



**Propuesta de Trabajo Fin de Máster**  
Año académico 2022-2023  
**MÁSTER EN MÉTODOS COMPUTACIONALES EN CIENCIAS**

**Project Nº 05**

**Título:** Desarrollo de nuevos materiales adsorbentes selectivos y aplicación en el tratamiento de aguas

**Departamento/ Laboratorio:** Química, Grupo SUMBET, Facultad de Ciencias

**Director:** José Ramón Isasi

**Correo electrónico:** jrisasi@unav.es

**Codirector:** F. Javier Peñas

**Correo electrónico:** jpesteban@unav.es

**Resumen**

El desarrollo de **materiales adsorbentes** que presenten una buena selectividad hacia determinados contaminantes específicos presentes en las aguas superficiales y subterráneas es un campo de investigación prometedor.

Los **objetivos** del trabajo son: (1) la preparación y caracterización de sólidos adsorbentes basados en polisacáridos de origen natural; (2) su aplicación a la eliminación de diversos compuestos diana (contaminantes emergentes); (3) la modelización y optimización del proceso de eliminación.

La **metodología** a seguir se organiza atendiendo a las siguientes tareas:

- 1) Síntesis (según procesos basados en la Química Sostenible) y caracterización de los materiales adsorbentes obtenidos (tamaño de partícula, FTIR, análisis térmico, microscopía, etc.).
- 2) Validación de estos materiales en la adsorción de compuestos de referencia (contaminantes modelo).
- 3) Determinación de las isothermas y parámetros termodinámicos de adsorción para los compuestos diana seleccionados.
- 4) Aplicación de un diseño experimental para analizar las variables que afectan al rendimiento de depuración (carga de adsorbente, carga y composición del efluente a tratar, tiempo de retención hidráulico, etc.) en sistemas de lecho fijo.
- 5) Estudio de la reusabilidad de los adsorbentes obtenidos (condiciones de regeneración, número efectivo de ciclos).
- 6) Modelado de las curvas de ruptura y de los perfiles de regeneración.

**OPTATIVAS RECOMENDADAS**

1. **Diseño experimental y modelado**
2. **Análisis de datos en técnicas de caracterización química**
- 3.
- 4.