



1. DATOS BÁSICOS DEL TFG:

Título: Metal-Organic Frameworks (MOFs) como nuevo modelo para el desarrollo de agroquímicos

Descripción general (resumen y metodología):

Los **agroquímicos** se han convertido en una parte fundamental de las sociedades modernas para satisfacer la enorme demanda de alimentos. Aunque el uso de plaguicidas es una práctica antigua, en los últimos años, el uso excesivo de agroquímicos está deteriorando la calidad de los ecosistemas, afectando a la salud humana. Durante el período 2011-18, las ventas de plaguicidas rondaron las 360000 toneladas por año en la Unión Europea (UE), siendo los grupos más vendidos: fungicidas, bactericidas y herbicidas. Los principales problemas relacionados con su uso extensivo son:

Baja eficacia: Los plaguicidas aplicados (10-75%) no alcanzan su objetivo, y su reiterado uso da lugar a la contaminación del medio ambiente.

Impacto ambiental: Los agroquímicos alteran los procesos químicos, físicos y biológicos que afectan: al suelo, destruyen bacterias u organismos necesarios, aumentan el contenido de nitratos, dificultan el crecimiento y generan residuos. Además, los agroquímicos hacen que el agua no sea apta para su consumo, promueven el crecimiento de algas y la eutrofización. El aire esparce sus efectos tóxicos por todas partes, lo que provoca efectos drásticos en la salud de los organismos vivos circundantes. El 90% de los alimentos que consumimos contienen residuos de plaguicidas, y entre 1-5% superan los límites recomendados.

Cepas resistentes: el uso repetido de la misma clase de plaguicida puede provocar el desarrollo de resistencia adquirida a los plaguicidas, con un coste económico de 1.300 millones de € solo en EE. UU.

Salud pública: La Organización Mundial de la Salud (OMS) estima un mínimo de 25 millones de casos de intoxicación por plaguicidas en humanos y 20000 muertes accidentales por año. Además, provocan cáncer, esterilidad, cambios neurológicos, hormonales, etc.

Recientemente, los **polímeros de coordinación porosos o MOFs** (del inglés Metal-Organic Frameworks) aparecieron como materiales innovadores y prometedores para aplicaciones ambientales. En particular, los MOF tienen varias características que los hacen excelentes candidatos para aplicaciones ambientales: i) grandes porosidades asociadas con altas capacidades de adsorción; ii) centros activos donde se puede anclar diferentes especies; iii) cavidades funcionalizables, donde pueden tener lugar interacciones adsorbato-adsorbente; iv) algunos son biocompatibles; y v) son biodegradables, manteniéndose estables para llevar a cabo sus funciones, y luego, ser eliminados, previniendo su acumulación (Rojas et al., ACS Appl. Mater. Interfaces **2022**, 14, 16983).

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

Objetivos planteados:

1. Síntesis y caracterización de nuevos MOFs para la liberación controlada de agroquímicos.
2. Caracterización estructural de los compuestos aislados por medio de métodos de difracción de rayos X en monocristal.
3. Evaluación de su estabilidad, biocompatibilidad y actividad frente a plagas.

Bibliografía básica:

Rojas et al., ACS Appl. Mater. Interfaces **2022**, 14, 16983

Recomendaciones y orientaciones para el estudiante:

Inicialmente, se llevará a cabo el diseño y síntesis de nuevas estructuras MOFs robustos a base de metales inocuos para el medio ambiente (ej. Ti, Fe, Cu, Zn, Zr) y ligandos previamente seleccionados con el fin de obtener estructuras porosas. 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 obtenidos, una vez aislados, serán caracterizados mediante diversas técnicas fisicoquímicas para conocer:

su composición química (espectrofotómetro de emisión óptico con plasma de acoplamiento inductivo como fuente ionización (ICP-OES), espectroscopía infrarroja (IR) y análisis termogravimétrico (TGA)).

su estructura cristalina mediante difracción de rayos X (DRX), microscopía electrónica de transmisión (TEM), y resonancia magnética nuclear (RMN). En caso necesario, se llevarán a cabo experimentos complementarios utilizando instalaciones de radiación de sincrotrón con el fin de refinar la estructura cristalina (por ejemplo, ID31 en ESRF).

sus propiedades texturales (isotermas de adsorción/desorción de nitrógeno).

sus propiedades ópticas (espectroscopia UV-Visible).

su morfología empleando la dispersión dinámica de luz (DLS) y microscopía TEM y microscopía de barrido de electrones (SEM).

Finalmente, se estudiará tanto su biocompatibilidad y capacidad para liberar la molécula activa, así como su actividad frente a plagas.

Plazas: 1

2. DATOS DEL TUTOR/A:

Nombre y apellidos: SARA ROJAS MACÍAS

Ámbito de conocimiento/Departamento: QUÍMICA INORGÁNICA

Correo electrónico: srojas@ugr.es

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

Nombre y apellidos: ANTONIO RODRÍGUEZ DIÉGUEZ

Ámbito de conocimiento/Departamento: QUÍMICA INORGÁNICA

Correo electrónico: antonio5@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: