



Propuesta de Trabajo Fin de Máster

Año académico 2023-2024

MÁSTER EN MÉTODOS COMPUTACIONALES EN CIENCIAS

Proyecto Nº 01
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 <p>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.</p> <p>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.</p> <p>La metodología a seguir se organiza atendiendo a las siguientes tareas:</p> <ol style="list-style-type: none">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. Análisis de datos en química
2. Machine Learning I
3. Procesamiento de imágenes
4. -