

TFG - QUÍMICA COMPUTACIONAL Y SOSTENIBILIDAD

Filtros Moleculares para la Restauración de Ríos

Combatiendo la Huella Farmacéutica en el Ciclo del Agua.

Diseña esponjas nanotecnológicas para eliminar contaminantes invisibles.

Tutor: Juan José Gutiérrez Sevillano
(jjgutierrez@upo.es)





El Problema: Diclofenaco

Antiinflamatorio común, hoy una amenaza silenciosa para la biodiversidad acuática.

Indetectable e imparable para las plantas depuradoras convencionales.

Exige una solución urgente de nanotecnología ambiental.

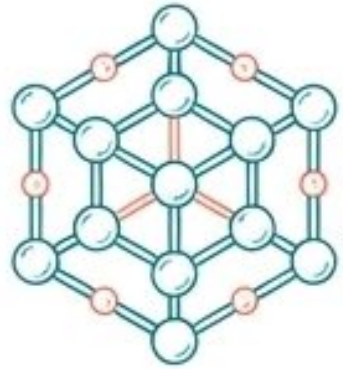


La Solución: Familia UiO-66

El Reto del Agua Real.

¿Podrán los grupos polares mantener la captura del fármaco frente a la presencia masiva de sales (NaCl y CaCl₂)?

Tu Ruta de Investigación: Metodología Computacional



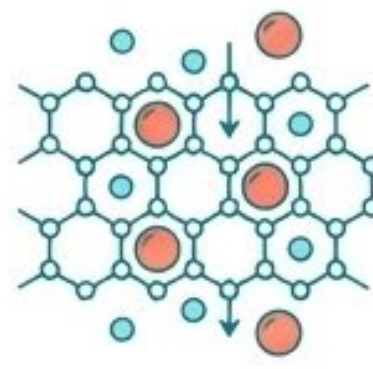
[PARAMETRIZACIÓN]

Construye modelos atómicos y estudia cómo la relación estructura-afinidad dicta la eficacia del filtro.



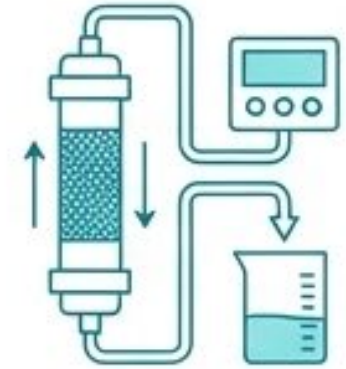
[SIMULACIÓN GCMC]

Determina mediante Monte Carlo cuál de los tres materiales alberga más fármaco en sus poros.



[TEORÍA IAST]

Analiza si el Ca^{2+} actúa como puente facilitador o como competidor que bloquea el material.



[PROYECCIÓN DE FLUJO]

Predice el tiempo de vida útil del filtro en agua salobre o dura para plantas reales.

Tu Futuro y Tu Impacto



Habilidades de Alta Demanda

Domina la química computacional aplicada a la gestión del agua. Una competencia de alto valor para consultorías ambientales y centros de I+D.

Excelencia Académica

Trabaja con matrices complejas y materiales de última generación. Resultados con potencial **real de publicación en revistas** de alto impacto.

Acción Directa

Aporta soluciones tangibles a la contaminación hídrica, contribuyendo directamente al ODS 6: Agua Limpia y Saneamiento.

Más Información: Contacta con Juanjo (jjgutierrez@upo.es)