



## Becas colaboración curso 2021/2022

Fecha: 28 Mayo 2021

### Vicerrectorado de Investigación, Innovación y Transferencia

Subcomisión de I+D+i

Propuesta del departamento *INGENIERÍA QUÍMICA Y NUCLEAR*

**Núm Proyecto: 2021/23/00030**

#### Responsable

Muñoz Portero, María José

#### E-mail

mjmuno@iqn.upv.es

#### Ext.

76325

#### Título proyecto

Análisis y caracterización de pesticidas en aguas de la Comunitat Valenciana y su degradación mediante fotoelectrocatalisis usando fotoánodos basados en nanoestructuras de óxidos metálicos semiconductores

#### Valoración proyecto

4

#### Descripción proyecto

Los pesticidas son compuestos orgánicos persistentes y muchos de ellos son clasificados como contaminantes emergentes, los cuales son difíciles de eliminar mediante procesos convencionales de tratamiento físico-químico o biológico, o mediante procesos convencionales de oxidación avanzada. Aunque estos últimos son más efectivos, llevan asociado un consumo de reactivos importante y dan lugar a productos de reacción secundarios que pueden ser más tóxicos que los compuestos que se pretende eliminar. En este sentido, mediante la utilización de procesos fotoelectroquímicos de oxidación avanzada se puede conseguir la mineralización completa de estos compuestos sin la adición de reactivos. Estos procesos se consideran limpios y no selectivos, pudiendo degradar numerosos compuestos a través de reacciones que implican especies intermedias oxidantes, principalmente el radical hidroxilo ( $\cdot\text{OH}$ ), que posee un elevado potencial de oxidación. El componente clave de los procesos fotoelectroquímicos es el electrodo, ya que de él depende el consumo energético, la eficiencia y la selectividad de las reacciones. Entre las características requeridas por los materiales para poder ser utilizados como electrodos en procesos de oxidación avanzada, se pueden destacar la estabilidad química, la alta conductividad eléctrica, la resistencia a la corrosión y que presenten sobrepotenciales elevados con respecto a la oxidación del agua, para poder generar radicales  $\cdot\text{OH}$ . El objetivo del proyecto es el análisis y caracterización de pesticidas presentes en aguas de la Comunitat Valenciana y su degradación fotoelectrocatalítica usando nanoestructuras de óxidos metálicos semiconductores como fotoánodos. Se seleccionarán las nanoestructuras que presenten mejor comportamiento desde el punto de vista de su estabilidad y de su rendimiento con respecto a la eliminación de los pesticidas. El presente proyecto se llevará a cabo en el Campus de Vera de la Universitat Politècnica de València.

LUGAR: Campus VERA

#### Actividades a realizar por el alumno

1. Puesta a punto de un método de ensayo para el análisis y caracterización de pesticidas.

El análisis y caracterización de los pesticidas se realizará mediante la técnica de Cromatografía Líquida de Ultra-Alta Eficacia (UHPLC) acoplada a Espectrometría de Masas (MS Q-TOF). Para ello será necesario realizar la puesta a punto de un método de ensayo para la determinación de los pesticidas con dicha técnica. Se prepararán disoluciones patrón de pesticida y se determinarán las condiciones óptimas de ensayo para cada pesticida con la técnica UHPLC-MS (fase móvil, temperatura de la columna, velocidad de flujo, etc).

2. Fabricación de electrodos basados en nanoestructuras de óxidos metálicos semiconductores.

El electrodo semiconductor nanoestructurado será la parte fundamental del proceso fotoelectrocatalítico que se pretende desarrollar para la degradación de pesticidas. Para que los fotoánodos sean más eficientes se



requiere que las nanoestructuras expongan una elevada superficie activa al electrolito. Para ello, se empleará el anodizado electroquímico en condiciones hidrodinámicas de flujo como método de síntesis de los electrodos nanoestructurados. Mediante esta técnica se fabricarán nanoestructuras de distintos óxidos metálicos semiconductores ( $\text{TiO}_2$ ,  $\text{WO}_3$  y  $\text{ZnO}$ ) y nanoestructuras híbridas ( $\text{TiO}_2/\text{WO}_3$  y  $\text{TiO}_2/\text{ZnO}$ ). Tras el anodizado, todas las nanoestructuras se someterán a un tratamiento térmico con el fin de transformar sus estructuras amorfas en estructuras cristalinas, mucho más eficientes para ser empleadas en procesos de generación, transferencia y transporte de electrones.

### 3. Caracterización microscópica de los electrodos fabricados.

Los electrodos fabricados se caracterizarán mediante distintas técnicas de microscopía para evaluar la morfología de las nanoestructuras y determinar su estructura cristalina. Con ello se pretende desarrollar los materiales que se van a utilizar como ánodos en el proceso fotoelectroquímico de oxidación avanzada aplicado a la eliminación de pesticidas. Para la caracterización morfológica y estructural de los electrodos se utilizarán diferentes técnicas de microscopía:

- Microscopía Electrónica de Barrido de Emisión de Campo (FESEM) con Energías Dispersivas de Rayos X (EDX).

- Microscopía Láser Confocal de Barrido con Espectroscopía Raman.

- Microscopía de Fuerza Atómica (AFM).

- Análisis del área de superficie Brunauer-Emmett-Teller (BET).

### 4. Aplicación de los electrodos a la eliminación de pesticidas.

Una vez fabricados los electrodos nanoestructurados y realizada su caracterización mediante técnicas microscópicas, éstos se aplicarán a la eliminación de algunos de los pesticidas que han sido detectados recientemente en aguas de la Comunitat Valenciana. Los nanoelectrodos se utilizarán como fotoelectrocatalizadores en la destrucción de pesticidas, debido a la favorable posición de la banda prohibida de las nanoestructuras para que tenga lugar la reacción de los huecos fotogenerados con el medio y la formación de radicales  $\cdot\text{OH}$ . Para evaluar la eficiencia en la destrucción de los pesticidas, los nanoelectrodos se sumergirán en disoluciones que contienen el pesticida y se aplicará luz solar capaz de generar pares electrón-hueco en la nanoestructura. Durante los ensayos de degradación, se realizarán diferentes mediciones para seguir la degradación del contaminante:

- Medidas de Absorbancia UV-Visible.

- Medidas de Cromatografía Iónica (IC), Carbono Orgánico Total (TOC) y Nitrógeno Total.

- Medidas de Cromatografía Líquida de Ultra-Alta Eficacia (UHPLC) acoplada a Espectrometría de Masas (MS Q-TOF).

### Horario

A acordar con el alumno