



1. DATOS BÁSICOS DEL TFG:

Título: Desarrollo de un método de espectrometría de masas para la detección de fármacos en agua

Descripción general (resumen y metodología):

La presencia de fármacos en el medio acuático es una preocupación creciente a nivel global debido a su potencial impacto en los ecosistemas y la salud humana. Estos compuestos llegan al agua a través de diversas fuentes, como el vertido de aguas residuales de hogares, hospitales e industrias farmacéuticas, así como la eliminación inadecuada de medicamentos. Dada su actividad biológica, incluso a concentraciones bajas, es crucial desarrollar métodos analíticos sensibles y selectivos para su detección y cuantificación. Los resultados obtenidos contribuirán a una mejor comprensión de la presencia de fármacos en el ciclo del agua y a la evaluación de posibles riesgos.

La metodología empleada se centrará en el desarrollo experimental de un método de análisis que involucre, en primer lugar, una técnica de tratamiento de muestra adecuada y, en segundo lugar, el acoplamiento entre cromatografía líquida y espectrometría de masas. En este sentido, se evaluará la conveniencia de emplear metodologías univariantes o multivariantes para la optimización y puesta a punto del método analítico. Además, se emplearán herramientas estadísticas que permitan identificar efectos significativos y tendencias en las respuestas estudiadas.

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

Objetivos planteados:

El objetivo general es desarrollar y evaluar una metodología analítica basada en cromatografía líquida acoplada a espectrometría de masas (LC-MS/MS) para la identificación y cuantificación de fármacos de uso común en muestras de agua.

Los objetivos específicos son:

- Revisar la literatura científica existente sobre la presencia de fármacos en aguas de diverso uso y procedencia con objeto de tener una visión panorámica del estado actual del problema planteado.
- Seleccionar un conjunto representativo de fármacos teniendo en cuenta su interés ambiental, frecuencia de uso, persistencia y potencial toxicidad.
- Evaluación de diferentes herramientas de tratamiento de muestra que permitan lograr una máxima recuperación de los fármacos a la vez que una mínima coextracción de potenciales interferentes con el objetivo de mejorar la sensibilidad y selectividad del análisis.
- Establecer y optimizar los parámetros cromatográficos (tipo de columna, fase móvil, gradiente de elución, flujo y temperatura) para minimizar el efecto matriz y el tiempo de análisis.
- Optimizar los parámetros de detección por espectrometría de masas (condiciones de ionización, tipo de analizador y modo de fragmentación) con el fin de asegurar la máxima sensibilidad y selectividad.
- Evaluar la metodología analítica desarrollada mediante la determinación de los parámetros de calidad del método: límites de detección y cuantificación, linealidad, precisión (repetibilidad y reproducibilidad), recuperaciones y efecto matriz.
- Aplicar la metodología desarrollada a un conjunto de muestras reales (aguas residuales, efluentes de depuradoras, etc.) para determinar la presencia y las concentraciones de los fármacos seleccionados. Para ello se diseñará un plan de muestreo adecuado que asegure la representatividad de las muestras.

- Interpretar y discutir los resultados obtenidos en el contexto de la calidad del agua y el potencial riesgo asociado a la presencia de los fármacos seleccionados en las muestras estudiadas con el objeto de que en el futuro se puedan sugerir posibles vías de mitigación del riesgo.

Bibliografía básica:

Axel, M., Ewelina, K., Jenny-Maria, B., & Leif, K. (2017). An online SPE LC-MS/MS method for the analysis of antibiotics in environmental water. *Environmental Science and Pollution Research*, 24(9), 8692-8699. <https://doi.org/10.1007/s11356-017-8588-2>

Mohapatra, S., Tong, X., Mukherjee, S., Dubey, M., Subhash, S., Luhua, Y., van der Hoek, J. P., & Gin, K. Y. H. (2025). Comprehensive insights on the detection, occurrence and modelling of pharmaceuticals in surface water, groundwater, and drinking water treatment plants. *Journal of Hazardous Materials Advances*, 18, 100707. <https://doi.org/10.1016/j.HAZADV.2025.100707>

Pei, X., Zhang, N., Chen, Y., Miao, S., Fu, H., Zhu, Q., Dai, Z., Chi, Y., Hu, L., Jin, R., & Liao, C. (2025). Robust SPE-UHPLC-MS/MS method for determination of multiple categories of antibiotics with broad polarity range in surface water. *Microchemical Journal*, 212, 113198. <https://doi.org/10.1016/j.MICROC.2025.113198>

Gros, M., Petrović, M., & Barceló, D. (2006). Multi-residue analytical methods using LC-tandem MS for the determination of pharmaceuticals in environmental and wastewater samples: a review. *Analytical and Bioanalytical Chemistry*, 386, 941. <https://doi.org/10.1007/s00216-006-0586-z>

Recomendaciones y orientaciones para el estudiante:

Conocimientos avanzados de cromatografía líquida y de espectrometría de masas.

Plazas: 1

2. DATOS DEL TUTOR/A:

Nombre y apellidos: FRANCISCO JESÚS LARA VARGAS

Ámbito de conocimiento/Departamento: QUÍMICA ANALÍTICA

Correo electrónico: frjlara@ugr.es

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

Nombre y apellidos: MAYKEL HERNÁNDEZ MESA

Ámbito de conocimiento/Departamento: QUÍMICA ANALÍTICA

Correo electrónico: maykelhm@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: DANIEL SEGURA SAEZ

Correo electrónico: danielsegsae@correo.ugr.es