización de propiedades termomecánicas del composite.
- Realización de ensayos para determinar si los vitrímeros utilizados en el composite son separables de las fibras naturales y además reciclables.

9. Síntesis de membranas poliméricas para limpieza de aguas

Director: Antonio Veloso Fernández. *e-mail:* antonio.veloso@ehu.eus

Centro: Universidad del País Vasco UPV/EHU.

Resumen El agua es un recurso limitado que debemos de preservar y cuidar. En la actualidad el agua de ríos, efluentes y mares se está viendo cada vez más contaminada por distintos compuestos, siendo muchos de ellos perjudiciales para la salud humana. En este aspecto, la comunidad científica está realizando grandes esfuerzos en la búsqueda de membranas que puedan filtrar el agua, reteniendo los contaminantes e incluso desactivando la actividad de los mismos. En este proyecto se realizará el estudio de la síntesis de diferentes membranas poliméricas insolubles en agua con el fin de filtrar compuestos tóxicos que actualmente residen en nuestras aguas.

El objetivo principal es sintetizar membranas poliméricas para eliminar contaminantes en el agua. Este objetivo principal involucra las siguientes tareas:

- 1) Síntesis de membranas poliméricas insolubles en agua.
- 2) Caracterización de sus propiedades químico-físicas.
- 3) Estudios de retención de compuestos tóxicos sobre las membranas.



10. Desarrollo de recubrimientos por tecnología sol-gel

Director: Antonio Veloso Fernández. *e-mail:* antonio.veloso@ehu.eus

Tutora: Fabiola Brusciotti. *e-mail:* fabiola.brusciotti@tecnalia.com

Centro externo: TECNALIA (grupo de Ingeniería de Superficies).

Resumen En este proyecto se desarrollarán recubrimientos omnifóbicos por tecnología sol-gel, que sean no-tóxicos y libres de compuestos polifluorados, para diferentes aplicaciones, donde se requieren propiedades funcionales (antiadherentes, *easy-to-clean*, anticorrosión). El objetivo es la preparación de formulaciones y sus modificaciones según las propiedades finales esperadas.

Las prácticas implicarán también la realización de ensayos de caracterización y comportamiento de las capas obtenidas de acuerdo con los requerimientos establecidos (adherencia, resistencia a la corrosión, ángulo de contacto, etc.).

11. Desarrollo de nuevos tratamientos superficiales mediante técnicas de síntesis electroquímica

Director: Antonio Veloso Fernández. *e-mail:* antonio.veloso@ehu.eus

Tutora: Fabiola Brusciotti. *e-mail:* fabiola.brusciotti@tecnalia.com

Centro externo: TECNALIA (grupo de Ingeniería de Superficies).

Resumen Este trabajo consiste en el desarrollo y la aplicación de técnicas avanzadas de síntesis electroquímica para el desarrollo de nuevos recubrimientos. Ejemplos de aplicación específicas son el desarrollo de nuevos electrodos para electrolizadores para la generación de hidrógeno; recubrimientos vía metalizado electroless para reducir la permeabilidad al hidrogeno de los tanques de almacenamiento; recubrimientos altamente conductores con bajo coeficiente de desgaste para el sector eléctrico.

Las prácticas implicarán también la realización de ensayos de caracterización y comportamiento de las capas obtenidas de acuerdo con los requerimientos establecidos.

12. Photophysical study of new chemical sensors to discover the nature of neutrinos based on a single barium Atom light detection (FBI-sBaD)

Directora: Virginia Martínez Martínez. *e-mail:* virginia.martinez@ehu.eus

Co-director: Iván Rivilla de la Cruz. *e-mail:* ivan.rivilla@ehu.eus

Centro: Universidad del País Vasco UPV/EHU.

Resumen Searching for neutrinoless double-beta decays ($\beta\beta 0\nu$) is the only practical way to establish if the neutrinos are their antiparticles, a discovery of enormous importance for particle physics and cosmology. However, due to the inherent nature of neutrinos, their detection is very difficult. In particular, the $\beta\beta 0\nu$ decay of ^{136}Xe could be established by detecting the doubly ionized daughter atom, Ba^{2+} created, in the decay. Such detection could be achieved via a sensor made of a monolayer of molecular detectors. Ba^{2+} would be captured by one of the chemical entities that act as a fluorescent sensor, giving rise to a new fluorescent complex.

Thus, the development and characterization of new molecules as chemical sensor of Ba^{+2} is a challenge from the chemistry point of view that offers the possibility to contribute to one of the most relevant problems of science, the neutrino physics. The new sensor are based on fluorescent bicolour indicator (FBI) that binds strongly to Ba^{2+} and offers a shining difference with the unchelated state by introducing a colour shift.* The colour shift is due to a perpendicular arrangement between two aromatic units of the fluorophore upon Ba^{2+} chelation, thus disconnecting both polycyclic system. The fluorescence characteristics rely on the two aromatic systems. Therefore, intensive exploration of the chemical space will be required in order to maximize the bicolour character of these

molecules. Thus, maximizing the $\Delta\lambda$ and ΔI parameters, resulting in a more efficient sensor.

During this TFM, a series of organometallic complexes, based on a central metal, M= Ir, Eu, La, among others, coordinated with diverse N-heterocycles aromatic rings, will be photophysically characterized in different environments by absorption, emission (steady-state and time resolved) and transient absorption spectroscopies.

* (a) Rivilla I et al. Fluorescent bicolour sensor for low-background neutrinoless double β decay experiments. *Nature*, **2020**, *583*, 48-54. (b) Herrero-Gómez, J. P. et al. Ba+2 ion trapping using organic submonolayer for ultra-low background neutrinoless double beta detector. *Nat Commun.* **2022**, *13*, 7741.

13. Impresión de composites conteniendo MOFs y ILs para la detección de gases nocivos

Directora: Begoña Bazán Blau. *e-mail:* bego.bazan@ehu.eus

Tutora: Bruna F. Gonçalves. *e-mail:* bruna.ferreira@bcmaterials.net

Centro: Universidad del País Vasco UPV/EHU.

Centro externo: BCMaterials.

Resumen Actualmente, existe una creciente demanda de sensores químicos para detección de gases tóxicos derivados de la actividad industrial, como son los compuestos orgánicos volátiles (COV), dado que éstos son una gran amenaza para el medio ambiente y la salud humana. Los materiales porosos y conductores (electrónicos o iónicos) son el corazón de muchos de los sistemas de detección de gases. Sin embargo, su selectividad siempre ha sido su talón de Aquiles. Es por ello que el desarrollo de materiales de detección con alta sensibilidad y selectividad hacia los analitos deseados a temperatura ambiente es de gran importancia.

Además, el costo y producción de estos sensores es primordial para su rápida implementación, pues es importante asegurar una producción en larga escala, barata y usando una química verde. La impresión de tintas funcionales es una excelente y creciente ruta para la integración de dispositivos inteligentes, pues posibilita la producción de dispositivos flexibles, baratos, ligeros y con baja demanda de energía, compatibles con la Industria 4.0.

Este proyecto propone el uso de estructuras organometálicas (MOF) porosas, como materiales de detección debido a su compatibilidad con las aplicaciones de separación y adsorción de gases. Para dotar de cierta conductividad iónica a los MOFs, proponemos estudiar el efecto de la incorporación de líquidos iónicos con distintas naturalezas químicas (IL) en sus poros. Para la implementación de estos materiales, proponemos dispersarlos en matrices poliméricas usando rutas tradicionales y químicamente verdes (disolventes y reactivos) a fin de producir tintas funcionales. La producción de estas tintas será hecha dependiendo de la técnica de impresión a ser usada (spray, serigrafía y jato de tinta), cambiando la viscosidad y tensión superficial de las mismas. Finalmente, estas tintas serán imprimidas en sustratos conductores conteniendo sistemas de traducción de señal químico a eléctrico. Las diferentes rutas (tradicional o verde y técnicas impresión) serán evaluadas a fin de comparar sus desempeños adsorbiendo gases nocivos.

El objetivo final es desarrollar un abanico de materiales composites Polímero/MOF/IL con que permitan llegar a una selectividad cruzada para la detección de gases nocivos como VOCs: etanol, isopropanol y acetona, y otros gases nocivos con distintas propiedades físico-químicas. Para ello, desarrollaremos una matriz de sensores utilizando múltiples materiales de tipo Polímero/MOF/IL integrados en un mismo sistema de transducción.

14. Magnetodiscos integrados en plataformas microfluídicas como terapia anticancerosa

Directora: Janire Saez. e-mail: janire.saez@ehu.eus

Co-director: Alfredo García Arribas. e-mail: alfredo.garcia@ehu.es

Centro: Universidad del País Vasco UPV/EHU.

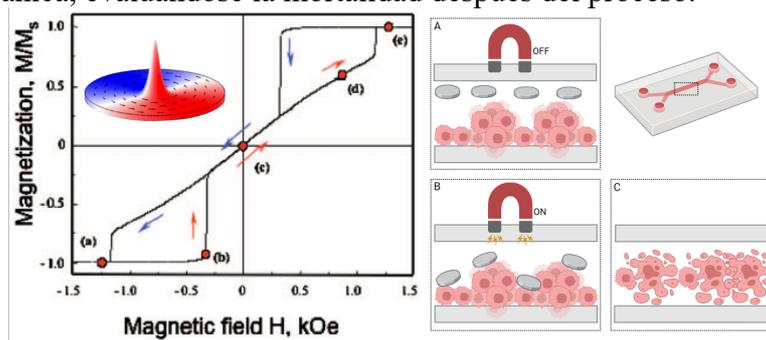
Resumen El cáncer es un proceso estrechamente asociado al envejecimiento. En una sociedad que busca el envejecimiento saludable, es necesario desarrollar estrategias multidisciplinares para mejorar la salud humana y dar respuesta a patologías con alto impacto sanitario como el cáncer. El objetivo principal de este proyecto es desarrollar una plataforma que permita la evaluación de la eficacia y toxicidad de nuevas terapias antineoplásicas basadas en materiales magnéticos.

La actuación magneto-mecánica, consistente en provocar impactos mediante la oscilación de partículas magnéticas, se ha propuesto como medio efectivo para inducir la muerte celular.¹ Los discos magnéticos con estado de vórtice son especialmente adecuados para ello, porque su alta permeabilidad permite una actuación muy efectiva y su configuración magnética carente de remanencia evita la aglomeración de las partículas.²

Las plataformas microfluídicas "Organ-on-a-Chip" (OOC) permiten imitar tejidos y órganos in vitro para estudiar la migración celular en microambientes controlados con precisión,^{3,4} proporcionan una excelente transparencia óptica compatible con la microscopía confocal,⁵ y permiten perfusión, que induce la diferenciación celular.⁶ Estos dispositivos se utilizan en la investigación celular fundamental, pero también en el ensayo de nuevos fármacos, lo que permite sustituir la experimentación animal.

En este proyecto multidisciplinar se combina 1) ciencia de los materiales, a través del desarrollo y caracterización de los discos magnéticos para la actuación magneto-mecánica, así como la fabricación de dispositivos microfluídicos y 2) cultivo celular, específicamente de células de cáncer y estudio de la viabilidad celular.

Los discos magnéticos se fabricarán mediante deposición catódica (*sputtering*) y fotolitografía sin máscaras y serán caracterizados morfológica y magnéticamente. Los discos magnéticos serán insertados en dispositivos microfluídicos fabricados por técnicas de prototipado rápido como la xerografía o el láser de CO₂. Como prueba de concepto, los discos serán puestos en contacto con células cancerígenas y sometidos a la actuación magneto-mecánica, evaluándose la mortalidad después del proceso.



Estructura y comportamiento magnético de los microdiscos con estado de vórtice (izquierda) y esquema del ensayo de la actuación magneto-mecánica en el entorno microfluídico (derecha)

[1] D-H. Kim *Nature Materials*, 2010, **9**, 165-171., [2] M. Goirienea-Goikoetxea *Appl. Phys. Rev.*, 2020, **7**, 011306., [3] M. Tehranirokh *Biomicrofluidics*, 2013, **7**, 051502-14., [4] G. Velve-Casquillas *Nano Today*, 2010, **5**, 28-47., [5] G. M. Whitesides, *Nat.*, 2006, **442**, 368-373., [6] V. Van Duinen, *Current Op. Biotechnol.*, 2015, **132**, 41735-14.

Este trabajo puede contar con una ayuda económica (contactar con los directores).

15. Conductive protein-based materials for biomedical and technological applications

Directora: Aitziber López Cortajarena. *e-mail:* alcortajarena@cicbiomagune.es

Tutor: A designar por la Comisión Académica

Centro externo: CIC BioMagune

Resumen The development of novel biocompatible materials with defined structural and functional properties holds great promise for numerous applications in biotechnology and biomedicine. This master's project will be conducted in the context of the European project e-Prot, which focuses on engineering efficient conductive protein systems (e-Ps), and the fabrication of all-protein-based conductive structures and materials. This collaborative and interdisciplinary project exploits the potential of protein engineering to encode electron and proton conduction in a protein system with self-assembly capabilities.

Specifically, the project will concentrate on designing and characterizing robust proteins, with optimized conductivity properties defined by their sequence, as well as the generation of hybrid systems that integrate proteins with other highly efficient conductive elements. These engineered systems will undergo comprehensive characterization using a range of biophysical, spectroscopic, and imaging techniques. Conductive biomaterials will be generated using these engineered systems through self-assembly and materials-processing methods, including 3D-printing. Finally, the materials will be characterized to assess their structure, stability, conductivity, and performance in the selected applications.

<https://www.e-prot.com/>

<http://personal.cicbiomagune.es/alcortajarena/>

16. Efecto del dopaje en la estructura cristalina y rendimiento electroquímico de óxidos laminares de manganeso

Director: Jorge Lago. *e-mail:* jorge.lago@ehu.es

Co-directora: Alazne Peña Zorrilla. *e-mail:* alazne.pena@ehu.es

Centro: Universidad del País Vasco UPV/EHU.

Resumen Los óxidos laminares de tipo Li_xMO_2 (donde $M = \text{Ni}, \text{Co}$) son componentes fundamentales de las baterías comerciales usadas en aparatos de electrónica de consumo (móviles, portátiles, ...) debido a su excelente comportamiento electroquímico (alta densidad de energía, estabilidad, ciclabilidad, ..). Su uso, sin embargo, se enfrenta a un relativamente alto costo de las materias primas y, en un medio-largo plazo, a la escasez y/o baja disponibilidad de las mismas, debido a su restringida distribución geopolítica. De ahí el enorme esfuerzo actual por encontrar alternativas eficientes, baratas y accesibles a estos sistemas.

La razonable similitud entre la química de Na^+ y Li^+ así como su también óptimo rendimiento electroquímico, hacen de los dispositivos basados en ion Na^+ la opción obvia a la hora de competir con aquellos basados en ion litio. Además, se trata de un elemento abundante, homogéneamente distribuido y, por tanto, mucho más económico que este. Así, los últimos 15 años han conocido un enorme desarrollo de los sistemas de almacenamiento electroquímico de energía basados en sodio, de manera que comienzan ya a comercializarse baterías basadas en este elemento (SIB's = sodium ion batteries). La eliminación de Ni o Co de la composición pasa por usar metales de transición más abundantes, baratos e inoocuos para el medio ambiente como puedan ser Mn o Fe.

Entre los óxidos laminares Na_xMO_2 , aquellos en los que $M = \text{Mn}$ o Mn/Fe se cuentan entre los sistemas catódicos más prometedores para SIB's debido a su reducido costo, 'amabilidad ambiental' y altas capacidades teóricas. Sin embargo, su aplicabilidad real a día de hoy es reducida debido a que su rendimiento electroquímico se ve enormemente

afectado por fenómenos indeseados (migración de Fe, distorsión Jahn-Teller del entono del Mn^{3+} , escasa estabilidad en aire, ...) que inducen distorsiones estructurales, reducen la movilidad del sodio y, en última estancia, reducen su eficiencia y ciclabilidad.

El objeto de este trabajo es preparar óxidos laminares de Na basados en Mn y Fe dopados con diversos cationes metálicos con un doble objetivo: por un lado, aumentar su estabilidad frente a la degradación atmosférica y, por otro, incrementar la estabilidad estructural en procesos de carga y descarga a altos voltajes (> 3.5 V) de forma que pueda aumentarse la capacidad del material gracias a la participación de procesos redox del anión óxido.

El proyecto implica, en primer lugar, la síntesis de los materiales a estudiar empleando diversas técnicas de estado sólido tanto en aire como en atmósfera controlada. Una vez preparados, estos materiales se caracterizarán estructural y morfológicamente mediante difracción de rayos X y microscopía electrónica de barrido analizándose, en particular, su estabilidad frente a la absorción de agua/ CO_2 . A continuación, se llevará a cabo un estudio electroquímico preliminar de las muestras sintetizadas con el objeto de determinar los niveles de dopaje que maximizan la eficiencia y ciclabilidad. Para aquellas composiciones de mejor comportamiento se realizará un estudio más exhaustivo de su respuesta electroquímica.

17. Estudio de la estructura cristalina y magnética de óxidos de interés tecnológico mediante difracción de neutrones y radiación sincrotrón

Director: Jorge Lago. *e-mail:* jorge.lago@ehu.eus

Co-director: José María Porro Aspiazua. *e-mail:* jm.porro@bcmaterials.net

Centro: Universidad del País Vasco UPV/EHU.

Centro externo: BCMaterials.

Resumen Las ortoferritas de tipo $R_{1-x}M_xFeO_3$ ($R =$ tierra rara; $M =$ metal alcalino; $0 \leq x \leq 0.66$) han sido ampliamente estudiadas en el pasado por la riquísima fenomenología encontrada en esta familia de compuestos y las posibles aplicaciones tecnológicas que de ellas derivan. Así, es de años que se conoce que estos materiales presentan transiciones de reorientación de spin en la que, inducido por un cambio en temperatura o un campo magnético aplicado, se produce un cambio en la orientación de los momentos magnéticos de los átomos de hierro. Es solo 'recientemente' que se ha descubierto que estas transiciones pueden manipularse mediante pulsos láser ultra-rápidos dando pie a la posibilidad de construir interruptores magneto-ópticos rapidísimos. Algunos de estos sistemas son, además, ferroeléctricos. Y, en muchos de ellos, al dopar el lantánido con estroncio, se producen interesantísimos procesos de ordenamiento de carga que han sido también profusamente estudiados.

El dopaje en la posición del hierro da lugar en algunos miembros de esta familia a procesos de segregación de distintas fases magnéticas (aun cuando el sistema es químicamente homogéneo) lo que da lugar a un exchange-bias (EB) de una magnitud sin precedentes. El exchange bias es un fenómeno que se produce en la interfase entre dos fases magnéticas de distinta naturaleza y es de vital importancia en la estabilización de la información en sistemas de almacenamiento magnético (discos duros, memorias *flash*).

En este proyecto, estudiaremos los cambios estructurales y procesos de ordenamiento magnético que se producen al variar la temperatura en una composición concreta de esta familia que presenta un EB elevado mediante técnicas de difracción de neutrones y de rayos X. El sistema presenta dos transiciones magnéticas sucesivas al enfriar por debajo de ambiente y es solo a temperaturas más bajas que la correspondiente a la segunda transición que observamos el EB. Por eso, es necesario entender muy bien la naturaleza de esta transición si queremos entender el origen y magnitud de este fenómeno en el

material.

Durante el estudio, el/la estudiante participará (si así lo desea) en las medidas de neutrones a realizar en noviembre en SINQ (swiss spallation neutron source, PSI, Suiza) y llevará a cabo el análisis de los datos resultantes (tanto de neutrones como de sincrotrón) para determinar la evolución térmica de la estructura cristalina y magnética del compuesto. Para ello, se formará en el uso de las herramientas informáticas disponibles para este tipo de estudios. Así mismo, llevará a cabo la caracterización básica del material mediante magnetometría *ac* y *dc*.

18. Magnetically modulated electrical response of active materials by additive manufacturing

Directora: Patricia Lázpita Arizmendiarieta. *e-mail:* patricia.lazpita@ehu.eus

Co-director: Nikola Perinka. *e-mail:* nikola.perinka@bcmaterials.net

Centro: Universidad del País Vasco UPV/EHU.

Centro externo: BCMaterials.

Resumen La digitalización de la sociedad y la economía requieren el despliegue de un creciente número de sensores de bajo coste, fácil implementación, fabricados a través de métodos de fabricación aditiva, y que estén basados en materiales respetuosos con el medio ambiente. Asimismo, estos sensores necesitan una fuente de energía adecuada para mantener su alimentación, funcionalidad e interconectividad. Por lo tanto, de manera paralela es necesario desarrollar nuevos sistemas de gestión y almacenaje de energía (*energy harvesting*) que puedan capturar la energía generada por otros dispositivos para alimentar los sensores.

En este trabajo se busca desarrollar materiales y conceptos innovadores para conseguir respuesta eléctrica inducida por la aplicación de un campo magnético. Estos materiales serán procesables por técnicas de fabricación aditiva 2D y 3D. La finalidad es construir dispositivos estructurados multicapa, formados por materiales dieléctricos, conductores y magnéticos, con prestaciones necesarias para poder generar energía suficiente para alimentar otros dispositivos como por ejemplo sensores inalámbricos. Igualmente, los materiales podrán ser implementados como sensores de campo magnético.

De forma a contribuir para una electrónica sostenible, los materiales seleccionados para los dispositivos serán reciclables, biodegradables (siempre que sea posible) y procesables en base a disolventes verdes.

19. Modelizado de fenómenos de Tribocorrosión

Directora: Ainara López Ortega. *e-mail:* ainara.lopez@tekniker.es

Tutor: A designar por la Comisión Académica

Centro externo: Tekniker

Resumen El objetivo principal del proyecto planteado es llevar a cabo el modelizado de fenómenos de corrosión que tienen lugar en diversas aplicaciones (p.ej., alta temperatura, corrosión marina, corrosión galvánica...) utilizando la herramienta COMSOL Multiphysics/módulo corrosión. Además, se aprenderán distintas metodologías de experimentación para evaluar la corrosión (ensayos electroquímicos, ensayos de envejecimiento acelerado, ensayos de corrosión a alta temperatura).

Tareas/objetivos:

Adquirir conocimientos del fenómeno de corrosión (tipos de corrosión, métodos de evaluación, normativa aplicable, etc.).

Adquirir conocimientos en el dominio de COMSOL *Multiphysics* y el módulo de corrosión.

Modelizado de procesos de corrosión a alta temperatura.

Modelizado de procesos de corrosión enfocados a distintas aplicaciones.
Adquirir conocimientos de técnicas de caracterización electroquímicas de corrosión y de envejecimiento acelerado.

Este trabajo puede contar con una ayuda económica: Se plantea un periodo de prácticas de unas 20 h/semana, a comenzar en noviembre/diciembre 2023, hasta terminar las clases, y su posterior continuidad a tiempo completo hasta la defensa del TFM. Durante el periodo de clases y prácticas (unas 20 h/semana): 565 €/mes. Durante la fase de TFM (ya sin clases) 20 h/semana con convenio y otras 20 h/semana con contrato laboral de 6 meses, con una percepción bruta conjunta de unos 1.046 €/mes (166,67 de bolsa + 880,95 de salario).

20. Oxygen Nanosensors for oxygen perfusion control in 3D in vitro lung models

Directora: Dorleta Jiménez de Aberasturi. *e-mail:* djimenezdeaberasturi@cicbiomagune.es

Tutor: A designar por la Comisión Académica

Centro externo: CIC biomaGUNE

Resumen In recent years, emphasis has been placed on the development of different technologies that facilitate the manufacture of models that realistically simulate the different parts of the respiratory system. The respiratory system is complex. The mechanics of ventilation involves the dynamic interaction of the lungs, chest wall and diaphragm. Blood from the right ventricle of the heart perfuses to the lungs. Pulmonary capillary plexuses envelop the alveolar sacs, where most of the gas exchange occurs, thus where the alveolar-capillary (air-blood) barrier is found. The pulmonary veins collect the oxygenated blood and return it to the left side of the heart for distribution through the circulatory system.

In this sense, the 3D bioprinting technique has emerged as a promising tool for the fabrication of such complex models but there are still several aspects that remain to be resolved. One important aspect is the introduction on in vitro lung models integrated biosensors that can monitor oxygen diffusion in 3D. Thus, the Master thesis propose here, relies on the design of nanosensors that can be integrated in 3D in vitro lung models which allow the measurement of oxygen over time. For that, first a selection of dyes that can be sensitive to oxygen levels will be tested. After selecting the most appropriate ones nanoparticles including such ligands will be prepare and analysed.

The student will not only explore different synthetic routes but also different characterization techniques to allow a good read-out of oxygen in the 3D models. For that, tissue models containing the fabricated sensors will be expose to different oxygen conditions by means of a controlled system of different levels of hypoxia and the resulting oxygen perfusion will be analysed.

21. Diseño de una nueva aleación de alta entropía: efecto de algunas variables de proceso y post-proceso en su microestructura

Directora: Teresa Guraya. *e-mail:* teresa.guraya@ehu.eus

Tutor: Luis Lezama. *e-mail:* luis.lezama@ehu.eus

Centro: Universidad del País Vasco, UPV/EHU.

Resumen Este proyecto consiste en realizar la caracterización estructural y microestructural de una aleación nueva de alta entropía. Estas aleaciones constituyen un nuevo paradigma en el diseño de aleaciones metálicas ya que en su composición no cuentan con un elemento netamente mayoritario, sino que está formadas por varios elementos, en proporciones molares semejantes. Esta característica composicional abre

un campo muy extenso de propiedades potenciales que, como en todo material, está intimidante ligadas a sus características estructurales y microestructurales.

La aleación se estudiará en condiciones de bruto de solidificación aplicando distintas velocidades de enfriamiento y, tras aplicar tratamientos térmicos a alguno de esos brutos de solidificación. Los materiales de estudio los proporciona el grupo de investigación eMERG, de la Escuela de Ingeniería de Bilbao. La caracterización a realizar consistirá en las siguientes actividades: preparación metalográfica de las muestras, estudio por técnicas de difracción de RX, microscopía óptica y microscopía electrónica combinada con EDX. Las diferentes estructuras y microestructuras se vincularán con las condiciones de fabricación (velocidad de enfriamiento) y post-porcesado (tratamiento térmico), utilizando los datos obtenidos y simulaciones ThermoCalc de la composición de la aleación.

El trabajo se realizará en la Escuela de Ingeniería de Bilbao, en los laboratorios del grupo de investigación eMERG y los diferentes servicios de SGIker de la UPV/EHU. La dedicación total del estudiante será la correspondiente a los 20 créditos ECTS que tiene el TFM en el programa del curso.

Este trabajo puede contar con una ayuda económica: La actividad está dotada con una bolsa económica de 1.000€ más las cuotas de SS que correspondieran por normativa, a cargo del grupo de investigación eMERG.

22. Estudio metalúrgico y de permeación a hidrógeno de la intercara producida entre una nueva aleación de alta entropía y un acero

Directora: Teresa Guraya. *e-mail:* teresa.guraya@ehu.eus

Tutor: Luis Lezama. *e-mail:* luis.lezama@ehu.eus

Centro: Universidad del País Vasco, UPV/EHU.

Resumen Este proyecto consiste en estudiar la intercara entre una aleación de alta entropía de la familia Cantor y un acero convencional. Las aleaciones de alta entropía presentan potencialmente interesantes propiedades barrera frente al hidrógeno. Por ello se quiere estudiar su unión con un acero convencional como paso preliminar para poderlas aplicar como recubrimiento.

El material bimetálico que contiene la intercara se ha producido por difusión en estado sólido, en procesos con y sin conformado plástico en caliente. Los materiales de estudio los proporciona el grupo de investigación eMERG, de la Escuela de Ingeniería de Bilbao. La caracterización microestructural consistirá en las siguientes actividades: preparación metalográfica de las muestras, estudio por técnicas de difracción de RX, microscopía óptica, microscopía electrónica combinada con EDX y microdurezas. La permeación al H se estudiará por técnicas electroquímicas en una celda de tipo Devanathan- Stachursky. Del análisis de resultados se evaluará la interdifusión de elementos ocurrida durante el proceso de soldadura, la formación de fases intermetálicas y la permeación a H. Los resultados se vincularán con las variables de los procesos de fabricación, temperatura, tiempo de permanencia a temperatura y magnitud de deformación plástica aplicada.

El trabajo se realizará en la Escuela de Ingeniería de Bilbao, en los laboratorios del grupo de investigación eMERG y los diferentes servicios de SGIker de la UPV/EHU. La dedicación total del estudiante será la correspondiente a los 20 créditos ECTS que tiene el TFM en el programa del curso.

Este trabajo puede contar con una ayuda económica: La actividad está dotada con una bolsa económica de 1.000€ más las cuotas de SS que correspondieran por normativa, a cargo del grupo de investigación eMERG.

23. Preparación de resinas fotocurables sostenibles para impresión 3D

Director: José Luis Vilas. *e-mail:* joseluis.vilas@ehu.es

Tutor: Cristian Mendes-Felipe. *e-mail:* cristian.mendes@bcmaterials.net

Centro: Universidad del País Vasco, UPV/EHU.

Centro externo: BCMaterials.

Resumen El mercado global de materiales de impresión 3D ha crecido exponencialmente en la última década. Hoy en día, los fotopolímeros representan casi la mitad de las ventas de materiales en todo el mundo. Sin embargo, la falta de resinas sostenibles, aplicables en la fotopolimerización en baño, que puedan competir con los materiales comerciales, limita la adopción generalizada de esta tecnología. El desarrollo de alternativas “verdes” es de gran importancia para reducir el impacto ambiental de la fabricación aditiva. Dentro de las diferentes evoluciones que se han llevado a cabo recientemente en el campo de los fotopolímeros sostenibles para la impresión 3D se encuentra la síntesis y aplicación de componentes de resinas de base biológica, agentes de refuerzo derivados de recursos naturales o el diseño de productos termoestables biológicamente degradables y reciclables. Así, este trabajo buscará la fabricación de nuevas resinas fotopolimerizables sostenible y aplicables a impresión 3D.

24. Innovación de Membranas para la Purificación del Agua y la Protección del Medio Ambiente

Director: José Luis Vilas. *e-mail:* joseluis.vilas@ehu.es

Tutor: Ander Reizabal. *e-mail:* ander.reizabal@bcmaterials.net

Centro: Universidad del País Vasco, UPV/EHU.

Centro externo: BCMaterials.

Resumen En este proyecto multidisciplinario, combinaremos el poder catalítico de las nanopartículas con tecnologías de fabricación aditiva de alta resolución para desarrollar una nueva generación de membranas para la purificación del agua y la protección del medio ambiente. El papel del estudiante en el proyecto abarcará cuatro tareas clave, cada una centrada en diferentes áreas de conocimiento. En primer lugar, se doparán polímeros termoplásticos con nanopartículas catalíticas y se crearán filamentos aptos para la impresión 3D. De manera paralela, se trabajará en el diseño y la optimización de estructuras 3D para maximizar el área superficial, mejorando así la eficiencia de nuestro sistema de purificación de agua y reduciendo su huella ambiental. Una vez caracterizado el material base y diseñada la estructura final, se utilizará la innovadora técnica de Electroescritura por Fusión (MEW-por sus siglas en ingles) para imprimir estructuras porosas de alta resolución con propiedades catalíticas. Finalmente, se llevarán a cabo pruebas de rendimiento para validar la efectividad de las membranas y proporcionar una evaluación de la funcionalidad.

Este proyecto tiene como objetivo abordar problemas ambientales desde una perspectiva sostenible y pragmática, con el fin de fusionar el desarrollo académico con los desafíos actuales.

25. Desarrollo de hidrogeles termoeléctricos iónicos para sensores térmicos flexibles y biocompatibles

Directora: Leire Ruiz Rubio. *e-mail:* leire.ruiz@ehu.eus

Co-director: Gabriel López. *e-mail:* gabrielalejandro.lopez@ehu.eus

Centro: Universidad del País Vasco, UPV/EHU.

Resumen Los materiales termoeléctricos iónicos son una clase de materiales que tienen la habilidad única de convertir energía térmica en energía eléctrica y viceversa. Este fenómeno se conoce como el efecto termoeléctrico. Los materiales termoeléctricos

iónicos son ampliamente utilizados en varias aplicaciones como generadores termoeléctricos, dispositivos termoeléctricos y enfriamiento termoeléctrico sistemas. La termoelectricidad se basa en el principio del efecto Seebeck, que establece que cuando hay una diferencia de temperatura entre un material, un voltaje eléctrico es generado. Este voltaje se puede aprovechar para producir electricidad.

El objetivo de este trabajo es desarrollar materiales termoeléctricos iónicos para la detección térmica en sistemas flexibles y biocompatibles basados en hidrogeles. Los hidrogeles han surgido como materiales prometedores para sensores térmicos flexibles debido a su suavidad y biocompatibilidad. Sin embargo, debido a que la resistencia y la capacitancia de los hidrogeles también son sensibles a la deformación, la humedad y los gases, además de la temperatura, sigue siendo un desafío eliminar las posibles interferencias de esas señales para los sensores térmicos basados en hidrogel.

Los materiales termoeléctricos iónicos proporcionan una nueva ruta para la detección térmica. Similar al efecto Seebeck en materiales termoeléctricos basados en electrones, los materiales iTE pueden generar una diferencia de potencial a través de la migración selectiva de iones bajo un gradiente de temperatura, es decir, el llamado efecto Soret. Debido a la alta flexibilidad de las matrices poliméricas y la abundancia de grupos funcionales disponibles, los materiales iTE son materiales prometedores para la detección térmica en sistemas flexibles y biocompatibles.

26. Fabrication of polymer based magneto-active composites with a sponge-like microstructure

Director: Andoni Lasheras. *e-mail:* andoni.lasheras@ehu.eu

Co-directora: Ana Catarina Lopes. *e-mail:* anacatarina.lopes@ehu.eu

Centro: Universidad del País Vasco, UPV/EHU.

Resumen In the current context of Internet of Things (IoT) there is a demand on the development of materials with active properties. Magnetic responsive materials, particularly the polymer-based ones, are drawing attention due to their capacity to combine soft and tailoring properties with the capacity to be wirelessly activated. The presence of micro or nano-sized magnetic particles in the polymer leads to the change of polymer properties and/or shape under the application of a magnetic field.

Despite the high number of works developed in this area, they leave out the importance of particle distribution and polymer microstructure on the impact of magneto-mechanical coupling and the final performance of the material.

In this project, we propose the incorporation of micro- magnetic particles with different distribution of particles in a sponge-like elastomeric matrix. The fabricated composites will be then fully characterized by analysing their microstructure, and by measuring their mechanical and magnetic properties. Further, the impact of composite porosity on the performance of the magnetic active layer will be extensively studied for their latter application in bioelectronics devices.

The work will be carried out in collaboration between the Group of Magnetism and Magnetic Materials (GMMMT) and the Macromolecular Chemistry Research Group (LABQUIMAC) in the Faculty of Science and Technology of the UPV/EHU.

27. Investigation of gap materials with near-field microscopy

Director: Rainer Hillenbrand. *e-mail:* r.hillenbrand@nanogune.eu

Tutor: José María Pitarke. *e-mail:* jm.pitarke@nanogune.eu

Centro externo: CIC nanoGUNE

Resumen The student will incorporate a group working on cutting-edge developments of near-field optical microscopy. The microscope at the heart of the project demonstrated

over the years its unique ability to explore optically structures ranging from 2D materials and engineered nanostructures to biological samples beyond diffraction limit.

With this project, the student will be involved in the fabrication of extremely thin samples (in the range of ~ 1 nm) embedded in optically active nanostructures. These nanostructures, called gap materials, have recently raised the attention of the scientific community with the belief that they could be ideal candidates for the study of light-matter interactions. During his stay, the student will have the opportunity to design such gap materials and tailor their optical properties via well-established characterization processes. The student will also have the opportunity to explore and control at the nanoscale these properties using a near-field optical microscope, combining uniquely both infrared and visible instrumentation.

The prospective student will engage in the following activities in the Nanooptics labs at CIC nanoGUNE.

- (i) Prepare specific gap-materials samples in collaboration with scientists of CIC nanoGUNE
- (ii) Characterize with state-of-the-art far-field Raman and IR spectroscopy the optical response of the fabricated samples
- (iii) Explore light-matter interactions within these gap materials at the nanoscale via near-field microscopy

This project can be tailored to focus either on chemistry or optical experimental work, depending on the interest and background of the prospective student.

28. Radiation damage in hybrid-perovskite materials

Director: Emilio Artacho. *e-mail:* e.artacho@nanogune.eu

Tutor: José María Pitarke. *e-mail:* jm.pitarke@nanogune.eu

Centro externo: CIC nanoGUNE

Resumen Hybrid organic-inorganic perovskite halide materials have proved to be extremely promising in various contexts, especially in photovoltaics, where they have reached very competitive efficiencies in a comparatively short period of research. An important challenge to the exploitation of those materials in solar panels is their short durability: their efficiency reduces significantly (typically by a half) in times of usage much shorter than the minimal lifespans required for many uses. The presence of a significant concentration of vacancies in those materials and their diffusion are behind that deterioration: the ion vacancies migrate towards the electrodes of the photovoltaic device thereby reducing the operational effective electrostatic potential. Important research efforts are being directed to improve durability by reducing vacancy mobility. Space agencies are interested in those materials for the solar panels of spacecrafts, but, of course, the low durability represents an important obstacle for their deployment. However, experiments putting the material under proton irradiation, emulating the radiative stress they would be suffering under cosmic rays and solar flares in space operation, show that these perovskites are very resilient to radiation damage, which is a very attractive feature for space application. One hypothesis is that the same ion-vacancy presence and mobility is behind the reduced damage they display. After a review of the literature on the topic, in this project we will use our radiation-damage simulation techniques and expertise to study radiation-damage processes. The aim is gaining deeper understanding of radiation resilience and see whether it can be improved (or at least maintained) while improving durability. We use computational physics tools, mainly first-principles calculations of condensed matter using density-functional theory, to describe the relevant processes. For regimes in which nuclear motion is still at velocities well under average electron speeds, we use first-principles molecular-dynamics

simulations to describe radiation damage knock-out processes and ensuing radiation cascades. For higher nuclear velocities the simulations are out of equilibrium, purely non-adiabatic, using time-dependent density-functional theory, propagating wave-functions in real time. The computational simulations are to be performed on supercomputers in high-performance- computer centres, using the Siesta first-principles simulations program. The candidate should be interested in the computational physics of materials, with knowledge of quantum and solid-state physics.

29. Numerical simulations of infrared (nano)spectroscopy for label-free diagnostics

Director: Martin Schnell. *e-mail:* m.schnell@nanogune.eu

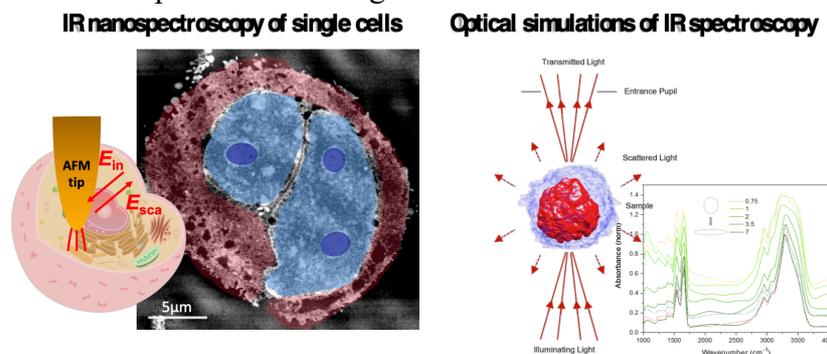
Tutor: José María Pitarke. *e-mail:* jm.pitarke@nanogune.eu

Centro externo: CIC nanoGUNE

Resumen Infrared (IR) spectroscopy is a promising way to detect cancer. This is because it can measure the chemical composition of cells and serum samples and use it to detect if cancer is present. This capability is interesting for clinical applications because current protocols for cancer detection can be greatly simplified, made cheaper and afforded a better prognosis. However, the sensitivity and spatial resolution of common IR spectroscopy is still insufficient and new approaches are needed. Our group seeks to apply numerical simulations to better understand IR spectroscopy-based pathology. Specifically, a commercial software package (Lumerical FDTD) will be applied to calculate the optical response of cell phantoms. This way we can better understand optical effects in the recorded data (such as scattering), which may help to improve the accuracy in the detection of cancer.

This master project foresees one of the following activities, and can be adapted to the interest of the student.

- (i) Use modern optical solvers to calculate IR spectroscopy on a computer and improve our understanding on how IR cell spectroscopy works
- (ii) Development of numerical models of state-of-the-art IR nanospectroscopy instrumentation to provide new insights into the structure of cancer cells.



30. Precise Positioning of Nitrogen-Vacancy Centers for Quantum Applications

Director: José Luis Vilas. *e-mail:* joseluis.vilas@ehu.es

Co-director: Xavier Vidal. *e-mail:* xavier.vidal@tecnalia.com

Centro externo: TECNALIA

Resumen The inherent properties of diamond make it an ideal material for a wide variety of quantum technologies. It is ideal for hosting spin defects that can be manipulated externally. Nitrogen vacancy (NV) centers are one of the diamond defects with exceptional properties for quantum technologies, and especially for quantum sensing. The growth conditions of the diamond hosting NV centers are essential for its quantum properties. In turn, the different methods of nitrogen inclusion, either by growth or

implantation, also have an impact on the quality of the diamond, which again affects the quantum properties of the NV centers. In addition, the demands and constraints imposed on the diamond and NV centers depend on the specific applications.

One of the current challenges in the development of diamond devices for quantum applications is the precise positioning of NV centers. One of the established methods for positioning NV centers in diamond is the implantation of nitrogen ions. However, implantation can cause significant damage to the diamond crystal, resulting in decreased spin coherence times. In addition, laborious masking may be required to achieve high accuracy and implantation profiles are limited to a depth of less than 10 nm. In addition, there are scalability limitations inherent to the implantation process due to limited creation efficiencies. Unlike implantation, in situ NV formation produces diamond without structural damage and no annealing step is necessary. In some cases, even the orientation of the NV center can be precisely controlled. Precise in-depth control of NV location with nanometer accuracy is achieved by delta doping with nitrogen during CVD growth. This method results in a statistical distribution of NVs in-plane, and the density can be easily adjusted by changing the doping concentration; however, precise in-plane defect positioning is not possible.

Recently, a maskless and implantation-free method for accurate in-plane positioning of NV centers has been demonstrated. The method uses a combination of FIB milling for structuring, plasma etching for damage removal, and subsequent nitrogen-doped diamond CVD overgrowth. The fabricated structures resulted in square cavities of $1\ \mu\text{m} \times 1\ \mu\text{m}$ and a depth of 700 nm. Low-methane, nitrogen-doped CVD overgrowth resulted in the in-situ formation of uniquely oriented NVs on each face. However, each face shows a different optically detected magnetic resonance (ODMR) contrast. Overall, the NV centers formed had approximately 76% negatively charged NV centers, those of interest for quantum technologies, but it was not analyzed whether the different facets showed a different NV-/NV0 ratio. In this project we intend to deepen our understanding of the NV properties generated with this protocol and the relationship of the cavity slope to the concentration of directional NV centers.

The work related to this project includes several or all these steps:

- CVD pure diamond growth and X-ray and Raman characterization.
- FIB milling to generate cavity arrays.
- Removal of FIB-induced damage by hydrogen plasma treatment.
- CVD nitrogen doped diamond overgrowth for direct formation of directional NV centers.
- Characterization of quantum properties including ODMR.
- Generation of cavities smaller than $1\ \mu\text{m} \times 1\ \mu\text{m}$.
- Control of the slope of the 4 facets of the V-shaped cavity.
- Control of the concentration of NV with respect to the angle of the cavity.

31. Desarrollo de composites termoestables sostenibles para la industria 4.0

Directora: Miren Blanco. *e-mail:* miren.blanco@tekniker.es

Co-directora: Leire Ruiz Rubio. *e-mail:* leire.ruiz@ehu.eus

Centro externo: Tekniker

Resumen Los materiales compuestos termoestables (formados normalmente por fibra larga de vidrio o carbono en combinación con una resina termoestable) son ampliamente utilizados por sus excelentes propiedades mecánicas. Sin embargo, estos compuestos no son fácilmente reciclables, ya que las resinas empleadas como matrices tienen enlaces covalentes que forman una tupida red que hace que sean no reciclables, lo que supone un grave problema cuando llegan al final de su vida útil. En este contexto, surgen las resinas



vitrímeras que derivan de polímeros termoestables, pero pueden ser reprocesadas o recicladas a través de la reorganización de la topología de la red mediante la reacción de intercambio de los enlaces covalentes dinámicos bajo estímulos externos como el calor, el pH o la luz ultravioleta. Existen diferentes tipos de enlaces dinámicos como el disulfuro, la imina o los uretanos.

El objetivo de este trabajo es desarrollar composites sostenibles mediante el empleo de fibra de carbono reciclada y resinas epoxi vitrímeras con enlaces de tipo imina, lo que supone una reducción del impacto ambiental de la producción de estos compuestos por el uso de material reciclado; y una solución a fin de vida para el uso de materiales compuestos, ya que los nuevos desarrollos serán reciclados fácilmente. El proyecto incluye el estudio del reciclado térmico de composites tradicionales para la obtención de la fibra de carbono y la adecuación de las fibras de carbono recuperadas mediante la aplicación de diversos tratamientos químicos superficiales (sizings), en caso de ser necesario. Además, contempla el desarrollo de las resinas vitrímeras y la preparación de los composites sostenibles, combinando las fibras recuperadas y las nuevas resinas. Finalmente, se contempla el análisis de la reciclabilidad de los composites desarrollados a fin de vida y el posible uso de las fibras y resina recuperadas para el desarrollo de nuevos composites.

Cabe resaltar que los compuestos desarrollados suponen una alternativa sostenible para las industrias usuarias de material compuesto, como son las aeronáuticas, transporte, industria aeroespacial,...

Trabajos Concertados

32. Sistemas extendidos constituidos por polioxometalatos que contienen lantánidos: propiedades ópticas y magnéticas

Director: Beñat Artetxe Arretxe. *e-mail:* benat.artetxe@ehu.eus

Co-directora: Itziar Oyarzabal Epelde. *e-mail:* itziar.oyarzabal@bcmaterials.net

Alumno: Unai Barrenechea Ruiz

Centro: Universidad del País Vasco UPV/EHU.

Centro externo: BCMaterials.

Resumen Uno de los campos más activos dentro de la química de polioxometalatos (POMs) es aquella que combina clústeres aniónicos metal-oxígeno lacunarios con iones lantánidos. Estos sistemas han demostrado ser capaces de sensibilizar la emisión luminiscente de los centros lantánidos a través del *efecto antena* e incluso inducir propiedades de imán molecular (SMM, Single Molecule Magnet). En este último ámbito, los POMs muestran ciertas ventajas frente a los compuestos de coordinación clásicos debido a que i) son moléculas robustas que mantienen su integridad en estado sólido y en disolución; ii) la incorporación de los lantánidos en las vacantes de los POMs da lugar a entornos de coordinación rígidos; y iii) los centros diamagnéticos de W(VI) aíslan los lantánidos de posibles acoplamientos magnéticos. Para el caso de las especies monosustituidas, representan el límite de la miniaturización de un imán, ya que un solo catión 4f es capaz de mostrar este comportamiento. La obtención de compuestos que presenten histéresis magnética a temperaturas cercanas a temperatura ambiente supondría un gran impacto en la Ciencia de Materiales, ya que estos dispositivos podrían ser muy útiles en áreas como la computación cuántica - los SMM son capaces de almacenar información a escala nanométrica-. A pesar de las altas barreras energéticas provenientes de la anisotropía magnética, los SMMs basados en lantánidos experimentan a menudo procesos rápidos de relajación cuántica. De forma alternativa, la manipulación de estos procesos podría dar lugar a *qubits* basados en espintrónica molecular lo que permitiría en un futuro operar mucho más rápido que cualquier ordenador clásico actual.

Este proyecto pretende generar estructuras extendidas a partir de POMs que contienen lantánidos mediante su unión a través de la coordinación de complejos diamagnéticos (Zn^{II}) puente de ligandos macrocíclicos tetradentados (p. ej., cyclam y derivados) a las superficies de los clústeres. Para ello, se emplearán sistemas cuyo comportamiento *SMM* (como de *qubit*) ha sido probado previamente (p. ej. $[LnW_{10}O_{36}]^{9-}$ o $[LnSi_2W_{22}O_{78}]^{13-}$, Ln = Eu -Yb) y se comprobará si tanto las propiedades ópticas como las magnéticas se mantienen intactas. El ensamblaje de dichos sistemas en redes bidimensionales permitirá organizar los lantánidos (responsables de las propiedades magnéticas, ópticas y cuánticas de los complejos de coordinación) de manera controlada, para su posterior exfoliación y deposición en superficies.

Así, este Trabajo de Fin de Master contempla la síntesis y caracterización de compuestos híbridos constituidos por polioxometalatos que contienen lantánidos, cuya estructura cristalina se determinará a partir de difracción de rayos X en monocristal. Finalmente se estudiarán sus propiedades luminiscentes en estado sólido, así como sus propiedades magnéticas (susceptibilidad dc y ac; magnetización, EPR).

33. Chitin nanofiber hydrogels as water remediation for wastewater

Directora: Gotzone Barandika Argoitia. *e-mail:* gotzone.barandika@ehu.eus

Co-director: Erlantz Lizundia. *e-mail:* erlantz.liizundia@ehu.eus

Alumna: Madalen Azpitarte Aretxabaleta

Centro: Universidad del País Vasco UPV/EHU.

Resumen Nanochitin is a bioderived colloid that presents remarkable physicochemical and mechanical properties and can be potentially applied into plethora of value-added applications. As opposed to the majority of petroleum-based polymers, which are neither renewable nor biodegradable, chitin nanoparticles enable the implementation of a circular materials economy by developing environmentally sustainable materials providing their renewability, biocompatibility, nontoxicity, and biodegradability. However, as conventional nanochitin isolation procedure use crustacean exoskeletons as a raw material, the demineralization process required jeopardizes both environmental and economic Sustainability.

Accordingly, the aim of the project is to isolate chitin nanofibers from fungi, as an underrated source with potential environmental benefits, and use them to fabricate hydrogels that will purify wastewater. To that end, chitin nanofibers will be extracted from mushrooms using different chemical treatments and surface modifications will be carried. In particular, NaOH and HCl will be used to isolate individual nanofibrils and obtain materials with diverse surface functionalities. The modified chitin nanofibers will be characterized by different methods (TEM, SEM, XRD, FTIR, Z potential) and assembled into hydrogels upon chemical cross-linking. Those chitin nanofiber hydrogels will also be characterized by the methods already mentioned and mechanical methods. Finally, their capacity of purifying wastewater of methylene blue, methyl orange and specific drugs will be analyzed by UV-Vis spectroscopy.

34. Funcionalization of metal-organic frameworks by bio-molecules

Directora: Gotzone Barandika Argoitia. *e-mail:* gotzone.barandika@ehu.eus

Co-director: Viktor Petrenko. *e-mail:* viktor.petrenko@bcmaterials.net

Alumna: Vanessa Galván de Cos

Centro externo: BCMaterials.

Resumen Metal-organic frameworks (MOFs) can be well-designed and constructed for various applications in gas storage and separation, heterogeneous catalysis, chemical sensing, and water remediation. Also MOF molecules have prospects to a variety of biomedical applications. Thus MOFs can be used for drug and protein delivery or fight tumor as well as treatment of amyloids aggregates. To extend their applications in bio-related fields, the functionalization of MOFs with biomolecules such as DNA, proteins, peptides, enzymes, and others is necessary to improve the bioactivity and biocompatibility of MOF-biomolecule hybrid materials and enhanced the biomolecular recognition, targeting, and cell penetration of materials using the characteristics of bound biomolecules.

This TFM work is devoted to the developing of protocol for modification of MOFs with bio-molecules to obtained materials with pre-defined properties and such a way to promote the engineering/bioengineering applications of MOFs. During the TFM work novel MOF-based hybrid materials will be fabricated and characterized in details. In frame of biofunctionalization of MOFs we will tune properties for structure- and function-specific applications. A variety of lab-available methods complemented by advanced neutron scattering techniques will be used for comprehensive study of complex hybrid materials.

The tasks into which the master's work will be divided are the following:

- 1) Synthesis of MOF-type materials and its characterization using X-ray diffraction, infrared spectroscopy, thermogravimetric analysis and determination of surface area.
- 2) Functionalization of MOFs by amino-acids, peptides, proteins, etc.
- 3) In-depth characterization of MOF-biomolecules hybrid materials will be performed by chemical, thermal and textural characterization techniques (thermogravimetry, diffraction, DLS, liquid NMR, DCS, X-ray fluorescence, AFM, BET, high pressure gas adsorption) as well as by spectroscopic characterization techniques (infrared and ultraviolet visible spectroscopy, electronic paramagnetic spectroscopy) and neutron scattering (mainly small-angle scattering and inelastic scattering techniques).

35. Hidrogeles electro-adaptativos para aplicaciones biomédicas

Directora: Leyre Pérez Álvarez. *e-mail:* leyre.perez@ehu.es

Co-directora: Ana Catarina Lopes. *e-mail:* anacatarina.lopes@ehu.eus

Alumno: Raúl Torre San Emeterio

Centro: Universidad del País Vasco, UPV/EHU.

Resumen El área de la medicina regenerativa está en una intensa evolución con nuevos abordajes basados en materiales inteligentes y multifuncionales. Son de particular interés hidrogeles que no solo sirven de soporte para el crecimiento celular en ambientes biomiméticos, sino que también contribuyen con estímulos fisiológicamente relevantes, tales como estímulos eléctricos, o que son capaces de sensorizar la actividad fisiológica. Estos hidrogeles deben degradarse y reabsorberse junto con la formación de tejido nuevo. La degradación del material implica una evolución continua de las propiedades del microambiente de las células y la velocidad a la que debe ocurrir es muy específica de cada tejido y de cada lugar del organismo. Por otra parte, hidrogeles microestructurados superficialmente han demostrado ser eficaces en forma de TENGs (nanogeneradores triboeléctricos), sistemas capaces de generar corriente eléctrica en respuesta a procesos de rozamiento. En base a esto, los hidrogeles estructurados se han convertido en potentes candidatos para futuras aplicaciones en bioelectrónica, energía biomecánica o simplemente detección táctil.

Este proyecto propone el desarrollo de una nueva generación de hidrogeles que modifiquen sus propiedades eléctricas y morfológicas en respuesta a un hipotético proceso de regeneración. Los materiales serán basados en hidrogeles biodegradables capaces de modular su degradación y en su caso la conductividad eléctrica. Además, también se explorará la capacidad de desarrollar nanogeneradores triboeléctricos biodegradables mediante la modulación de una doble capa eléctrica dinámica utilizando un hidrogel de superficie patronada.

El presente trabajo se llevará a cabo en el Grupo de Investigación en Química Macromolecular del Departamento de Química Física de la Universidad del País Vasco

36. 3D-printed biodegradable magnetoresponse hydrogels

Directora: Leyre Pérez Álvarez. *e-mail:* leyre.perez@ehu.es

Co-directora: Ana García Prieto. *e-mail:* ana.garciap@ehu.eus

Alumno: Sergio Martínez

Centro: Universidad del País Vasco, UPV/EHU.

Resumen Stimuli-responsive hydrogels and composites have evolved as soft materials with promising applications in several fields, including electronic devices, sensors, soft robots, and actuators. Biopolymeric gels have gained significant attention largely owing to their excellent biocompatibility and high water capacity. However, their actuation is usually driven by slow volume changes upon anisotropic swelling and deswelling, requiring an aqueous environment. Magnetoactive particles may serve as an effective

filler of hydrogels to introduce remote and contactless actuation in water and air. For practical applications, it is highly desired to process these tough hydrogels into structural elements with sophisticated three-dimensional (3D) architectures.

3D printing (additive manufacturing) provides an excellent, systematic tool to create programmed multimaterial designs. Recently, multimaterial 3D printing has been capturing attention because it enables the integration of multiple materials into one 3D object in a single printing process. When combined with stimuli-responsive polymers, additive manufacturing transforms into 4D printing by employing an extra time dimension compared to traditional 3D printing. Reports on multimaterial 4D direct ink printing have been limited to the last few years. Indeed, first attempts to 3D print magnetically active hydrogel structures have been made only recently. Accordingly, this work aims at developing magnetic hydrogels based on biodegradable polymers by 3D printing technology.

For this purpose, magnetic nanoparticles of Fe_3O_4 of different sizes will be prepared by thermal decomposition of $\text{Fe}(\text{oleate})_3$ precursors. The optimization of the nanoparticles coating will be performed in order to obtain suitable composites. A complete chemical, structural and magnetic characterization by means of thermogravimetry, X-ray diffraction, transmission electron microscopy and magnetization measurements will be carried out. Nanoparticles with the highest values of magnetic saturation will be used to print the composites. In this process, several printing configurations will be proposed with the aim of obtaining magneto-responsive materials that can perform as actuators or as magnetic separators.

37. CO_2 photocatalytic reduction into value added chemicals by composites of metal-organic materials and metal oxides

Director: Oscar Castillo. *e-mail:* oscar.castillo@ehu.eus

Co-director: Antonio Luque Arrebola. *e-mail:* antonio.luque@ehu.eus

Alumna: Raquel López Robles

Centro: Universidad del País Vasco, UPV/EHU.

Resumen Recently the research group has developed a new family of materials in which the chemistry of metal–organic and polyoxometalate clusters is merged to form enhanced photocatalytic materials (Figure 1). They have proved on the photocatalytic oxidation of organic substrates and now we are aimed at their use as photocatalytic materials for the reduction of CO_2 in valuable chemicals by producing composites of these photocatalytically active materials with a second cocatalyst (metal oxides) that directs the reduction pathway of CO_2 into highly reduced species such as alcohols. Long term stability tests will also be conducted.

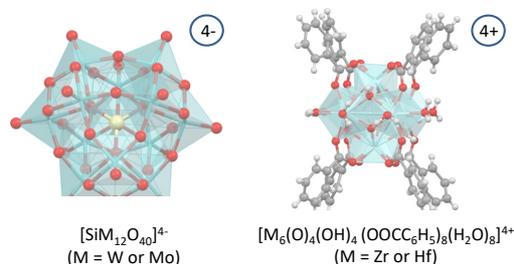


Figure 1. Charged cluster building units in $[\text{Zr}_6(\mu_3\text{-O})_4(\mu_3\text{-OH})_4(\mu\text{-OCC}_6\text{H}_5)_8(\text{H}_2\text{O})_8][\text{SiW}_{12}\text{O}_{40}]$ photocatalyst.

The work will involve the synthesis and characterization of the photocatalyst before and after the CO_2 reduction by means of electron microscopy, AE analysis, PXRD, XRF, FTIR spectroscopy and TGA measurements. The setup of the photocatalytic reaction and the follow up of the resulting reduced species by means of analytical techniques (gas and

liquid chromatography, $^1\text{H-NMR}$). It will require a comprehensive understanding of the chemistry going on these reactions and an extensive knowledge of the bibliography on this topic.

38. Influencia de la presión y la temperatura en las propiedades ópticas de (nano)materiales dopados con tierras raras y/o metales de transición

Director: Rafael Valiente Barroso. *e-mail:* rafael.valiente@unican.es

Co-director: Rosa Martín Rodríguez. *e-mail:* rosa.martin@unican.es

Alumno: Diego Pérez Francés

Centro: Universidad de Cantabria.

Resumen El uso de sondas ópticas para la medida de diferentes magnitudes es un campo de gran interés. A los nanotermómetros se suman las sondas ópticas de fuerza, presión o pH. La resolución espacial requiere reducir su tamaño, eliminando de paso el carácter invasivo.

Este Trabajo Fin de Máster (TFM) tiene como objetivo la síntesis y caracterización de nuevos nanomateriales dopados con tierras raras y/o metales de transición, que presentan aplicación en el campo de los sensores ópticos de presión.

En particular, en este TFM se centrará en nanopartículas de NaYF_4 dopado con diferentes concentraciones de Mn^{2+} , Er^{3+} y/o Yb^{3+} . Dichos materiales se caracterizarán mediante difracción de rayos X, espectroscopía Raman y microscopía electrónica de transmisión. Seguidamente, se realizará un estudio espectroscópico detallado mediante luminiscencia, excitación y tiempo de vida, con el fin de analizar la influencia de parámetros como el tamaño de partícula, la concentración de dopantes o la estructura cristalina en las propiedades ópticas. Por último, se estudiará la dependencia de las propiedades ópticas con la presión y la temperatura mediante el uso de celdas de diamante, criostatos o platinas calefactoras.

Se realizará un estudio comparativo con otros sensores existentes basados en Cr^{3+} , Sm^{2+} , Eu^{2+} , entre otros.

39. Mejora de la sostenibilidad de la tecnología solgel

Directora: Amaia Martínez Goitandia. *e-mail:* amaia.martinez@tekniker.es

Tutor: A designar por la Comisión Académica

Alumno: Ibai Intxaurraga Ibaiondo

Centro externo: Tekniker

Resumen El proyecto busca mejorar aspectos de sostenibilidad de la tecnología solgel, centrándose en dos puntos principales: profundizar en formulaciones en base agua y estudiar nuevas tecnologías de curado como el láser para obtener fases cristalinas sin necesidad de curados térmicos a alta temperatura.

Tareas/objetivos:

Estado del arte de solgel sostenible basándose en los puntos a tratar (i) water-based solgel y (ii) curados alternativos (centrado en láser);

Estudio de formulaciones solgel en base agua para la obtención de óxidos de titanio, aluminio y silicio;

Estudio de las técnicas de aplicación más adecuadas para las formulaciones solgel en base agua - Curados alternativos (láser) sobre diferentes sustratos;

Caracterización óptica y de durabilidad de los recubrimientos estudiados.

Este trabajo puede contar con una ayuda económica: Se plantea un periodo de prácticas de unas 20 h/semana, a comenzar en noviembre/diciembre 2023, hasta terminar las clases, y su posterior continuidad a tiempo completo hasta la defensa del TFM. Durante

el periodo de clases y prácticas (unas 20 h/semana): 565 €/mes. Durante la fase de TFM (ya sin clases) 20 h/semana con convenio y otras 20 h/semana con contrato laboral de 6 meses, con una percepción bruta conjunta de unos 1.046 €/mes (166,67 de bolsa + 880,95 de salario).

40. Litografía óptica por escritura directa: fabricación y límites

Director: Rafael Morales Arboleya. *e-mail:* rafael.morales@ehu.es

Co-director: José María Porro. *e-mail:* jm.porro@bcmaterials.net

Alumno: Armando Fraile Sanz

Centro: Universidad del País Vasco, UPV/EHU.

Centro externo: BCMaterials

Resumen

La litografía óptica es una técnica de producción que permite fabricar estructuras con un amplio rango de tamaños, desde las micras hasta los centímetros. Abarcando cuatro órdenes de magnitud, es una herramienta empleada en diferentes campos de la ciencia y la tecnología como la física, química, ciencia de materiales, biotecnología o biomedicina. La técnica estándar requiere la preparación de máscaras con el dibujo de los motivos que se quieren transferir a la fotorresina, iluminando toda la muestra con una lámpara ultravioleta. La fabricación de las máscaras es un proceso costoso en tiempo y dinero, de ahí que en los últimos años hayan surgido alternativas que no utilizan máscaras, exponiendo la resina con el barrido de un láser focalizado. Estos equipos de escritura directa por láser son muy útiles en el diseño y optimización de microestructuras.

El objetivo de este trabajo es establecer los procesos de escritura de un equipo de litografía directa por láser, determinar la resolución espacial, contrastar diferentes tipos de fotorresina y transferir los patrones litografiados en microestructuras metálicas. En este trabajo se utilizarán técnicas de litografía óptica, evaporación de materiales en alto vacío y microscopía electrónica de barrido.

Tareas a desarrollar:

- Entrenamiento en el manejo de los equipos de litografía óptica y evaporación por haz de electrones.
- Diseño de patrones para analizar los límites de resolución espacial de las fotorresinas.
- Depósito de láminas delgadas de metales y proceso de ‘lift-off’ de la resina.
- Caracterización de las estructuras metálicas mediante microscopía óptica y electrónica de barrido.
- Análisis y discusión de los resultados.
- Informe del trabajo realizado.

41. Synthesis, functionalization and characterization of silica-based nanosystems for photodynamic therapy

Directora: Virginia Martínez Martínez. *e-mail:* virginia.martinez@ehu.es

Co-directora: Ruth Prieto Montero. *e-mail:* ruth.prieto@ehu.es

Alumno: Lucía Herrera Fuente

Centro: Universidad del País Vasco UPV/EHU.

Resumen Photodynamic therapy (PDT) is a clinically approved and minimally invasive procedure to fight against cancer but also can be used to treat infections caused by virus, bacteria and fungi. PDT involves the use of light, a sensitive drug, denoted photosensitizer (PS), and environmental oxygen.

The PS, usually an organic chromophore is activated under suitable light irradiation and generates ROS (Reactive Oxygen Species) mainly singlet oxygen, a cytotoxic species able to damage nearby cells or bacteria. However, most of PS are organic chromophores

with limited solubility in aqueous media and lack of selectivity for target tissues. These limitations can be overcome by the use of functionalized nanoparticles. For that, PSs will be anchored to the external surface of different silica-based nanosystems (i.e. silica nanoparticles or Laponite-nanoclay).

During the TFM, silica nanoparticles of different sizes (25, 90 and 150 nm) with diverse functional groups at their external surface will be synthesized. In a second step, they will be functionalized with PS and other molecules of interest such as PEG, folic acid or small monosaccharide molecules to enhance their stability in water and improve the selectivity to target cancer cells or bacteria. All these aspects will lower the required photoactive drug doses, minimizing side effects and consequently increasing the therapeutic efficacy. The final nanosystems will be fully characterized by TEM, SEM, DLS and FTIR and their photophysical properties including the generation of singlet oxygen will be also studied by absorption and fluorescence spectroscopies.

42. Fabricación microfluídica de nanopartículas poliméricas cargadas con polioxometalatos para su aplicación en terapias contra el cáncer

Directora: Leire Ruiz Rubio. *e-mail:* leire.ruiz@ehu.eus

Co-director: Beñat Artetxe Arretxe. *e-mail:* benat.artetxe@ehu.eus

Alumno: Yeray Yuri Plasencia

Centro: Universidad del País Vasco, UPV/EHU.

Resumen Los polioxometalatos (POMs) son clústeres aniónicos formados por un metal de transición y oxígeno que constituyen una clase de compuestos inorgánicos con una gran versatilidad composicional, estructural y electrónica. Uno de los campos de aplicación más activos en los últimos años es la biomedicina. Entre los numerosos estudios que se han publicado, el anión tipo Wells-Dawson de fórmula general $[\alpha\text{-P}_2\text{M}_{18}\text{O}_{62}]^{6-}$ (M = Mo, W) ha demostrado ser un inhibidor directo de la unión de Sox2 al ADN por repulsión de cargas. El Sox2 es un marcador celular proteínico que aparece sobrepresado en las células de cáncer de mama que desarrollan resistencia a la tradicional terapia hormonal con tamoxifeno. Por consiguiente, la inhibición de la unión de Sox2 al ADN reduciría la resistencia al tratamiento con tamoxifeno facilitando un mejor desenlace clínico para la paciente. Teniendo en cuenta estos datos se plantea la posibilidad de la aplicación del POM de tipo Wells-Dawson como un elemento a tener en cuenta para el tratamiento de este tipo de patologías.

A pesar de los resultados positivos arrojados por los estudios *in vitro*, es necesario desarrollar un método que permita que el compuesto llegue al lugar de actuación deseado *in vivo* por lo que debe i) incorporarse a la célula deseada, ii) atravesar la membrana alcanzando el citoplasma y iii) llegar al núcleo cumpliendo con una dosis terapéutica efectiva. Esto sumado a las características propias del compuesto como su citotoxicidad, estrecho rango de estabilidad de pH, naturaleza inorgánica, y propiedades redox, entre otras, representa un reto a la hora de diseñar un método que permita superar estos inconvenientes. En trabajos recientes se han desarrollado nanogeles poliméricos de quitosano cargados con el POM con el objetivo de que éste fuese transportado de forma eficiente hasta la célula. La carga y liberación controlada del fármaco en función del pH fue efectiva. Sin embargo, la elevada carga superficial de las partículas, hacía que estas se agregaran e interaccionarían con las proteínas del medio de cultivo celular dando así lugar a su precipitación instantánea. Este hecho imposibilita su empleo directo por lo que se necesita buscar una alternativa más viable.

El presente proyecto se centra en la mejora de los sistemas microfluídicos en la fabricación de nanopartículas poliméricas en base a polisacáridos (NPs) cargadas con POMs para su aplicación en terapias contra el cáncer de mama. Se investigarán y

optimizarán parámetros microfluídicos para garantizar la producción de NPs de tamaño uniforme y su capacidad de liberación controlada de POM. La investigación se enfoca en la eficacia terapéutica y la reducción de efectos secundarios al usar estas NPs en terapias contra el cáncer. Este enfoque innovador presenta un gran potencial en el campo de la medicina oncológica al mejorar la precisión y la eficacia de la administración de fármacos en el tratamiento del cáncer.

43. Síntesis y caracterización de óxidos laminares para baterías de iones de sodio

Directora: Idoia Ruiz de Larramendi. *e-mail:* idoia.ruizdelarramendi@ehu.eus

Co-directora: Eider Goikolea. *e-mail:* eider.goikolea@ehu.eus

Alumno: Mario Escribano

Centro: Universidad del País Vasco, UPV/EHU.

Resumen La alarmante situación energética mundial reclama un modelo energético basado en energías renovables, medioambientalmente más limpias, pero su naturaleza intermitente demanda el desarrollo de sistemas de almacenamiento de energía más eficientes. En este contexto, se enmarca la presente propuesta, dedicada al desarrollo de materiales avanzados para sistemas de almacenamiento de energía electroquímica basados en sodio. A lo largo de la investigación propuesta se explorarán materiales innovadores que serán diseñados a fin de ser implementados en baterías de iones de sodio. Concretamente se desarrollará una nueva familia de óxidos laminares de fórmula general $\text{Na}_2\text{Mn}_3\text{yMyO}_7$ ($M = \text{Ti, V, Mo}$). Se diseñarán los métodos de síntesis tratando en todo momento de controlar tanto el coste como el impacto medioambiental. Todos los materiales serán analizados en profundidad, inicialmente a través de técnicas de rutina (DRX, ICP, SEM), para posteriormente emplear técnicas más avanzadas que permitan elucidar los mecanismos de reacción involucrados para cada sistema. Concretamente, se llevará a cabo un estudio electroquímico de los materiales mediante técnicas potenciodinámicas en celdas herméticas de tipo Swagelok o ‘coin cell’, inicialmente en configuración de media celda. Se realizarán estudios de voltamperometría cíclica, ciclado galvanostático a diferentes velocidades de carga y descarga, análisis de la ciclabilidad y medidas de impedancia EIS con objeto de analizar la cinética de difusión iónica. Además, si se considera oportuno, se realizarán estudios de caracterización post-mortem para determinar la evolución de los productos de carga y descarga durante el funcionamiento de las baterías.

44. Preparación y modificación post-sintética de redes metal-orgánicas microporosas para su aplicación en la captura y transformación de CO_2

Director: Garikoitz Beobide Pacheco. *e-mail:* garikoitz.beobide@ehu.eus

Co-directora: Sonia Pérez Yáñez. *e-mail:* sonia.perez@ehu.eus

Alumno: Ane Ciruela Zunzunegi

Centro: Universidad del País Vasco, UPV/EHU.

Resumen El objetivo principal del proyecto persigue el desarrollo de nuevas redes metal-orgánicas porosas (metal-organic frameworks, MOF) diseñadas para lograr una adsorción eficiente de especies gaseosas de interés tecnológico y medioambiental (CO_2 , CO, NO_x ...). En concreto, estos materiales serán preparados utilizando como ligandos aniones policarboxílicos aromáticos, y como nodos, iones de metales de transición del grupo 4 (Ti, Zr, Hf). Esta combinación dotará de una gran estabilidad química y térmica a los materiales obtenidos, siendo una característica deseable en aplicaciones que requieren condiciones exigentes. Para vigorizar la funcionalidad, los MOF desarrollados serán sometidos a procesos de modificación post-sintética a objeto de generar estructuras heterometálicas con posiciones de coordinación insaturadas y/o anclar grupos funcionales

que permitan establecer interacciones específicas y selectivas con las especies diana que se quieran capturar. La reversibilidad de los procesos de captura y la medición de una señal física proveerá al material de un comportamiento estímulo-respuesta deseable, por ejemplo, en el desarrollo de sensores químicos.

El desarrollo del proyecto, además de una etapa preparativa, implicará la caracterización química y estructural de los materiales preparados mediante técnicas de difracción de rayos X, análisis elemental, microscopía electrónica de barrido y espectroscopía de fotoemisión de rayos X. Para validar los materiales se llevarán a cabo experimentos de adsorción física de gases y se analizará su potencial como fotocatalizador en la transformación de CO₂.

45. Formulación de tintas serigráficas basadas en óxidos metálicos para aplicaciones en electrónica impresa

Director: F. Javier del Campo. *e-mail:* javier.delcampo@bcmaterials.net

Co-directora: Idoia Ruiz de Larramendi. *e-mail:* idoia.ruizdelarramendi@ehu.eus

Alumno: Jon Velasco

Centro externo: BCMaterials.

Resumen Los óxidos metálicos son compuestos de gran interés por sus propiedades (foto)catalíticas y semiconductoras. Concretamente, en el ámbito de la electrónica, los óxidos metálicos resultan clave en el funcionamiento de transistores y diodos. Sin embargo, los procesos de fabricación basados en micro- y nanotecnologías requieren ambientes controlados y procesos de fabricación energéticamente intensivos y de gran complejidad, lo que conlleva unos costes de infraestructura y un impacto medioambiental muy elevados.

En este proyecto, se propone desarrollar tintas basadas en óxidos metálicos, principalmente óxido de cobre, y formular tintas aplicables mediante serigrafía. La serigrafía engloba un conjunto de técnicas de impresión por contacto que permite transferir materiales (tintas) a un sustrato para dar lugar a estructuras funcionales. En este proyecto, se fabricarán, mediante serigrafía, una serie de estructuras de test que permitirán el estudio de las propiedades eléctricas y electroquímicas de los óxidos producidos. El objetivo último es controlar el ancho de banda, o bandgap, de los materiales depositados, y valorar su aplicabilidad en la construcción de fotodetectores y fotocatalizadores.

46. Simulación del comportamiento superelástico en las aleaciones con memoria de forma (SMA) y su implementación en la plataforma COMSOL

Director: José María San Juan Núñez. *e-mail:* jose.sanjuan@ehu.es

Co-director: José Fernando Gómez Cortés. *e-mail:* josefernando.gomez@ehu.eus

Alumno: Ander Abadin Hernández

Centro: Universidad del País Vasco, UPV/EHU.

Resumen Las aleaciones con memoria de forma (SMA) son materiales inteligentes que presentan el efecto memoria de forma y el efecto superelástico, cuando la transformación martensítica termoelástica es inducida térmicamente o mediante una tensión, respectivamente. Debido a estas propiedades, son objeto de un gran número de aplicaciones como sensores y actuadores en múltiples sectores industriales. No obstante, el comportamiento de las SMA no depende solo de su microestructura sino que, además, responde a un sistema multivariable, σ , ϵ , T, etc., y es fuertemente no-lineal. Por ello, el diseño y la modelización del comportamiento termo-mecánico de las SMA es extremadamente complejo.

En el presente trabajo de TFM, se realizará inicialmente una revisión bibliográfica de los diferentes modelos matemáticos de comportamiento no-lineal de las SMA, analizando

críticamente sus planteamientos funcionales. A continuación se realizará la simulación del comportamiento superelástico de las SMA mediante el modelo que se considere más adecuado. Para ello, se plantearán las ecuaciones funcionales no-lineales correspondientes a las diferentes variables y se implementará su cálculo por elementos finitos mediante la plataforma COMSOL Multiphysics. Se aplicará esta metodología para la simulación del efecto superelástico en pilares sometidos a compresión y en probetas en tensión.

Los resultados de las simulaciones se compararán con resultados experimentales de compresión y tensión obtenidos en diversas SMA, con el fin de obtener una información retro-alimentada del comportamiento superelástico, y su dependencia con los diferentes parámetros, que permita optimizar los modelos de simulación.

47. Comportamiento a alta temperatura de intermetálicos de Ti-Al-W para la industria aeronáutica

Director: José María San Juan Núñez. *e-mail:* jose.sanjuan@ehu.es

Co-director: María Luisa Nó Sánchez. *e-mail:* maria.no@ehu.es

Alumno: Claudia Álvarez González

Centro: Universidad del País Vasco, UPV/EHU.

Resumen Los materiales intermetálicos de TiAl constituyen una gran innovación en el mundo aeronáutico y están siendo empleados en las turbinas de baja presión (LPT) de los motores de los aviones, con la consiguiente reducción de peso y aumento del rendimiento, lo que contribuye al objetivo “Clean Sky” de la Comunidad Europea. Actualmente hay dos aleaciones de TiAl que están siendo empleadas en las LPT, la GE4822 y la TNM, que trabajan en el rango de 700-750°C. No obstante, la comunidad científica está trabajando en la mejora de las prestaciones de dichas aleaciones y en el desarrollo de nuevas gamas de aleaciones de TiAl que permitan trabajar a más altas temperaturas que las actuales, con el fin de incrementar el rendimiento de los motores.

En el presente trabajo de TFM se abordará el estudio del comportamiento a alta temperatura de una nueva familia de aleaciones de TiAl-W, en colaboración con el centro de excelencia CEMES-CNRS de Toulouse (Francia). Se estudiarán los procesos de relajación asociados a la movilidad de defectos (puntuales, dislocaciones y juntas de grano), mediante espectroscopía mecánica, hasta 1200°C. En paralelo se realizará una caracterización de la microestructura mediante microscopía electrónica de barrido con EDX y EBSD. Se medirán los espectros de fricción interna y de módulo dinámico en función de la temperatura y a diferentes frecuencias, entre 5×10^{-2} y 5 Hz. Se analizarán dichos espectros para obtener las energías de activación de los procesos de relajación observados. Ello permitirá la comprensión de los mecanismos atómicos responsables de los mecanismos de movilidad de defectos térmicamente activados que son responsables de las propiedades mecánicas a altas temperaturas.

A lo largo del TFM, la estudiante de Máster aprenderá el manejo de las diferentes técnicas experimentales, así como la metodología de tratamiento numérico y análisis de los datos, y su interpretación en términos de los modelos a escala atómica.

48. Estudio de comportamiento a corrosión sobre aportes EHLA de doble capa en CRA en diferentes ratios de AISI 316l e Inconel 625.

Director: Rodolfo González Martínez. *e-mail:* rgonzalez@azterlan.es

Tutora: Izaskun Gil de Muro Zabala. *e-mail:* izaskun.gildemuro@ehu.eus

Alumno: Jorge Estébanez Pisonero del Pozo

Centro externo: AZTERLAN

Resumen Las superficies metálicas en contacto con medios corrosivos se fabrican en Aleaciones Resistentes a la Corrosión (en adelante Corrosion Resistant Alloys o CRAs). Estas aleaciones son de elevado coste debido al precio de los elementos de aleación necesarios para garantizar que el componente soporte su vida en servicio sin corroerse. Cuando es viable técnica y económicamente, estos componentes sometidos a ambientes marinos se fabrican en soluciones multimaterial, se ahorran costes separando la función estructural de la función superficial. Sólo la superficie en contacto con el fluido corrosivo es una CRA, mientras que el resto del material suele ser un acero estructural de bajo coste. El desarrollo de Tecnologías habilitadoras Claveb (en adelante Key Enabling Technologies o KETs) como la Deposición del metal a Alta Velocidad por laser (en adelante, Extreme High-Speed Laser application o EHLA) ha generado un escenario en el que este concepto de componente multimaterial puede llevarse un paso más allá con componentes de mayor rendimiento en servicio y menor coste.

El objetivo de este trabajo de fin de máster es desarrollar un estudio amplio sobre la vida en servicio de un componente multimaterial (disco de freno) fabricado por EHLA con dos capas en distintas condiciones de material, dentro de una horquilla definida por las aleaciones AISI 316L e Inco 625.

Finalmente, estudiar la influencia de la fabricación de capa superficial por EHLA en dos capas con un estudio realizado con la deposición de capa única.

La metodología esta compuesta por cuatro fases: Fase I: Diseño y fabricación de aportes por EHLA, Fase II: Caracterización de los distintos aportes, Fase III: Resultados y discusión y Fase IV: Conclusiones.

49. Influencia de la velocidad de deposición en aportes CRA (LMD vs EHLA) en el comportamiento a corrosión en entornos marinos

Directora: Maite Insausti Peña. *e-mail:* maite.insausti@ehu.eus

Tutora: Enara Mardaras Andrés. *e-mail:* emardaras@azterlan.es

Alumno: Nerea Fernández Lavilla

Centro externo: AZTERLAN

Resumen El desarrollo de las Tecnologías habilitadoras (en adelante Key Enabling Technologies o KETs) como la Deposición de Metal mediante Laser (en adelante Laser Metal depositon, LMD o laser cladding) ha generado un escenario en el concepto de componente Multimaterial que puede llevarse un paso más allá hacia componentes de mayor rendimiento en servicio y menor coste para ambientes hostiles.

En concreto, el LMD permite un mejor control de la cantidad de material aportado que la soldadura por arco. Esta minimización de consumo de material facilita que se puedan emplear Aleaciones Resistentes a la corrosión (en adelante Corrosion Resistant Alloys o CRAs) de mayor precio sin incrementar el coste total de producto. Además, cuando la aleación de recargue se aporta en forma de polvo, el LMD otorga una gran libertad en el control de la composición química y, por tanto, de la resistencia a la corrosión y el precio. Con objetivo de avanzar el espectro de aplicaciones en las que el empleo de soluciones multimaterial son técnicamente factible y económicamente rentable, este trabajo busca estudiar las diferencias de comportamiento en servicio (agua de mar) de componentes multimaterial fabricados por la tecnología LMD y tecnología EHLA (en adelante High

Speed Laser Metal Depositon, EHLA) para regular la resistencia a la corrosión por picadura en términos de Pitting Resistance Equivalent Number (PREN) dentro de la horquilla definida por las aleaciones AISI 316L e Inco 625 sobre un sustrato de 42CrMo4.

Las diferencias entre las tecnologías de LMD y EHLA se centra en la velocidad de avance y espesor de capa.

Por lo tanto, en conclusión, el estudio se centrará en la influencia que tiene la velocidad de fabricación de los aportes y el espesor de capa en el comportamiento en servicio.

La metodología esta compuesta por cuatro fases: Fase I: Diseño y fabricación de aportes por EHLA, Fase II: Caracterización de los distintos aportes, Fase III: Resultados y discusión y Fase IV: Conclusiones.

50. Estudio de comportamiento electroquímico en aleaciones metálicas en ambientes hostiles; polarización, impedancias, permeación de hidrógeno y comportamiento en servicio

Director: Rodolfo González Martínez. *e-mail:* rgonzalez@azterlan.es

Tutora: Izaskun Gil de Muro Zabala. *e-mail:* izaskun.gildemuro@ehu.eus

Alumno Jon Renobales Zuazola

Centro externo: AZTERLAN

Resumen La transición energético-climática gira en torno a la preocupación existente por el cambio climático y los problemas medioambientales y sociales ocasionados por la generalización de un modelo producto y de transporte basado en combustibles fósiles. Los inconvenientes de este modelo, como la contaminación del aire, el consumo excesivo de energía, los efectos sobre la salud o la saturación de las vías de circulación han provocado una voluntad colectiva por encontrar alternativas que ayuden a paliar dichos efectos y disponer de una futura economía vasca neutra en carbono. Se trata de una economía que impulsará nuevos empleos verdes y que servirá, a su vez, como motor de crecimiento económico sostenible.

El transporte y almacenamiento de energía como las baterías de ion litio, el almacenamiento y transporte de hidrogeno en materiales metálicos, sistemas de almacenamiento químico como las centrales termo solares de sales fundidas, offshore y oil&gas, sigue siendo uno de los retos a superar de cara a poder distribuir y almacenar de forma eficaz y segura la energía.

El desarrollo de nuevos materiales avanzados y procesos de fabricación eficientes para sistemas de conversión y almacenamiento de energía son clave.

En esta línea, el objetivo de esta investigación se centra en el estudio de comportamiento electroquímico de materiales avanzados para transporte y almacenamiento de energía.

La metodología está compuesta por cuatro fases: Fase I: Diseño y fabricación de materiales avanzados, Fase II: Caracterización de los materiales, Fase III: Resultados y discusión y Fase IV: Conclusiones.

51. Breaking stable -N=P- bonds in organic compounds, polymers and single-chain nanoparticles

Directora: Leire Ruiz Rubio. *e-mail:* leire.ruiz@ehu.eus

Co-director: José A. Pomposo. *e-mail:* josexo.pomposo@ehu.es

Alumno: Marta Aldecoa

Centro: Universidad del País Vasco, UPV/EHU.

Resumen The present Master Thesis is devoted to the development of new methods for breaking stable azaylide (-N=P-) bonds in organic model compounds, polymers and single-chain nanoparticles. In particular, based on successful preliminary experiments,

we will investigate the use of trimethylsilanol (and similar compounds) as selective reagent(s) for the stable azaylide rupture reaction. These new methods will be evaluated for potential application in polymer recycling.

52. Sensor microfluídico flexible para la detección de amonio y sulfuro de hidrógeno en materiales de construcción

Director: Fernando Benito López. *e-mail:* fernando.benito@ehu.eu

Tutor: Luis Lezama. *e-mail:* luis.lezama@ehu.es

Alumno: Emilio García Rodríguez

Centro: Universidad del País Vasco, UPV/EHU.

Resumen Es importante poder analizar los contaminantes presentes en los materiales de construcción, ya que esto puede generar ahorros significativos a largo plazo. La detección temprana de contaminantes permite tomar medidas preventivas y correctivas para evitar daños mayores en los bienes culturales, lo que resulta en ahorros en los costos de restauración. Al analizar estos contaminantes, se puede identificar qué materiales están más expuestos a riesgos y establecer estrategias adecuadas para mitigar su impacto. Esto no solo ayuda a evitar gastos excesivos en reparaciones y conservación, sino que también prolonga la vida útil de los bienes culturales, reduciendo la necesidad de futuras intervenciones o sustituciones. Además, el análisis de los contaminantes en los materiales de construcción permite seleccionar alternativas más sostenibles y menos costosas, reduciendo el uso de los químicos necesarios para realizar las restauraciones pertinentes, hecho que el medioambiente agradece y que se encuentra en dentro del marco de la Agenda 2030.

En particular los exudados de amoníaco y el sulfuro de hidrógeno pueden afectar la durabilidad y la integridad de los materiales de construcción. De hecho, el nitrato de amonio es el principal compuesto dañino detectado en piedra y murales pintados. Por otra parte, el sulfuro de hidrógeno es uno de los principales causantes de la corrosión de cementos.

En este trabajo se diseñará, desarrollará y se aplicará un sensor microfluídico flexible para la monitorización del impacto del amonio y sulfuro de hidrógeno en los materiales de construcción. El sistema microfluídico consta de un líquido iónico en forma de ionogel que es empleado como soporte del reactivo, cloruro de cobre (II) (CuCl_2). El uso de CuCl_2 como reactivo viene suscitado porque el cobre (II) forma un complejo metálico estable con el amonio de color azul, que contrasta con el color amarillo que tiene el cloruro de cobre (II) y un precipitado marrón con el sulfuro de hidrógeno (H_2S) que puede ser detectado colorimétricamente. Se prevén las siguientes tareas.

Tarea 1: Rediseño y fabricación del dispositivo microfluídico.

Tarea 2: caracterización del material sensorico (ionogel) colorimétricamente. Estudio de las cinéticas de reacción en base al cambio de color. Estudio de las cinéticas de recuperación en base al color. Límites de detección y cuantificación del sensor.

Tarea 3: Validación del dispositivo en materiales de construcción. Generación de un “set-up” para el análisis de los materiales de construcción. Verificación del funcionamiento del dispositivo.

Tarea 4: Realización del informe, presentación de los resultados por medio de presentaciones orales en el group meeting. Preparación de posible publicación.

53. Influencia de la presión en la distorsión tipo Jahn-Teller del Cu^{2+} en el compuesto $\text{Rb}_2\text{CuCl}_4(\text{H}_2\text{O})_2$: piezocroismo y distorsión local

Director: Fernando Rodríguez González. *e-mail:* rodriguf@unican.es

Co-director: Rafael Valiente Barroso. *e-mail:* valientr@unican.es

Alumno: Luis Gómez Fernández

Centro: Universidad de Cantabria.

Resumen El compuesto $\text{Rb}_2\text{CuCl}_4(\text{H}_2\text{O})_2$ es un compuesto cristalino con estructura tetragonal (Grupo de espacio $P4_2/mnm$), en el que el Cu^{2+} forma un complejo heteroligando hexacoordinado por 4 iones Cl^- y 2 moléculas de H_2O en posición trans. En condiciones ambiente, el complejo presenta una distorsión local ortorrómbica alargada debido al efecto Jahn-Teller, en la que los cuatro enlaces cortos ($2 \text{Cl}^- + 2 \text{H}_2\text{O}$) forman la base y dos enlaces largos Cu-Cl el eje de orden 2 del pseudooctaedro alargado. El enlace largo Cu-Cl intercambia dinámicamente con el enlace corto Cu-Cl, de manera correlacionada con los complejos vecinos, formando así una estructura antiferrodistorsiva que minimiza la energía elástica de la distorsión. A alta presión la estructura se desestabiliza dando lugar a una geometría local comprimida de simetría tetragonal en el que el eje de orden 4 está formado por los enlaces $\text{H}_2\text{O}-\text{Cu}-\text{H}_2\text{O}$ y el plano cuadrado del complejo lo forman los 4 enlaces Cu-Cl, en consonancia con las predicciones de la teoría Jahn-Teller. En este trabajo se pretende estudiar cómo cambia la estructura electrónica asociada con los niveles 3d del Cu^{2+} con la presión, poniendo el énfasis en la transición complejo alargado complejo comprimido que tiene lugar a 16 GPa [Phys. Rev. B 70, 214104 (2004)], y el piezocroísmo asociado a dicha transición. La estructura electrónica se determinará a través de la técnica de absorción óptica bajo presión, empleando celdas de yunque de diamante (DAC).

54. Influencia de la estructura de grano en la determinación de la temperatura superconductor de un óxido cerámico tipo YBaCuO

Director: Fernando Rodríguez González. *e-mail:* rodriguf@unican.es

Alumno: Nineli Abramizde

Centro: Universidad de Cantabria.

Resumen La superconductividad es un estado electrónico en la que un material adquiere resistencia eléctrica nula y es diamagnético perfecto. Ambas propiedades resultan decisivas a la hora de catalogar un material como superconductor a una presión y temperatura dadas. Asimismo, la determinación de la temperatura crítica superconductor puede ser controvertida si el material es policristalino y los granos de material están sujetos a tensiones o cambios composicionales. Este trabajo aborda la caracterización de un óxido de cobre superconductor (YBaCuO) centrándose en la curva de imanación $M(T)$ para establecer un método de determinar la temperatura crítica y su relación con la distribución y deformaciones promedio de los granos de material. Para ello se utilizarán diferentes técnicas experimentales como difracción de rayos X, microscopía electrónica (SEM), medidas de susceptibilidad magnética y de conductividad eléctrica. En el trabajo, se realizará un estudio de correlación entre los resultados obtenidos por las diferentes técnicas.

55. Estructuras porosas basadas polimolibdatos y el complejo Cu(DMC).

Director: Juan Manuel Gutiérrez-Zorrilla. *e-mail:* juanma.zorrilla@ehu.es

Alumno: Irati Albea Carreño

Centro: Universidad del País Vasco, UPV/EHU.

Resumen La síntesis y caracterización de compuestos híbridos basados en POMs y complejos metalorgánicos que contienen Cu(II) y ligandos N_4 -tetradentados, se encuadra dentro de la línea de investigación 'Química de Polioxometalatos' del Departamento de Química Orgánica e Inorgánica de la Facultad de Ciencia y Tecnología de la Universidad del País Vasco (UPV/EHU).



El Trabajo de Fin de Máster propuesto consistirá en la preparación de compuestos robustos con alta porosidad susceptibles de ser empleados como adsorbentes y catalizadores. Para ello, se llevará a cabo la reacción entre polioxomolibdatos y complejos metalorgánicos que contengan Cu(II) y el ligando macrocíclico 1,8-dimetil-1,4,8,11-tetraazaciclotetradecano (DMC). El trabajo comprende las siguientes fases:

1. Síntesis de compuestos tipo $[\{Cu(DMC)\}_x\{POM\}] \cdot nH_2O$.
2. Caracterización química (TGA) y espectroscópica (FT-IR) de los compuestos sintetizados.
3. Caracterización estructural mediante difracción de rayos X tanto en muestra policristalina como en monocristal, para el estudio exhaustivo de la estructura cristalina del polianión, así como del empaquetamiento cristalino tridimensional presentado por los compuestos de estudio.