



1. DATOS BÁSICOS DEL TFG:

Título: Diseño de estructuras metal-orgánicas (MOFs) para la detección de compuestos orgánicos volátiles mediante sensores resistivos de gases

Descripción general (resumen y metodología):

Introducción.

El crecimiento exponencial de la población, la rápida industrialización y el aumento del tráfico urbano han contribuido significativamente al incremento de las emisiones de compuestos orgánicos volátiles (COV) a la atmósfera. Estos contaminantes, generados principalmente por actividades industriales, procesos petroquímicos, combustión de combustibles fósiles y evaporación de disolventes, representan una preocupación ambiental y sanitaria de primer orden debido a su toxicidad, persistencia y participación en la formación de contaminantes secundarios. Entre los distintos COV, los compuestos aromáticos benceno, tolueno y xileno (BTX) destacan por su elevada volatilidad y sus efectos adversos sobre la salud humana, siendo considerados contaminantes atmosféricos prioritarios¹.

La monitorización selectiva y en tiempo real de COV continúa siendo un desafío tecnológico importante en el ámbito de la detección ambiental. En este contexto, los sensores de gas quimiorresistivos han despertado un notable interés debido a su simplicidad operativa, bajo coste, reducido consumo energético y facilidad de integración en dispositivos portátiles². Estos sensores se basan en la variación de la resistencia eléctrica de un material sensible cuando interacciona con moléculas gaseosas, permitiendo la detección y cuantificación de contaminantes presentes en bajas concentraciones.

El desarrollo de materiales avanzados con elevada área superficial, porosidad controlada y sitios activos accesibles resulta fundamental para mejorar la sensibilidad y selectividad de estos dispositivos. En este sentido, las estructuras metal-orgánicas (Metal-Organic Frameworks, MOFs) han emergido como materiales altamente prometedores para aplicaciones de detección de gases. Entre ellas, la familia MOF-74 destaca por su elevada área superficial, su estructura unidimensional altamente porosa y la presencia de sitios metálicos abiertos capaces de interactuar fuertemente con diversas moléculas adsorbidas³.

El presente proyecto tiene como objetivo sintetizar materiales MOF-74 empleando cobalto y zinc como centros metálicos (Co-MOF-74 y Zn-MOF-74) y evaluar su desempeño como materiales activos en sensores de gas quimiorresistivos para la detección de compuestos orgánicos volátiles. Se prestará especial atención a la detección de compuestos BTX, debido a su relevancia ambiental y toxicológica. Asimismo, se estudiará la influencia de la naturaleza del metal incorporado en la estructura MOF sobre las propiedades texturales, la química superficial, la interacción huésped-adsorbato y la respuesta sensorial frente a diferentes COV. El objetivo final es establecer relaciones entre estructura, composición y desempeño sensor que permitan desarrollar materiales altamente sensibles y selectivos para aplicaciones de monitorización ambiental.

Resumen de los trabajos a realizar por el estudiante/Plan de trabajo.

- Revisión bibliográfica sobre COVs, con especial énfasis en los compuestos aromáticos BTX, los sensores de gases quimiorresistivos y las propiedades de las estructuras metal-orgánicas aplicadas a la detección de gases.

- Síntesis de materiales MOF-74 empleando diferentes centros metálicos, concretamente cobalto y zinc (Co-MOF-74 y Zn-MOF-74), mediante métodos solvotérmicos controlados, optimizando las condiciones de síntesis para obtener materiales con elevada cristalinidad y área superficial.
- Caracterización fisicoquímica, estructural y textural 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, análisis termogravimétrico y medidas de adsorción-desorción de nitrógeno para la determinación del área superficial específica y la distribución de tamaño de poro.
- Fabricación de dispositivos sensores de gas mediante la deposición de los materiales MOF-74 sintetizados sobre sustratos adecuados, tales como tubos cerámicos o plataformas con electrodos interdigitalizados, para la obtención de sensores quimiorresistivos.
- Evaluación de las propiedades de detección de gases frente a diferentes compuestos orgánicos volátiles, prestando especial atención a los compuestos BTX. El estudio incluirá la determinación de la sensibilidad a distintas concentraciones, la selectividad frente a otros COVs interferentes, los tiempos de respuesta y recuperación, la influencia de la temperatura de operación y la estabilidad y reproducibilidad de los sensores a largo plazo.
- Análisis de los resultados obtenidos y establecimiento de correlaciones entre la naturaleza del centro metálico, las propiedades estructurales y texturales de los materiales MOF-74 y el desempeño de los sensores desarrollados, con el objetivo de identificar los parámetros clave que gobiernan la detección eficiente de compuestos BTX.

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

Objetivos planteados:

Los objetivos específicos de este TFG serán:

- Sintetizar materiales metal-orgánicos de la familia MOF-74 empleando cobalto y zinc como centros metálicos (Co-MOF-74 y Zn-MOF-74) mediante métodos solvotérmicos controlados.
- Caracterizar las propiedades estructurales, texturales, morfológicas y superficiales de los materiales sintetizados utilizando técnicas avanzadas de análisis, con especial atención a la cristalinidad, porosidad, área superficial y estabilidad química.
- Fabricar y evaluar sensores de gas quimiorresistivos basados en los materiales MOF-74 sintetizados para la detección de COVs, con especial énfasis en los compuestos aromáticos BTX.
- Comparar el desempeño de los sensores desarrollados en términos de sensibilidad, selectividad, límite de detección, tiempos de respuesta y recuperación, así como estabilidad y reproducibilidad, estableciendo relaciones entre la naturaleza del metal incorporado y la respuesta sensorial obtenida.

Bibliografía básica:

1. 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.
2. 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. T. Xiao, D. Liu, The most advanced synthesis and a wide range of applications of MOF-74 and its derivatives, *Microporous and Mesoporous Materials*, 283 (2019) 88-103.

Recomendaciones y orientaciones para el estudiante:

Plazas: 1

2. DATOS DEL TUTOR/A:

Nombre y apellidos: SACHIN TATYASAHEB NAVALE

Ámbito de conocimiento/Departamento: QUÍMICA INORGÁNICA

Correo electrónico: stnavale2@ugr.es

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

Nombre y apellidos:

Ámbito de conocimiento/Departamento:

Correo electrónico:

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: