



UNIVERSIDAD
DE GRANADA

PROPUESTA DE TRABAJO FIN DE GRADO

GRADO EN QUÍMICA

CURSO 2022/2023



Facultad de Ciencias

PROPUESTA DEL DEPARTAMENTO/EMPRESA

DATOS BÁSICOS DEL TFG

TÍTULO TFG	Captura y separación de compuestos orgánicos volátiles por materiales flexibles luminiscentes		
CÓDIGO TFG ⁽¹⁾	QI-05	TIPOLOGÍA ⁽²⁾	A2

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

⁽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)	Departamento de Química Inorgánica, Facultad de Ciencias		
DIRECCIÓN POSTAL ⁽³⁾	Av. Fuentenueva 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	Antonio Rodríguez Diéguez		
DEPARTAMENTO	Química Inorgánica		
CARGO ⁽⁴⁾	Profesor Titular de Universidad		
TELÉFONO	958248524	E-MAIL	antonio5@ugr.es

Rellenar en caso de haber un segundo tutor

TUTOR 2			
NOMBRE Y APELLIDOS	Iñigo Javier Vitorica Yrezabal		
DEPARTAMENTO	Química Inorgánica		
CARGO ⁽⁴⁾	Investigador Post-Doctoral		
TELÉFONO	958248524	E-MAIL	vitorica@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.

Los compuestos orgánicos volátiles (siglas en inglés VOC), son moléculas orgánicas (con la excepción del CO y CO₂) en estado de vapor las cuales tienen propiedades tóxicas, cancerígenas y contaminantes para los seres vivos. Los VOCs se pueden clasificar según su estructura molecular y sus grupos funcionales, siendo los más frecuentes los alcanos, alquenos, hidrocarburos aromáticos y compuestos orgánicos con heteroátomos. VOCs están omnipresentes como consecuencia de la actividad humana, industrial o por la descomposición aeróbica o anaeróbica de compuestos residuales orgánicos. Dichas moléculas se caracterizan por su alta volatilidad debido a una alta presión de vapor, bajos puntos de ebullición, y una baja solubilidad en agua representando un peligro para el medio ambiente y para la salud del hombre.

La exposición humana a dichos compuestos puede causar una variedad de efectos en la salud, como irritación en las vías respiratorias y ojos, náuseas, vómitos y pérdida de coordinación, y hasta daños en hígado, riñón y cáncer.

Los compuestos orgánicos volátiles son considerados por la organización mundial de la salud (WHO) como contaminantes de espacios interiores debido a que las fuentes más comunes de dichas moléculas son productos manufacturados como pinturas, disolventes, barnices, desinfectantes, pesticidas, etc. La pronta detección, separación y captura de tales moléculas es fundamental para mitigar los riesgos asociados una exposición prolongada a tales moléculas.

Los polímeros de coordinación (siglas en inglés MOF o CP) son una familia de materiales muy versátiles compuestos por nodos metálicos unidos por ligandos, formando redes cristalinas de 1, 2 y 3 dimensiones. Los polímeros de coordinación están caracterizados por su alta capacidad de adsorción debido a la presencia de poros o canales en su estructura. Las características físico-químicas de dichas cavidades pueden ser moduladas durante el proceso de selección de los centros metálicos y de los ligandos para potenciar la interacción adsorbato-adsorbente. Los polímeros de coordinación puede clasificarse como rígidos o flexibles según su respuesta ante la presencia de un analito. Los polímeros de coordinación rígidos presentan una estructura estable, siendo ideales para la adsorción de VOCs en altas capacidades. En cambio, los polímeros de coordinación flexibles son capaces de modificar su estructura para integrar adsorbato en la red cristalina. Esta característica confiere a los polímeros de coordinación de una alta capacidad selectiva en el proceso de adsorción. (Serre, *Chem. Sci.*, **2022**, *13*, 13978)

Objetivos.

1. Síntesis y caracterización de nuevos polímeros de coordinación flexibles para la detección selectiva de moléculas tipo VOCs.
2. Caracterización estructural de los compuestos aislados por medio de métodos de difracción de rayos X en monocristal y polvo cristalino.
3. Estudio de la adsorción de compuestos tipo VOCs en los polímeros de coordinación mediante métodos de esponja cristalina y posterior caracterización por difracción de rayos-x en monocristal y polvo
4. Estudio de las propiedades fotoluminiscentes del par adsorbato-adsorbente para la detección y cuantificación para aplicaciones sensoriales.

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

Inicialmente, se llevará a cabo el diseño y síntesis de nuevos polímeros de coordinación flexibles a base de metales con esferas de coordinación flexible y/o configuración electrónica de capa llena (ej. Na, K, Cu, Zn, Er, Tb y Dy) y ligandos previamente seleccionados con el fin de obtener estructuras flexibles fotoluminiscentes. Para la síntesis de estos sistemas se utilizarán varios métodos sintéticos tradicionales (hidro/solvotermal) y otros más innovadores como, asistido por microondas.

Todos los sólidos cristalinos obtenidos, una vez aislados, serán caracterizados mediante diversas técnicas fisicoquímicas para conocer:

- La estructura molecular mediante difracción de rayos X (DRX) (monocristal y polvo), microscopía electrónica de transmisión (TEM), y resonancia magnética nuclear (RMN). En caso necesario, se llevarán a cabo experimentos complementarios utilizando instalaciones nacionales (ALBA) o internacionales (ESRF y Diamond Light Source) de radiación de sincrotrón con el fin de obtener la estructura cristalina.
- Su composición química (espectrofotómetro de emisión óptico con plasma de acoplamiento inductivo como fuente ionización (ICP-OES), espectroscopía infrarroja (IR) y análisis termogravimétrico (TGA)).
- Las propiedades de adsorción y porosidad latente (isotermas de adsorción/desorción de nitrógeno).
- Las propiedades ópticas (espectroscopia UV-Visible).

Finalmente, se estudiará tanto su capacidad para detectar y separar moléculas orgánicas volátiles, así como su posterior aplicabilidad como sensores químicos.

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**)