



1. DATOS BÁSICOS DEL TFG:

Título: Síntesis de InVO_4 activo bajo luz visible para la degradación fotocatalítica de contaminantes emergentes en 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 para el tratamiento avanzado de aguas contaminadas. Esta tecnología se basa en la activación de materiales semiconductores mediante irradiación, generando pares electrón-hueco que pueden participar en reacciones de oxidación y reducción. Como resultado, se forman especies reactivas de oxígeno capaces de degradar contaminantes orgánicos persistentes en medio acuoso [2]. La eficiencia de estos materiales depende en gran medida de su estructura cristalina, sus propiedades ópticas, su área superficial y la eficiencia en la separación y transporte de las cargas fotogeneradas. Entre los semiconductores más utilizados se encuentran el dióxido de titanio (TiO_2) y el óxido de zinc (ZnO), debido a su estabilidad química, bajo coste y elevada actividad fotocatalítica bajo radiación ultravioleta [3,4]. Sin embargo, su limitada absorción en el rango visible del espectro solar restringe su aplicación en procesos impulsados por luz solar o fuentes LED de baja energía. Por ello, en los últimos años se ha intensificado la búsqueda de nuevos semiconductores capaces de absorber radiación visible y mejorar la eficiencia de los procesos fotocatalíticos.

Dentro de este grupo, los vanadatos metálicos han despertado interés por sus propiedades electrónicas y ópticas, que pueden favorecer la absorción de luz visible. En particular, el vanadato de indio (InVO_4) es un semiconductor con potencial aplicación en fotocatalisis ambiental, ya que puede participar en la generación de especies reactivas implicadas en la degradación de contaminantes orgánicos. Además, sus propiedades pueden ajustarse mediante el control de las condiciones de síntesis y de los tratamientos posteriores.

En este proyecto se propone la síntesis de InVO_4 mediante un método hidrotermal, con el objetivo de obtener un semiconductor activo bajo luz visible para la degradación fotocatalítica de compuestos farmacéuticos presentes en medios acuosos. La caracterización fisicoquímica del material permitirá establecer la relación entre sus propiedades estructurales, morfológicas, superficiales y ópticas, y su actividad fotocatalítica. De esta forma, este estudio contribuirá al desarrollo de materiales semiconductores sostenibles para el tratamiento avanzado de aguas residuales contaminadas con fármacos.

Metodología experimental

El InVO_4 se sintetizará mediante un método hidrotermal empleando precursores adecuados de indio y vanadio. Para ello, se prepararán disoluciones precursoras a partir de indio y vanadio, ajustando las condiciones de síntesis, tales como pH, temperatura y tiempo de reacción, con el fin de favorecer la formación del vanadato de indio. La mezcla resultante se transferirá a reactores hidrotermales y se someterá a tratamiento térmico bajo condiciones controladas. Posteriormente, el sólido obtenido será filtrado, lavado con agua desionizada y/o etanol, secado y, si es necesario, sometido a un tratamiento térmico de calcinación para mejorar la cristalinidad y estabilidad.

La caracterización de los materiales sintetizados se llevará a cabo mediante difracción de rayos X (DRX) para identificar las fases cristalinas presentes y confirmar la formación del InVO_4 . La microscopía electrónica de barrido (SEM) y de transmisión (TEM) para el análisis de la morfología y el 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 defectos superficiales y especies oxigenadas. Finalmente, los materiales serán evaluados como fotocatalizadores en la degradación de compuestos farmacéuticos bajo irradiación de luz visible en condiciones controladas. Los resultados permitirán comparar la eficiencia fotocatalítica de los materiales sintetizados y relacionarla con sus propiedades fotocatalíticas.

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

Objetivos planteados:

Objetivo general

Sintetizar, caracterizar y evaluar vanadato de indio (InVO_4) mediante un método hidrotermal, con el fin de evaluar su actividad fotocatalítica en la degradación de fármacos presentes en medios acuosos bajo irradiación visible.

Objetivos específicos

- Sintetizar InVO_4 mediante un método hidrotermal, controlando variables como pH, temperatura y tiempo de reacción para favorecer la formación de la fase deseada.
- Evaluar el efecto de tratamientos térmicos posteriores sobre las propiedades estructurales, ópticas y superficiales del InVO_4 sintetizado.
- Caracterizar los materiales obtenidos mediante difracción de rayos X (DRX), espectroscopia fotoelectrónica de rayos X (XPS), espectroscopia UV-Vis de reflectancia difusa (DRS), microscopía electrónica de barrido y/o transmisión (SEM/TEM) y fisiorción de N_2 , con el fin de relacionar sus propiedades estructurales, ópticas, texturales y superficiales con su actividad fotocatalítica.
- Evaluar la actividad fotocatalítica del InVO_4 en la degradación de un fármaco modelo en disolución acuosa bajo irradiación visible.
- Establecer rutas de diseño de futuros fotocatalizadores basados en InVO_4 , relacionando sus propiedades estructurales, ópticas y superficiales con su actividad en la degradación de contaminantes 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 $\text{TiO}_2\text{-ZrO}_2$ 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 ISABEL MORAL RODRÍGUEZ

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: