



UNIVERSIDAD
DE GRANADA

PROPUESTA DE TRABAJO FIN DE GRADO

GRADO EN QUÍMICA

CURSO 2023/2024



Facultad de Ciencias

PROPUESTA DEL DEPARTAMENTO/EMPRESA

DATOS BÁSICOS DEL TFG

TÍTULO TFG	Catalizadores basados en nitruro de carbono grafítico para la degradación fotocatalítica de fármacos antitumorales en agua		
CÓDIGO TFG ⁽¹⁾	QI-21	TIPOLOGÍA ⁽²⁾	A2

⁽¹⁾ A rellenar por la dirección del dpto que vendrá dado como: código del dpto-Nº de orden (p.e.: QA-01)

⁽²⁾ Al final del documento se encuentran las diferentes tipologías

OFERTADO POR	Profesor del Departamento	<input checked="" type="checkbox"/>
	Profesor del Departamento junto con Empresa o Institución	<input type="checkbox"/>

DATOS DE LA ENTIDAD (donde se va a realizar el TFG)

CENTRO (Departamento, institución o empresa)	Facultad de Ciencias, Departamento de Química Inorgánica		
DIRECCIÓN POSTAL ⁽³⁾	Av. Fuente Nueva, s/n		
LOCALIDAD ⁽³⁾	Granada	C.P. ⁽³⁾	18071

⁽³⁾ A rellenar en el caso de realizarse en una empresa

DATOS DEL TUTOR

TUTOR 1 (Tutor académico en caso de realizar el TFG en una empresa o institución)			
NOMBRE Y APELLIDOS	Luisa María Pastrana Martínez		
DEPARTAMENTO	Química Inorgánica		
CARGO ⁽⁴⁾	Investigadora Ramón y Cajal		
TELÉFONO	958248489	E-MAIL	lpastrana@ugr.es

Rellenar en caso de haber un segundo tutor

TUTOR 2			
NOMBRE Y APELLIDOS	Álvaro Pérez Molina		
DEPARTAMENTO	Química Inorgánica		
CARGO ⁽⁴⁾	Investigador Predoctoral		
TELÉFONO	958240506	E-MAIL	alpemo@ugr.es
TUTOR DE LA EMPRESA O INSTITUCIÓN (Rellenar en caso de realizar el TFG en una empresa o institución)			
NOMBRE Y APELLIDOS			
TITULACIÓN			
TELÉFONO		E-MAIL	

⁽⁴⁾ Catedrático, Profesor Titular, Profesor Contratado Doctor,....

MEMORIA DE LA PROPUESTA DE TFG

Introducción.

El número de pacientes que requieren quimioterapia aumenta cada año, lo que resulta en un incremento en el consumo de fármacos antitumorales. Las estaciones de depuración de aguas residuales (EDARs) convencionales no están capacitadas para la total eliminación de estos fármacos y, como consecuencia, son vertidos y acumulados en aguas superficiales. La presencia de fármacos antitumorales en agua supone un grave riesgo para los seres vivos y el medioambiente, debido a sus efectos tóxicos, mutagénicos, teratogénicos y genotóxicos. Los procesos avanzados de oxidación (PAOs) permiten la degradación completa o parcial de los contaminantes orgánicos gracias a la acción de radicales altamente oxidantes, tales como el radical hidroxilo ($\text{HO}\cdot$). La fotocatalisis heterogénea es una de las PAOs más prometedoras debido a su elevada eficacia (alto grado de mineralización de los contaminantes), es una tecnología respetuosa con el medio ambiente (no utiliza oxidantes químicos) y puede utilizar radiación solar. El nitruro de carbono grafitico ($\text{g-C}_3\text{N}_4$) es un semiconductor polimérico libre de metales que ha atraído una significativa atención como fotocatalizador activo bajo radiación visible debido a su composición no tóxica, precursores de bajo coste y abundantes, elevada estabilidad térmica y resistencia a la corrosión y reducido *band gap* (2.7 eV). Sin embargo, presenta ciertas desventajas como una baja conductividad y alta tasa de recombinación electrón-hueco. El dopado con heteroátomos metálicos o no metálicos es una estrategia efectiva para modificar la química superficial de este tipo de semiconductores, así como sus propiedades electrónicas, lo que resultará en unas propiedades fotocatalíticas mejoradas.

Objetivos.

El objetivo principal de este Trabajo de Fin de Grado (TFG) es el desarrollo de fotocatalizadores basados en $\text{g-C}_3\text{N}_4$ con alto rendimiento bajo radiación solar/visible, para la eliminación eficiente de fármacos antitumorales altamente tóxicos y no biodegradables.

La consecución de este objetivo vendrá determinada por el progresivo cumplimiento de los objetivos específicos previstos:

1. Desarrollo de una metodología de síntesis y dopado de $\text{g-C}_3\text{N}_4$ con heteroátomos metálicos (Ag, Pd, Zn) o no metálicos (S, B, O, P).
2. Extensa caracterización fisicoquímica de los catalizadores preparados.
3. Estudio del comportamiento fotocatalítico de los materiales sintetizados para la eliminación de fármacos citostáticos en agua.
4. Optimización de las condiciones de reacción, como la carga de catalizador, tipo de radiación utilizada, concentración del contaminante, pH, etc.
5. Análisis y correlación de las propiedades fisicoquímicas y fotocatalíticas.

Resumen de los trabajos a realizar por el estudiante/Plan de trabajo.

Para el desarrollo de este TFG se sintetizarán materiales basados en $\text{g-C}_3\text{N}_4$ y serán dopados con diferentes heteroátomos, utilizando diferentes metodologías de síntesis, como métodos hidrotermales, térmicos, sol-gel, entre otros. Una vez obtenidos los materiales se caracterizarán utilizando diferentes técnicas, con el objetivo de determinar sus propiedades físicas (porosidad, área superficial, morfología, fases cristalinas, etc.), químicas (composición y química superficial) y ópticas (*band gap*). Finalmente, la actividad fotocatalítica de los materiales preparados se evaluará en la degradación de diversos fármacos antitumorales (5-fluorouracilo, ciclofosfamida, metotrexato, etc.) en disolución acuosa utilizando diferentes tipos de radiación (UV-Vis cercana, solar y/o visible) y sistemas de reacción (geometría, potencia, etc.).

Una vez cumplimentado deberá ser enviado junto con el resto de las propuestas del departamento en formato pdf (Word transformado en pdf, NO escaneado) al correo: gradoquimica@ugr.es. El nombre de cada fichero debe de coincidir con el código del TFG.

TIPOLOGÍA⁽²⁾

A. Trabajos de investigación con orientación básica o aplicada, cuya temática se relacione con los contenidos de la titulación, como:

- A1. Estudio de casos, teóricos o prácticos, relacionados con la temática del Grado, a partir de material ya disponible en los Centros.
- A2. Trabajos experimentales, de toma de datos de campo, de laboratorio, etc.
- A3. Elaboración de guías prácticas relacionadas con la temática del Grado.

B. Trabajos científico-técnicos representativos del ejercicio profesional para el que capacita la titulación, como:

- B1.** Elaboración de un informe o un proyecto de naturaleza profesional.
- B2.** Elaboración de un plan de empresa.
- B3.** Simulación de encargos profesionales.

C. Trabajos bibliográficos (**C**)