

**Propuesta de Trabajo Fin de Máster**  
 Año académico 2020-2021  
**Máster en Métodos Computacionales en Ciencias**

**Proyecto Nº 03**

**Título:** *Desarrollo y aplicación de fotocatalizadores mediante técnicas de recubrimiento químico y evaluación de sus rendimientos en procesos de eliminación de contaminantes*

**Departamento/Laboratorio:**

*Dpto. de Química, Grupo SUMBET, Facultad de Ciencias.*

**Director:** *Francisco Javier PEÑAS ESTEBAN*

**Contacto:** *jpesteban@unav.es*

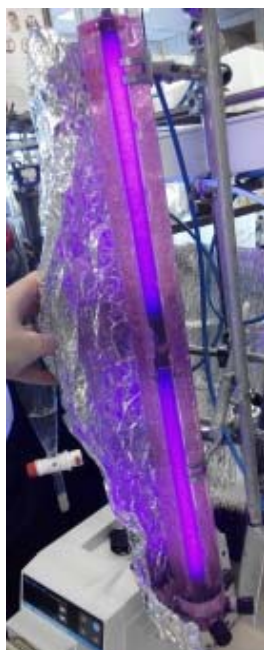
**Codirector:** *Adrián DURÁN BENITO*

**Contacto:** *adrianduran@unav.es*

**Resumen**

La **fotocatálisis** es un conjunto de tecnologías, incluidas dentro de los Procesos Avanzados de Oxidación, que resulta prometedora para poder satisfacer elevados niveles de depuración en efluentes contaminados, tanto en fase líquida como en fase gas.

Los **objetivos** del trabajo son: (1) la preparación y caracterización de un material fotoactivo basado en dióxido de titanio; (2) su aplicación a la eliminación de compuestos contaminantes (emergentes y/o volátiles); (3) la modelización y optimización del proceso de eliminación.



Asimismo, la **metodología** a seguir se articula en tres tareas generales relacionadas con los objetivos indicados: (1.1) síntesis de los composites fotoactivos mediante el recubrimiento químico de soportes estructurales con precursores de dióxido de titanio, y activación a temperatura controlada; (1.2) caracterización fisicoquímica y estructural de los materiales obtenidos (tamaño de partícula, DRX, FTIR, análisis térmico, microscopías óptica y electrónica de barrido con sonda EDX, etc.); (2.1) utilización de los mismos en un fotorreactor de tipo columna con contaminantes modelo en procesos discontinuos y en operación continua; (2.2) aplicación de un diseño experimental para el estudio de las variables que afectan al rendimiento de depuración (tiempo de retención, carga contaminante, carga de catalizador, características del catalizador, nivel de aireación o humedad, etc.); (3.1) desarrollo de un modelo matemático para la predicción del rendimiento de eliminación en función de las condiciones de operación; (3.2) optimización de las condiciones de operación en el reactor y validación del modelo.