



1. DATOS BÁSICOS DEL TFG:

Título: Materiales bidimensionales para la detección de contaminantes volátiles mediante sensores de gas

Descripción general (resumen y metodología):

Introducción

El crecimiento exponencial de la población, la rápida industrialización y el aumento del tráfico urbano han favorecido el incremento de las emisiones de compuestos orgánicos volátiles (COV), particularmente benceno, tolueno y xileno (BTX). Estos compuestos son conocidos por su alta volatilidad, toxicidad y persistencia ambiental, originándose principalmente en procesos petroquímicos, la combustión de combustibles fósiles y actividades industriales. Estos compuestos BTX están clasificados como contaminantes atmosféricos prioritarios debido a sus significativos efectos adversos sobre la salud humana y el medio ambiente.

La monitorización efectiva y en tiempo real de BTX en la atmósfera representa un gran desafío en el campo de la detección ambiental. Entre las diversas tecnologías disponibles, los sensores de gas quimiorresistivos han atraído considerable interés debido a su simplicidad, reducido coste, bajo consumo energético y facilidad de integración en dispositivos portátiles. Estos sensores funcionan detectando cambios en la resistencia eléctrica de un material-sensor cuando este interactúa con moléculas específicas de gas, lo que permite la identificación y cuantificación de contaminantes.

Para mejorar el rendimiento del sensor, es esencial el desarrollo de nuevos materiales con propiedades diseñadas a medida. En este sentido, materiales bidimensionales (2D) como el nitruro de carbono ($g\text{-C}_3\text{N}_4$) han surgido como candidatos prometedores para aplicaciones de detección quimiorresistiva. Estos materiales ofrecen una alta relación superficie-volumen, características semiconductoras favorables, excelente estabilidad térmica y una química superficial que puede ajustarse para mejorar la sensibilidad y selectividad hacia COV específicos como los BTX.

El objetivo de este proyecto es sintetizar materiales de nitruro de carbono utilizando diferentes precursores ricos en nitrógeno y evaluar su desempeño como sensores de gas quimiorresistivos para la detección de BTX. Se pondrá especial énfasis en entender cómo la elección del precursor influye en la morfología, las características superficiales y la respuesta sensorial de los materiales resultantes, con el fin de establecer relaciones estructura-propiedad-desempeño bajo condiciones de prueba controladas.

Plan de trabajo

- Revisión bibliográfica sobre COVs (específicamente BTX), sensores de gases quimiorresistivos y las propiedades de los materiales de $g\text{-C}_3\text{N}_4$.
- Síntesis de una serie de $g\text{-C}_3\text{N}_4$ utilizando diferentes precursores ricos en nitrógeno (urea, tiourea, melamina, dicianodiamida).
- Caracterización fisicoquímica y estructural de los materiales sintetizados mediante técnicas como difracción de rayos X, espectroscopía infrarroja por transformada de Fourier, espectroscopía fotoelectrónica de rayos X, microscopía electrónica de barrido y análisis de área superficial.

- • Fabricación de dispositivos sensores de gas mediante la deposición de los materiales sintetizados sobre tubos cerámicos o sustratos de película delgada con electrodos interdigitalizados.
- • Evaluación de las propiedades de detección de gases bajo exposición a vapores de BTX, enfocándose en: sensibilidad a diferentes concentraciones, selectividad frente a otros COVs, tiempo de respuesta y recuperación, optimización de la temperatura de operación y estabilidad y reproducibilidad a largo plazo.
- • Análisis de datos y correlación entre el precursor de síntesis, las propiedades del material y el desempeño del sensor.

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

Objetivos planteados:

- • Sintetizar materiales bidimensionales como el g-C₃N₄ utilizando diferentes precursores ricos en nitrógeno mediante métodos de síntesis controlada.
- • Caracterizar las propiedades estructurales, morfológicas, electrónicas y superficiales de los materiales sintetizados empleando técnicas avanzadas.
- • Fabricar y evaluar sensores de gases quimiorresistivos basados en los materiales sintetizados, específicamente para la detección de compuestos orgánicos volátiles tipo BTX.
- • Comparar el desempeño de los sensores entre diferentes materiales en términos de sensibilidad, selectividad, tiempo de respuesta y recuperación, y estabilidad a largo plazo.

Bibliografía básica:

11. C. Duan, H. Liao, K. Wang, Y. Ren, The research hotspots and trends of volatile organic compound emissions from anthropogenic and natural sources: A systematic quantitative review, *Environmental Research*, 216 (2023) 114386.
22. A. Mirzaei, J.-H. Kim, H. W. Kim, S. S. Kim, Resistive-based gas sensors for detection of benzene, toluene and xylene (BTX) gases: a review, *Journal of Materials Chemistry C*, 6(16), (2018) 4342-4370.
- 3.3. Y. Zhao, T. Wang, X. Li, Y. Fu, G. Zhao, X. Wang, Recent advance and perspectives in g-C₃N₄ based gas sensing materials: a review, *Sensors and Actuators A: Physical*, 355 (2023) 114313.

Recomendaciones y orientaciones para el estudiante:

En caso de duda, se invita al alumno a visitar al Tutor para dar más información acerca del TFG

Plazas: 1

2. DATOS DEL TUTOR/A:

Nombre y apellidos: SERGIO MORALES TORRES

Ámbito de conocimiento/Departamento: QUÍMICA INORGÁNICA

Correo electrónico: semoto@ugr.es

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

Nombre y apellidos: SACHIN TATYASAHEB NAVALE

Ámbito de conocimiento/Departamento: QUÍMICA INORGÁNICA

Correo electrónico: stnavale2@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: