



1. DATOS BÁSICOS DEL TFG:

Título: Síntesis de semiconductores activos bajo luz visible para la degradación fotocatalítica de contaminantes emergentes en el agua

Descripción general (resumen y metodología):

Introducción

La creciente presencia de contaminantes emergentes, como los compuestos farmacéuticos, en aguas residuales urbanas e industriales representa un desafío importante para la salud ambiental y humana, ya que estos compuestos no son completamente eliminados mediante los tratamientos convencionales por lo que requieren tecnologías avanzadas que permitan su degradación eficaz y sostenible [1].

En este contexto, la fotocatalisis heterogénea ha surgido como una alternativa prometedora, al utilizar energía luminosa para activar semiconductores capaces de generar especies reactivas de oxígeno, responsables de la oxidación y mineralización de los contaminantes [2]. La eficiencia de estos materiales depende en gran medida de su estructura electrónica, capacidad de absorción de luz y la eficiencia en la separación y transporte de las cargas fotoinducidas.

Entre los semiconductores más utilizados destacan el dióxido de titanio (TiO₂) y el óxido de zinc (ZnO), debido a su estabilidad química, bajo costo y alta actividad bajo radiación ultravioleta [3,4]. Sin embargo, su limitada absorción en el rango visible del espectro solar ha impulsado el desarrollo de estrategias de modificación estructural y electrónica. Entre estas, la introducción controlada de vacantes de oxígeno en su red cristalina ha demostrado ser especialmente eficaz, ya que estas vacantes actúan como trampas electrónicas que favorecen la separación de cargas y extienden la actividad fotocatalítica hacia longitudes de onda mayores.

En este proyecto se propone la síntesis de materiales semiconductores modificados estructuralmente, activos bajo luz visible, mediante estrategias como el dopado y la generación de vacantes de oxígeno. A través de estas modificaciones, se busca optimizar su actividad fotocatalítica en la degradación de compuestos farmacéuticos presentes en medios acuosos, contribuyendo así al desarrollo de tecnologías sostenibles para el tratamiento avanzado de aguas residuales.

Metodología experimental

Los materiales semiconductores se sintetizarán mediante el método hidrotermal, utilizando precursores metálicos adecuados para la obtención de óxidos como TiO₂ y ZnO. Las condiciones de síntesis, incluyendo temperatura, pH y tiempo de reacción serán controladas con el objetivo de favorecer la formación de fases cristalinas y permitir modificaciones estructurales como el dopado y la generación de vacantes de oxígeno. Posteriormente, los materiales serán lavados, secados y calcinados a temperaturas moderadas para mejorar su estabilidad y actividad fotoinducida. La caracterización de los materiales obtenidos se llevará a cabo mediante difracción de rayos X (DRX) para la identificación de fases cristalinas, microscopía electrónica de barrido (SEM) y de transmisión (TEM) para el análisis morfológico y de tamaño de partícula, espectroscopía UV-Vis de reflectancia difusa (DRS) para determinar la absorción óptica y calcular la energía de banda prohibida y espectroscopía de fotoelectrones inducidos por rayos X (XPS) para analizar la composición superficial y la presencia de vacantes de oxígeno. Finalmente, los materiales serán evaluados como fotocatalizadores en la degradación de compuestos farmacéuticos bajo irradiación de luz visible en condiciones controladas.

Tipología: Trabajos experimentales, de toma de datos de campo o de laboratorio.

Objetivos planteados:

Objetivo general

Desarrollar y optimizar materiales semiconductores modificados estructuralmente, activos bajo luz visible, para su aplicación en la degradación fotocatalítica de compuestos farmacéuticos presentes en medios acuosos.

Objetivos específicos

- Sintetizar semiconductores basados en TiO₂ y ZnO mediante técnicas controladas que permitan la incorporación de dopantes metálicos o no metálicos, así como la generación de vacantes de oxígeno.
- Caracterizar los materiales obtenidos mediante técnicas fisicoquímicas (DRX, XPS, UV-Vis, SEM/TEM, Fisisorción de N₂), para establecer la relación entre sus propiedades ópticas, estructurales y superficiales de los semiconductores con su actividad fotocatalítica.
- Evaluar la actividad fotocatalítica de los materiales sintetizados en la degradación de fármacos modelo (como sulfametoxazol, tetraciclina u otros) en disolución acuosa bajo luz visible.
- Establecer la relación entre las modificaciones estructurales del semiconductor y su rendimiento fotocatalítico.
- Proponer rutas de diseño para futuros fotocatalizadores basados en semiconductores modificados, enfocados en el tratamiento sostenible de aguas residuales contaminadas con compuestos emergentes.

Bibliografía básica:

Bibliografía

- [1] G.R. Quadra, H. Oliveira de Souza, R. dos S. Costa, M.A. dos S. Fernandez, Do pharmaceuticals reach and affect the aquatic ecosystems in Brazil? A critical review of current studies in a developing country, *Environmental Science and Pollution Research* 2016 24:2. 24 (2016) 1200–1218. <https://doi.org/10.1007/S11356-016-7789-4>.
- [2] W.S. Koe, J.W. Lee, W.C. Chong, Y.L. Pang, L.C. Sim, An overview of photocatalytic degradation: photocatalysts, mechanisms, and development of photocatalytic membrane, *Environmental Science and Pollution Research* 2019 27:3. 27 (2019) 2522–2565. <https://doi.org/10.1007/S11356-019-07193-5>.
- [3] J.M. Aguirre-Cortés, Á. Munguía-Ubierna, A. Moral-Rodríguez, A.F. Pérez-Cadenas, F. Carrasco-Marín, E. Bailón-García, Size-miniaturization of TiO₂-ZrO₂ coupled semiconductors to develop highly efficient visible- driven photocatalysts for the degradation of drugs in wastewater, *Applied Surface Science*. 670 (2024) 160609. <https://doi.org/10.1016/j.apsusc.2024.160609>.
- [4] C. Byrne, G. Subramanian, S.C. Pillai, Recent advances in photocatalysis for environmental applications, *Journal of Environmental Chemical Engineering*. 6 (2018) 3531–3555. <https://doi.org/10.1016/j.JECE.2017.07.080>.

Recomendaciones y orientaciones para el estudiante:

Plazas: 1

2. DATOS DEL TUTOR/A:

Nombre y apellidos: ESTHER BAILÓN GARCÍA

Ámbito de conocimiento/Departamento: QUÍMICA INORGÁNICA

Correo electrónico: estherbg@ugr.es

3. COTUTOR/A DE LA UGR (en su caso):

Nombre y apellidos: Adriana Moral Rodriguez

Ámbito de conocimiento/Departamento: QUÍMICA INORGÁNICA

Correo electrónico: amoral@ugr.es

4. COTUTOR/A EXTERNO/A (en su caso):

Nombre y apellidos:

Correo electrónico:

Nombre de la empresa o institución:

Dirección postal:

Puesto del tutor en la empresa o institución:

Centro de convenio Externo:

5. DATOS DEL ESTUDIANTE:

Nombre y apellidos:

Correo electrónico: