



Projectes de fi de carrera

Titulació:

Enginyeria Química

191 Admetlla Pérez, Manuel

Poliesteramidas basadas en la incorporación de unidades de ácido glicólico a un nylon (n,m). Síntesis y estudio de degradación

Director: Puiggalí Bellalta, Jordi

Departament: Enginyeria Química

Resum:

La motivación principal de este proyecto ha consistido en adquirir experiencia investigadora en el campo de los materiales poliméricos. De esta forma, he participado durante un tiempo dentro de un Proyecto amplio de investigación encaminado a explorar y caracterizar nuevos materiales para su aplicación como suturas quirúrgicas bioabsorbibles.

Este Proyecto se centra en el estudio de una familia concreta de polímeros: las poliesteramidas. Esta familia tiene como ventajas la biodegradabilidad aportada por los grupos éster y unas propiedades mecánicas aceptables como consecuencia de la formación de puentes de hidrógeno intermoleculares entre los grupos amida.

El grupo de investigación dentro del cual se ha realizado este proyecto tiene experiencia previa en el estudio de polímeros biodegradables, lo que ha permitido tener como objetivo general la exploración de una nueva familia de poliesteramidas aptas para su aplicación como suturas.

192 Alechaga Silva, Élidea

Determinación de la estructura de secuencias de ADN del tipo A(AT)nT

Director: Subirana Torrent, Juan Antonio

Departament: Enginyeria Química

Resum:

El ADN es una molécula de importancia vital en los organismos vivos, ya que están directamente relacionados con el material genético de las células. Está formado por una cadena de nucleótidos: adenina (A), citosina (C), guanina (G) y timina (T). Conocer a fondo las posibles estructuras químicas que puede tener el ADN puede ayudar a descubrir su mecanismo de funcionamiento. Este proyecto se centra únicamente en aquellas secuencias de ADN de la forma A(AT)nT, con n igual a 3, 4 y 5; puesto que apenas hay información sobre la estructura de secuencias que contienen únicamente A y T.

Para conocer la estructura a nivel atómico de una molécula es preciso utilizar una radiación de longitud de onda comparable a las distancias interatómicas, por lo que la difracción de rayos X es una de las técnicas que permiten un estudio más detallado de la estructura de una molécula. Al interaccionar con los electrones de los átomos dan lugar a diagramas de difracción que, cuando la muestra es un cristal, están formados por manchas más o menos redondas y dispuestas regularmente sobre la imagen.

Los diagramas de difracción son analizados mediante programas informáticos (HKL – Denzo y Scalepack) para saber:

- celdilla del cristal, grupo espacial y simetría
- intensidad de cada difracción

Y utilizando un modelo similar y la información anteriormente citada, puede emplearse la metodología del reemplazo molecular para obtener la estructura del cristal. Si la secuencia contiene átomos pesados, puede usarse la técnica MAD para hallar la solución.

Se han obtenido múltiples cristales para la secuencia A(AT)4T, pero la resolución de los datos no llegaba para poder conseguir un modelo exacto a través del reemplazo molecular. No obstante, se ha encontrado la celdilla del cristal (44,7x44,7x197,7 Å, 90° 90° 120°) y el empaquetamiento de los dúplex en columnas. El grupo espacial con el que mejores resultados se han obtenido es P3221. Para intentar resolver la secuencia A(AT)4T por MAD, se cristalizó la misma secuencia pero cambiando una T por un bromo-uracilo, ya que tienen un volumen similar, pero el procesado de dichos cristales no ha podido utilizarse por el momento.

De las secuencias A(AT)3T y A(AT)5T se han obtenido cristales ya analizados, pero la resolución no era suficiente como para intentar resolver la estructura. Así, se ha calculado la celdilla de cada cristal, dato que servirá para un estudio posterior de patrones de cristalización en secuencias ricas en A-T y debido a similitudes con la secuencia anterior, es posible que también tengan una estructura en columnas.

193 Alós Torres, Rosanna; Juvina Puga, Jordi

Desarrollo e implementación de un sistema de monitorización mediante sensores químicos de un proceso de biosorción para la recuperación de ion cobre (II) en efluentes acuosos

Director: Florido Pérez, Antonio

Departament: Enginyeria Química

Resum:

El agua es actualmente uno de los recursos renovables en peligro como consecuencia de la abundante contaminación, especialmente la producida por los metales. La importancia que tiene el estudio de metales pesados en aguas se debe a su elevada toxicidad, alta persistencia y rápida acumulación en organismos vivos. En la actualidad existe una clara tendencia hacia la búsqueda de nuevas técnicas para la eliminación de contaminantes metálicos en efluentes acuosos. Una de las técnicas que está adquiriendo mayor importancia es la biosorción mediante diferentes residuos de origen vegetal. En este ámbito, varios estudios demuestran que el raspo de uva es un eficaz biosorbente de diversos iones metálicos en efluentes acuosos.

Hasta la fecha, la técnica analítica utilizada para el seguimiento y estudio de este proceso ha sido la espectroscopía de absorción atómica (AAS). Mediante el presente proyecto, se pretende desarrollar un sistema que permita la monitorización a tiempo real de un proceso de adsorción de ion cobre (II) en raspo de uva.

La técnica elegida para esta monitorización ha sido la potenciometría directa con Electroodos Selectivos de Iones (ESI). Se ha trabajado con dos tipos de electrodos:

- Electroodos de configuración convencional comerciales
- Electroodos tubulares de construcción propia

Se han realizado una serie de experimentos en los que se pretendía determinar la respuesta del sistema ante diferentes variables. Estos experimentos han servido para perfeccionar el diseño inicial del sistema y establecer las condiciones óptimas para su funcionamiento. De esta forma, las principales conclusiones a las que se han llegado son:

- Se ha conseguido una monitorización de gran precisión pero que presenta pequeñas diferencias de concentración respecto a AAS.
- Algunas de las posibles causas de este desfase son la formación de complejos, la deriva en el electrodo y el fenómeno de histéresis.
- Asimismo, existen ciertas variables que han de ser controladas ya que tienen una gran influencia en el comportamiento de los electrodos, como la temperatura, la fuerza iónica y presencia de otros metales en disolución.

194 Arqués Peruga, Pau

Posada a punt d'un sistema per a l'estudi de l'efectivitat dels tallafocs químics, aplicats a la lluita contra incendis forestals

Director: Arnaldos Viger, Josep

Departament: Enginyeria Química

Resum:

L'estudi que es desenvolupa a continuació pretén posar a punt un sistema per tal de poder determinar, mitjançant la simulació experimental d'incendis forestals a petita escala, l'efectivitat dels productes retardants a llarg termini. Fins a dia d'avui, la recerca efectuada en aquest camp ha demostrat una manca de criteris uniformitzats alhora de definir una metodologia estàndard de treball, fet que posa de manifest el buit existent en el coneixement de l'efectivitat dels esmentats productes.

L'estat de la qüestió ha requerit, primerament, fixar els criteris per a valorar l'eficàcia dels retardants, seleccionant-se a tal efecte cinc paràmetres d'estudi: velocitat de propagació del front de flames, velocitat de combustió, flux de calor emès, distribució de temperatures i massa de cendra residual. Tot seguit, s'ha definit una metodologia experimental en base a la qual s'ha hagut d'ajustar i calibrar els diversos elements de la instal·lació que així ho requerien, la taula de combustió i el sistema de polvorització dels productes retardants, així com alguns dels procediments inclosos. Seguint aquests punts, han estat efectuades diverses proves preliminars, consistents tant en cremes de combustible forestal com en l'aplicació dels productes retardants. Aquestes han permès aprofundir en el coneixement de les relacions existents entre els paràmetres que definieren el comportament d'un incendi i els factors que influeixen en el seu inici i desenvolupament.

Finalitzada la posta a punt de la instal·lació, ha estat dissenyat un programa experimental complet per a poder determinar l'eficàcia dels productes retardants, en funció de la càrrega de combustible forestal involucrat en cada prova, així com de la dosificació i de les característiques del retardant. Tot això, seguint la metodologia i els criteris definits anteriorment. Per tal de verificar la validesa d'aquest programa, han estat realitzades algunes de les sèries experimentals, els resultats de les quals han demostrat la seva viabilitat i per tan la validesa de la metodologia emprada. En definitiva, ha estat desenvolupada una eina amb un ampli ventall de possibilitats per a realitzar estudis en el camp dels incendis forestals.

195 Blanco Morado, Olalla María*Millora de la Gestió de la Producció i dels Residus per al Grup Blamar***Director:** Doll, Manuel Mateo**Departament:** Organització d'Empreses**Resum:**

Aquest treball consisteix en el disseny i la implantació d'un nou model de gestió de la producció i els residus per al Grup Blamar.

El Grup Blamar és un grup d'empreses amb més de 20 anys de tradició que es troba en un moment delicat de canvi. Dedicat a la fabricació de productes de seguretat i a la subcontractació de mecanitzats, els darrers anys ha experimentat un creixement important de la seva activitat de que l'antic model de gestió no ha estat capaç d'assimilar de forma eficient.

L'objectiu d'aquest treball ha estat elaborar i implementar un model de gestió de la producció i els residus en una eina de suport a la presa de decisions que permeti el grup administrar els recursos de forma racional; que proporcioni la informació necessària per a prendre decisions basades en dades de producció, permetent reaccionar eficientment davant els canvis en la conjuntura exterior; i que asseguri el compliment de les normatives en matèria de residus.

El treball consta de diferents parts que mantenen certa correspondència cronològica amb les activitats desenvolupades per a la seva elaboració. En primer lloc, es troba una part descriptiva que conté un recull d'informació fruit de l'estudi de l'empresa (recursos, sistema productiu, productes i residus) que ha resultat cabdal per a desenvolupar el model de gestió.

A continuació, hi ha una part conceptual on s'estableixen les bases del model i el seu posterior desenvolupament. Primerament, es descriu l'anterior sistema de gestió i s'estableixen els objectius del nou model. Seguidament, es procedeix a desenvolupar-lo, posant especial èmfasi en què s'adapti a les particularitats del Grup Blamar. Aquesta tasca ha esdevingut una de les més complexes, ja que amb anterioritat l'empresa havia rebutjat solucions de gestió recomanades per assessors en trobar-les massa rígides i allunyades de la seva realitat.

Seguidament, es presenta l'aplicació informàtica Auxpro que s'ha dissenyat per tal d'ajudar a posar en pràctica el model confeccionat i que actualment està funcionant a Blamar de forma experimental exhibint bons resultats.

Tancant el cos del treball es mostra l'aplicació pràctica del model de gestió amb exemples explicatius de les solucions que proposa i que han estat extrets de situacions reals que s'han produït a l'empresa.

El projecte que es presenta posa de relleu l'avanç notable en tots els àmbits de producció que suposa per a una PIME l'aplicació d'un model de gestió que s'adapti a les seves característiques. Així com la necessitat de subministrar una eina informàtica que ajudi a posar-lo en pràctica. La millora és especialment palesa en la presa de decisions i la gestió dels elements del sistema productiu. Aquest treball també posa de manifest que és tant important desenvolupar un bon model de producció com posar-lo a l'abast del personal que ha de conviure-hi, i ser capaç de fer-li veure el benefici que comporta per la totalitat del grup.

196 Bobet Badia, Marta*Estudios de los procesos de oxidación de hidrocarburos poliaromáticos (HPA) mediante peróxidos inorgánicos en barreras reactivas permeables***Director:** Cortina Pallas, José Luis**Departament:** Enginyeria Química**Resum:**

Los hidrocarburos poliaromáticos (PAH) son contaminantes orgánicos presentes en el aire, suelos y en el agua. Proceden principalmente de la combustión de combustibles fósiles así como de otros procesos industriales. Son altamente tóxicos y cancerígenos, por lo tanto deben ser eliminados. Como su proceso de biodegradación es muy lento, es necesario encontrar otros métodos que permitan degradarlos más rápidamente. De esta manera también se evitaría la propagación de estos contaminantes por el medio ambiente.

Uno de los sistemas de tratamiento más efectivos para la recuperación de suelos y aguas subterráneas contaminados por PAHs es la instalación de barreras permeables reactivas (BRPs) en el subsuelo. Éstas se pueden rellenar con un material reactivo que transforme los contaminantes a productos inocuos o menos tóxicos.

En este proyecto se pretende por un lado, identificar los productos de oxidación de algunos PAH, y por otro, estudiar la aplicación de peróxidos inorgánicos para la oxidación de PAH en barreras reactivas permeables.

Se han estudiado a escala de laboratorio las reacciones de oxidación del antraceno, pireno, fluoreno y naftaleno para poder identificar sus productos de oxidación mediante cromatografía líquida (CL). En una primera etapa se ha realizado el estudio de oxidación de los PAH seleccionados con peróxido de hidrógeno y mezclas de éste con hierro (II) para estudiar el efecto catalítico. También se han realizado experimentos dinámicos en columna con antraceno y pireno para simular el paso de los PAHs por la barrera reactiva y así

poder estudiar su oxidación y los subproductos formados.

Las conclusiones alcanzadas indican que la antraquinona es el principal subproducto de la oxidación del antraceno y que el peróxido de magnesio es un material válido para su uso en barreras reactivas permeables como oxidante.

197 Bonanza Querol, Núria

Estudi de Sostenibilitat Comparatiu dels Processos Batch vs Continu en la Hidrogenació d'olis

Director: Recasens Baxarias, Francesc

Departament: Enginyeria Química

Resum:

L'objectiu de la memòria és l'estudi de les conseqüències a nivell de sostenibilitat que suposaria substituir la producció d'un dels sis batchs que es realitzen en una planta discontinua d'hidrogenació d'oli de gira-sol per una nova planta d'hidrogenació supercrítica de la mateixa capacitat de producció.

La planta actual té una capacitat de 76440 tones l'any, és a dir, cada batch produeix 12740 tones l'any. La nova planta contínua supercrítica tindrà una capacitat similar, i així es podran comparar les incidències dels consums de matèries primeres, aigua, energia, toxicitat, contaminació i seguretat d'ambdós processos.

Per tant, la idea és veure quins són els resultats obtinguts, tant pel que fa a la producció d'oli com a la ecoeficiència del procés, per a poder estudiar la viabilitat del canvi.

Els resultats demostren que el procés supercrític genera menys emissions de gasos d'efecte hivernacle i és menys tòxic, però la inversió inicial de la planta es recuperaria al cap de 7 anys i no al cap de 3, com en el cas del seu equivalent en batch.

Com a conclusió final de l'estudi, és viable incorporar la nova planta contínua supercrítica substituint la producció d'un dels batchos de la nostra planta discontinua sempre que la nova planta compleixi totes les normatives de seguretat requerides i tinguem molt clar el propòsit de portar a terme un procés més sostenible a nivell mediambiental, però menys rentable.

198 Canyelles i Serra, Caterina

Avaluació i desenvolupament d'un estabilitzant de baix cost per als residus en l'eliminació d'arsènic a nivell domiciliari en zones rurals i disperses d'Amèrica Llatina

Director: Cortina Pallas, José Luis

Departament: Enginyeria Química

Resum:

Actualment a Amèrica Llatina hi ha una població (4.670.000 hab.) exposada a quotes altes d'arsènic per l'aigua de beguda (2.000% més del permès) que afecta la salut dels consumidors. Els principals efectes de l'arsènic en el cos són: alteracions amb efectes secundaris en el sistema nerviós central, irritació d'òrgans dels aparells respiratoris i gastrointestinals i càncer de pell. La població més afectada és la població dispersa ubicada en l'àrea rural, que consumeix aigua sense cap tractament i que en desconeix el risc.

Les condicions geogràfiques de la zona, caracteritzada bàsicament per l'altura, escassetat de recursos hídrics i condicions climàtiques adverses han limitat el desenvolupament de grans nuclis de vida urbana.

Així es pretén aconseguir un model d'eliminació de l'arsènic a l'aigua de consum amb les característiques adequades per a la situació socioeconòmica en què viu la majoria de gent que pateix hidroarsenisme en les aigües de consum.

Per això hem elaborat una revisió crítica sobre l'estat de l'art en temes d'hidroarsenisme per facilitar la feina a possibles tècnics, administració competent i/o organismes de cooperació internacional que vulguin treballar en aquest tema. El document recull tot el treball fet i proposa solucions innovadores en el model d'eliminació d'arsènic a escala domèstica.

Aquesta revisió ha possibilitat de treballar la manera de gestionar el residu generat per l'eliminació de l'arsènic: els fangs obtinguts. Així hem creat material de referència dedicat a aquelles tecnologies que són apropiades per a l'eliminació de l'arsènic en aigües potables d'origen natural.

En una segona part, hem dissenyat un sistema complet d'eliminació d'arsènic per incidir en el tema de l'eliminació de fangs i la seva gestió i/o estabilització per tal que esdevingui un sistema sostenible i que l'arsènic no retorni al cicle de l'aigua. Això ho hem aconseguit amb la barreja del residu d'argila que conté As, greixos animals –que tenen un alt contingut en estearat– i calç, aconseguint un residu estable i inert. Finalment, paral·lelament hem elaborat els manuals necessaris per fer l'adequada transferència de coneixements a les comunitats afectades.

199 Casado Fernández, David*Disseny d'una Planta Pilot per a síntesis farmacèutiques***Director:** Fernández Santín, José M^a**Departament:** Enginyeria Química**Resum:**

El present projecte té com a objectiu el disseny d'una Planta Pilot per a síntesis farmacèutiques partint d'unes bases de disseny reals, obtingudes d'una empresa farmacèutica client, centrant-se en el desenvolupament de la instal·lació química necessària per a la planta.

La definició de les operacions de procés necessàries per a la planta i els seus requeriments implica la classificació de les operacions, segons la seva funcionalitat, en les següents fases: reacció, separació, acabat i tractament d'efluents. El disseny del procés parteix de les premisses subministrades per l'empresa client, sent el principal concepte l'objectiu d'assolir una Planta Pilot amb un alt nivell de flexibilitat, donat el seu caràcter experimental. Les bases de disseny contempnen la descripció dels serveis necessaris per a la planta, dividint-se en aquells serveis d'obtenció externa i en els serveis que s'han de generar específicament per a la Planta. Per últim, es procedeix a fixar els criteris de selecció de materials de construcció per a la instal·lació química.

El capítol d'enginyeria de la Planta Pilot es centra en el disseny amb detall dels diagrames d'enginyeria dels reactors principals del procés, del diagrama de les operacions de separació i acabat, i del diagrama general de serveis. A continuació es desenvolupa el capítol de càlcul d'energies i serveis, en el que s'analitzen els requeriments energètics dels equips de l'etapa de reacció, el dimensionament de les línies principals de serveis de la Planta Pilot, així com el disseny i dimensionat dels serveis generats en la pròpia planta. Posteriorment es procedeix a l'especificació tècnica dels equips químics principals, de les canonades, vàlvules i accessoris utilitzats en el disseny de la planta, i dels instruments de mesura i control necessaris. Finalment es realitza un estudi econòmic de la instal·lació necessària a nivell químic i elèctric per a la realització de la Planta Pilot.

Les conclusions obtingudes essencialment es divideixen en dos conceptes. El primer és el fet que la Planta Pilot dissenyada proporciona l'alt nivell de flexibilitat desitjat per l'empresa client, però en conseqüència disposa d'un menor grau d'automatització i comporta uns requeriments majors de personal, sent evident la necessitat de realitzar un complet anàlisi de riscos abans d'iniciar cada nou procés. En segon terme es dedueix l'elevada inversió econòmica que comporta el disseny i construcció d'aquesta Planta Pilot per a l'empresa farmacèutica.

200 Castaño Salamero, Andrea*Optimización del sistema de refrigeración de un molde de inyección para tapones de polipropileno***Director:** Fernández Santín, José M^a**Departament:** Enginyeria Química**Resum:**

El objeto del presente proyecto es incrementar la productividad de un molde de inyección para tapones de polipropileno mediante la optimización del sistema de refrigeración del mismo. De esta forma, se pretende reducir el tiempo de enfriamiento de la pieza inyectada y en consecuencia, el tiempo del ciclo de inyección.

El molde de inyección actúa como un intercambiador de calor entre la pieza y el refrigerante; así pues, el diseño del sistema de refrigeración se ha basado en el balance térmico del sistema pieza-molde-refrigerante.

Los diseños planteados se han ajustado y validado mediante análisis por elementos finitos (MEF) utilizando el programa de simulación reológica Modflow®, que permite estudiar el comportamiento del material plástico durante el proceso de inyección. Así mismo, se han podido validar los resultados de la simulación teniendo en cuenta los parámetros reales de inyección medidos experimentalmente.

Inicialmente se proponen dos estrategias distintas para optimizar la refrigeración: la primera consiste en optimizar el circuito de refrigeración para la zona del molde más afectada térmicamente, y la segunda se basa en utilizar un material de fabricación del molde con una conductividad térmica más elevada a la del acero convencional.

La mejor opción será aquella con la que se consiga alcanzar la temperatura de molde adecuada de forma rápida y uniforme, con un consumo energético mínimo, es decir, mínimas pérdidas de carga a lo largo del circuito.

Tras analizar comparativamente los distintos modelos propuestos, se recomendaría el uso de insertos de cobre para la fabricación de los punzones del molde; consiguiéndose una reducción del tiempo de ciclo del 46.5% y por tanto, un incremento de la productividad de esta magnitud.

No obstante, debe tenerse en cuenta que las aleaciones base cobre presentan peores propiedades mecánicas que el acero, por lo que cabe esperar una menor vida útil de este componente del molde. Por otra parte, a pesar de que el coste del cobre es mayor, la reducción estimada del coste total por pieza es del orden del 6%, suponiendo un ahorro anual para la producción requerida de más de 6000 euros.

201 Fàbregas Mauri, Jordi*Implantació d'un mètode d'anàlisi de defectes en pintures per automoció***Director:** Cortina Pallas, José Luis**Departament:** Enginyeria Química**Resum:**

El present projecte descriu el procés d'implantació i de verificació d'un mètode de recerca i d'anàlisi de defectes presents en pintures, utilitzat actualment a la planta de Dupont de Wuppertal (Alemanya), a la planta de Dupont de Polinyà. El mètode permet determinar la presència de defectes, concretament Cràters i Insinuacions en pintures, definits com a un defecte que genera molts problemes quan apareix en el sector de les pintures d'automoció.

Posteriorment, una vegada verificat el mètode es provaran dues fabricacions de vernissos produïdes a "Dupont Polinyà", que presentaven defectes a la línia dels clients (Seat i Opel), originats durant el procés de producció. Finalment es realitza un estudi correctiu, basat amb la incorporació d'additius per disminuir la presència de Cràters, amb un resultat d'acceptació correcte de les solucions plantejades, per reincorporar els vernissos a la línia d'aplicació.

Per implantar el mètode s'ha estudiat primer el mètode de Dupont Wuppertal, caracteritzant els paràmetres comuns i resolent les deficiències operatives de l'equipament per la implantació. El nou mètode consisteix en aplicar un producte problema amb un robot aerogràfic - electrostàtic sobre 6 xapes amb una imprimació estandarditzada (Coil Coating), per tal de visualitzar i valorar posteriorment, la presència de defectes sobre la superfície d'aquestes xapes (previ establiment d'uns estàndards visuals de cada defecte).

S'ha habilitat doncs un robot amb una pistola electrostàtica, un suport constituït per dues xapes, una estufa específica i buscats tots els instruments necessaris per complir amb les especificacions requerides pel mètode. El procediment seguit per implantar el mètode ha estat primer una validació de l'equipament utilitzat, per comprovar la correcció del mètode s'ha utilitzat un vernís estandarditzat fabricat a Dupont Wuppertal, que ens ha permès observar que els equips utilitzats per si sols, no són cap font de generació de defectes dins de la pintura.

El pas següent, la cerca de solucions, ha estat provar els dos vernissos problemàtics tal qual respecte el mateix vernís amb una correcció plantejada pel departament tècnic de Dupont, sent comparats amb un segon estàndard, que ha estat comprovat, per descartar que l'origen dels defectes és l'equipament. La valoració dels resultats s'ha efectuat amb un mètode estadístic efectuant un contrast d'hipòtesi entre les diferents proves, assignant un valor de la confiança per poder discriminar, acceptant-se amb seguretat els resultats obtinguts.

Finalment s'han produït a la planta de Dupont 1.000 kg i posteriorment 5.000 kg, d'un dels vernissos amb la correcció, han estat validats amb el mètode i aplicats a la línia d'aplicació.

202 Fayet Pérez, Laia*Estudi de la desactivació del catalitzador per compostos d'arsènic en la primera etapa d'hidrogenació de la fracció de BTX de piròlisis d'hidrocarburs***Director:** Fernández Santín, José M^a**Departament:** Enginyeria Química**Resum:**

La severa desactivació del catalitzador existent en la primera etapa d'hidrogenació del BTX comporta realitzar nombroses parades de producció per poder dur a terme la regeneració del catalitzador. La presència de traces d'arsènic en l'alimentació es creu que és una de les principals causes de la ràpida desactivació però, no obstant, es desconeixen en quins compostos i és present. Per aquest motiu s'ha decidit realitzar aquest estudi amb l'objectiu d'analitzar com afecten diferents compostos d'arsènic durant el procés d'hidrogenació.

El mètode experimental empleat consta en la realització de diferents experiments en un reactor continu de tanc agitat. S'ha seguit l'hidrogenació de l'estirè (reactiu limitant del procés real a planta) afegint diferents compostos d'arsènic utilitzant una alimentació sintètica (95-5% toluè-estirè). Mitjançant un cromatògraf de gasos s'han analitzat diferents mostres preses durant el temps de reacció. Així mateix, també s'ha determinat la dispersió final del catalitzador després de realitzar els tests d'activitat, la possibilitat de recuperació de la superfície activa del catalitzador mitjançant una regeneració i la quantitat d'arsènic adsorbit en el catalitzador en cada cas.

En quan a resultats obtinguts es pot dir que l'efecte d'enverinament depèn del compost d'arsènic utilitzat, així mateix com la possibilitat de regenerar el catalitzador, la intensitat de la desactivació, l'efecte de la concentració d'arsènic i la quantitat d'arsènic absorbit. S'ha demostrat com, efectivament, diferents compostos orgànics d'arsènic i l'arsènic metàl·lic afecten en l'hidrogenació de l'estirè disminuint la conversió i la dispersió final obtinguda. Per aquests verins la regeneració del catalitzador permet la recuperació de part de la superfície activa perduda. No obstant, quan s'utilitza com a verí els productes de la piròlisis de nafta enverinada amb arsènic, efectuada en una termobalança, la dispersió final disminueix dràsticament i no es pot recuperar mitjançant la regeneració. També es mostra com els compostos inorgànics d'arsènic en un principi no

influenciarien en la reacció.

Durant l'experimentació s'ha observat com la conversió final obtinguda depèn del bidó d'alimentació sintètic utilitzat. Es recomana tenir aquesta incidència en compte en futurs experiments, aconsellant treballar durant tot el temps amb un únic bidó.

De l'estudi es conclou que és de gran importància poder determinar exactament el compost o compostos en que l'arsènic es troba present en l'alimentació real, ja que s'ha demostrat que l'afectació i la possibilitat de regeneració depèn del tipus de compost.

203 Fernández Francos, Xavier

Obtenció de materials termoestables amb baixa contracció a partir de la reacció d'una resina epoxi cicloalifàtica amb espirobislactona

Director: Ramis Juan, Xavier; Salla Tarragó, Josep Maria

Departament: Màquines i Motors Tèrmics

Resum:

S'ha estudiat el curat tèrmic de la resina epoxi 3,4-epoxiciclohexancarboxilat de 3',4'-epoxiciclohexilmetil (ECH) fent servir triflat de lantà com a catalitzador, mitjançant tècniques d'anàlisi tèrmica i espectroscòpica. A partir de les dades calorimètriques s'ha caracteritzat la cinètica del procés. S'ha estudiat també l'existència de diferents mecanismes associats al procés de curat, així com la influència del catalitzador i altres reactius en el seu balanç.

La copolimerització d'una resina epoxi amb una lactona condueix a la formació de espiroortoesters (SOEs) intermitjos que expandeixen en polimeritzar. D'aquesta manera es pot reduir la contracció que s'experimenta durant el curat. Fent servir la mateixa metodologia que en el cas de la resina pura, s'ha estudiat la influència de la 1,6-dioxaespiro[4,4]nonano-2,7-diona (S(-BL)) en el procés de curat del sistema ECH/S(-BL), les propietats tèrmiques i mecàniques del material curat i la contracció que s'experimenta durant el procés de polimerització.

204 Fernández Pérez, Cristina

Fabricación de quesos mediante pasterización por Altas Presiones

Director: Riera Valls, Enric

Departament: Enginyeria Química

Resum:

La AP es una técnica con mucho futuro como método para preservar los alimentos e incluso modificar la funcionalidad y mejorar sus propiedades reológicas y sensoriales. Lo más importante de este proceso es que permite la inactivación de microorganismos y enzimas con una máxima retención de vitaminas y de los componentes responsables del sabor, el color y el aroma, cosa que hace que el alimento sea de más calidad. También se tienen evidencias de que esta técnica es efectiva en la inactivación de células vegetativas, y en el caso de las esporas, induce la germinación de éstas con su posterior inactivación.

Existen estudios de aplicación de las altas presiones a quesos elaborados a partir de leche de cabra. Dentro de estos estudios se pueden encontrar, aquellos en los que la alta presión se aplica sobre los quesos, y aquellos en que la alta presión se aplica sobre la leche:

a) Presurización de la leche, utilizando presiones de 500 MPa durante 15 minutos a 20°C, como sustituto al proceso de pasteurización.

b) Presurización del queso antes de su etapa de madurado a 400 MPa durante 5 minutos a 14°C. El presente proyecto se ha centrado en esta última opción.

En los estudios realizados sobre presurización en los quesos se ha conseguido respecto a los quesos no presurizados:

- Reducir la carga microbiana.
- Acelerar el proceso de maduración y salado, consiguiendo por tanto, una reducción del tiempo necesario para ambas operaciones.
- Aumentar el porcentaje de agua en el queso.
- Aumentar el pH.

La integración de la alta presión en la elaboración de queso de cabra, genera unos ahorros en los costes de stock de producto acabado, y en la adquisición de materias primas. Pero por otra parte su implantación representa una inversión inicial elevada, así como unos gastos anuales de mantenimiento, superficie utilizada y consumo de electricidad y agua.

205 Fernández Ros, Javier*Metodología de diseño de proyectos de Ingeniería Química***Director:** Gracia Villar, Santos**Departament:** Projectes d'Enginyeria**Resum:**

Actualmente vivimos en un mundo en que la globalización es una realidad. Esto provoca que los profesionales del sector químico (y del resto de sectores) tengan que adaptarse a esta circunstancia, y transversalmente hay que considerar este factor en la formación de estos profesionales.

Esta realidad se ha materializado finalmente en la elaboración de un modelo de utilidad docente que integra el trabajo individual y en grupo dentro de un espacio de trabajo colaborativo, que aprovecha las nuevas tecnologías de la información y la comunicación, y a su vez, permite la elaboración de proyectos con la interacción de componentes presenciales y virtuales.

Para conseguir esto se requiere una metodología de trabajo que integre la enseñanza de conceptos abstractos con la praxis de un proyecto y la dimensión virtual de un entorno colaborativo tal que se unan:

- Limitaciones académicas presentes, y
- Necesidades formativas para proyectos.

La implantación de la Metodología de diseño de proyectos de ingeniería química permitirá conseguir una formación adecuada a los tiempos actuales, fomentando el autoaprendizaje y la formación continua. Y siempre teniendo presente que la sociedad condiciona una serie de cambios que generan nuevas necesidades que muchos de estos profesionales deberán trabajar para cubrirlos.

206 Freixedes Nuño, Alfredo*Proyecto de construcción de la E.D.A.R. de Uruñuela (La Rioja)***Director:** Saperas Plana, Núria**Departament:** Enginyeria Química**Resum:**

El proyecto de construcción de la E.D.A.R. de Uruñuela se marca el objetivo de definir y valorar las obras de infraestructura de saneamiento y depuración, mediante un sistema compacto, de las aguas residuales urbanas de Uruñuela, un municipio de marcada tradición vinícola situado en la zona de producción de la Denominación de Origen Calificada Rioja (Rioja Alta).

La metodología que se ha aplicado en este proyecto contempla un profundo estudio de la literatura especializada en el tema, una recopilación de la información de población, un inventario de infraestructura de saneamiento y vertidos, un reconocimiento geológico, el estudio del marco legal español y riojano referente a aguas residuales urbanas, y finalmente el análisis de las alternativas.

Para la elección del proceso de depuración óptimo se ha optado por la realización de un Análisis Multicriterio, agregando o combinando diferentes elementos de estudio que, por su heterogeneidad e irrelacionabilidad, resultarían difícilmente comparables.

Como resultado de este método previo, se proyecta una estación depuradora de aguas residuales basada en un proceso biológico de fangos activados en aireación prolongada, con un reactor en dos líneas idénticas. Con ello se pretende dar respuesta a la variabilidad de concentraciones de especies contaminantes existente entre la época de vendimia y el resto del año, ajustando así al máximo los consumos y el funcionamiento a las necesidades reales. Además, la solución adoptada tiene un bajo consumo energético y un bajo coste de mantenimiento, permite una salida medioambientalmente respetuosa de los fangos producidos, y minimiza la excavación necesaria para su implantación.

En general, el diseño de una depuradora de aguas residuales para un pequeño núcleo urbano da buenos resultados debido a que el residuo de origen doméstico está bien caracterizado. El único gran problema que se plantea son las limitaciones económicas y presupuestarias de una pequeña comunidad que debe cumplir con las normativas de vertido vigentes.

207 Gallego Rico, Pere*Influència de les condicions d'injecció sobre la resistència de peces sobreinjectades***Director:** Gordillo Aubert, Antonio**Departament:** Enginyeria Química**Resum:**

En aquest estudi s'intenta veure com influeixen les condicions d'injecció sobre la resistència de la interfase d'un TPV (Termoplàstic elastòmer vulcanitzat dinàmicament) sobreinjectat sobre un polipropilè. La resistència de la interfase és mesura amb la força a què trenca aquestes peces sobreinjectades en un assaig a tracció: és la

força d'adhesió. Un TPV es defineix com un materials similar a una goma però que ofereix al processar-lo característiques semblants als termoplàstic.

S'estudia aquesta influència en dues geometries de diferent gruix, per veure també com afecta. Les geometries són: en peces d'halter de 4,5 mm de gruix (ISO) i en plaques d'1 mm d'espessor.

A les peces ISO, després d'un estudi del procés d'injecció, s'estudia la influència en la força d'adhesió de les peces sobreinjectades: de la temperatura d'injecció, de la temperatura a la que es posa el polipropilè, de la temperatura del motlle, de la pressió de manteniment i del temps d'injecció. Finalment, la temperatura d'injecció influeix molt a la força d'adhesió i en menor mesura també ho fan el temps d'injecció i la pressió de manteniment. En canvi no són significatives les altres variables.

S'estudia la fractografia, analitzant les superfícies després del trencament. S'observa com a fins una determinada força d'adhesió l'adhesió és adhesiva, mentre que a partir d'aquesta força augmenta dràsticament l'adhesió cohesiva, fins un punt en què tota l'adhesió és cohesiva.

De la geometria d'1 mm de gruix, s'estudien les variables significatives en les peces ISO i s'afegeix la temperatura del motlle, al considerar-se que a una geometria més fina la temperatura del motlle pot afectar més. Influeixen les mateixes variables que abans i a més la temperatura del motlle. Ara la temperatura d'injecció no està tan destacada en la seva influència, encara que segueix sent la que més influeix.

Es simula la injecció en aquesta última geometria per relacionar paràmetres del TPV en la sobreinjecció amb la força d'adhesió, es veu com la pressió màxima en la interfase és relaciona amb la força d'adhesió i l'efecte que més influeix a aquesta pressió és la temperatura del TPV en la interfase. Les dades experimentals i simulades concorden.

208 García Ferreras, Ester; Hernández Martín, Patricia

Preparación y evaluación de soportes poliméricos impregnados con micro y nano partículas metálicas en la eliminación de contaminantes en aguas subterráneas

Director: Cortina Pallas, José Luis

Departament: Enginyeria Química

Resum:

El objetivo de este proyecto es la evaluación de eliminación de ciertos contaminantes presentes en las aguas subterráneas mediante soportes poliméricos impregnados en micro y nano partículas metálicas que previamente han sido preparados y caracterizados.

Esta etapa de evaluación preliminar supone la etapa previa a su aplicación en ensayos de reactividad en columnas reactivas a escala piloto, que son el requerimiento necesario para su posterior evaluación a escala real.

Los soportes poliméricos utilizados son tres tipos de soportes micro y macroporosos, de los cuales dos de ellos pertenecen al grupo de los intercambiadores de cationes, macroporosos, débilmente ácidos con grupo funcional carboxílico. El otro tipo de soporte pertenece al grupo de los intercambiadores de cationes, geliformes, fuertemente ácidos con grupo funcional sulfónico.

Previamente al estudio con los soportes poliméricos, se ha estudiado la reducción de los contaminantes elegidos, Seleniato (SeO_4^{2-}), Arseniato (AsO_4^{2-}), Nitrato (NO_3^-) y Cromato (CrO_4^{2-}) con las partículas metálicas Hierro ($\text{Fe}(s)$) y Cinc ($\text{Zn}(s)$), las cuales han sido elegidas como agentes reductores de los contaminantes, debido a su elevado potencial de oxidación.

Los resultados obtenidos en este estudio previo, muestran que el contaminante Cromato es el que presenta mayor eficacia de reducción ante estas partículas. De esta forma, se estudia entonces la reducción de este contaminante mediante los soportes poliméricos impregnados en Hierro o Cinc.

Estos nuevos resultados muestran que los soportes poliméricos impregnados en partículas metálicas son apropiados para la reducción del Cromato, y son así una alternativa viable para su descontaminación en las aguas subterráneas mediante barreras reactivas.

209 Gastone, Carolina Sylva Mariantonietta

Estudio estructural de poliésteres derivados del 1,8-octanodiol y ácidos dicarboxílicos impares

Director: Puiggalí Bellalta, Jordi

Departament: Enginyeria Química

Resum:

En este Proyecto Final de Carrera se aborda el estudio de la estructura y la morfología cristalina de los poliésteres sintetizados mediante policondensación del diol 1,8-octanodiol con el ácido pimélico (PE(8,7)) y el ácido azeálico (PE(8,9)).

El estudio de la estructura cristalina se realizo utilizando las técnicas de difracción de electrones y de rayos X . Se determinó que ambos polímeros adoptaban una conformación molecular casi completamente extendida y

una estructura cristalina rómbica. Los parámetros de la celda cristalina son $a = 5,02 \text{ \AA}$, $b = 7,45 \text{ \AA}$ y $c = 41,8 \text{ \AA}$ para el PE(8,7), y $a = 5,00 \text{ \AA}$, $b = 14,82 \text{ \AA}$ y $c = 46,29 \text{ \AA}$ para el PE(8,9). Los grupos espaciales son los $m n b P 1 1 1 2 2 2$ y $P21ab$ para los poliésteres PE(8,7) y PE(8,9), respectivamente.

La simulación de los diagramas de difracción de electrones y de rayos X ha permitido deducir el ángulo azimutal y la posición relativa de las cadenas moleculares en la correspondiente celdilla cristalina.

La morfología de las lamelas cristalinas se estudio ensayando diferentes disolventes como 1-butanol, 1-hexanol, 1-heptanol, 1-octanol, 1-nonanol, 1,4-butanodiol, 2-metil-2,4- pentanodiol y 2,5-hexanodiol, y diferentes temperaturas de cristalización. Puede destacarse que ambos polímeros cristalizan en forma de rombos truncados formando agrupaciones en terrazas y dislocaciones helicoidales. Ocasionalmente, concretamente cuando se utiliza 1- nonanol, se consigue la forma de rombo no truncado.

Se insistió también en el análisis morfológico mediante microscopia óptica de films obtenidos por evaporación de disoluciones concentradas. Puede destacarse que se observaron algunos cristales simples cuando estas películas presentaban un reducido espesor y se preparaban con un reducido grado de subenfriamiento. Estos cristales tenían formas de rombos truncados y bordes redondeados.

Por último, se estudió la degradación enzimática de cristales lamelares, utilizando en concreto dos enzimas: Pseudomonas Cepacia y Rhizopus Arrhizus. Con la Pseudomonas Cepacia el ataque por hidrólisis del enlace éster se inicia en los bordes de los cristales, mientras que con Rhizopus Arrhizus el ataque ocurre preferentemente en la superficie lamelar.

210 Giménez Bayo, Raquel

Copolimerización de una resina epoxi con una espirobislactona para obtener materiales termoestables con baja contracción y potencialmente degradables

Director: Ramis Juan, Xavier

Departament: Màquines i Motors Tèrmics

Resum:

En el presente documento se estudia el proceso de curado de la resina epoxi diglicidil éter de bisfenol A (DGEBA) con la 1,6-dioxaspiro [4,4] nonano-2,7-diona (s(g-BL)) utilizando triflato de iterbio como iniciador.

El proceso de curado se ha estudiado mediante técnicas de análisis térmico y espectroscópico. Se ha caracterizado la cinética del proceso de curado a partir de los datos calorimétricos, y mediante FTIR se han observado las reacciones que intervienen en el proceso de curado al igual que la evolución de los diferentes grupos reactivos. Se ha observado que la formación de espiroortoésteres (SOEs) intermedios, que posteriormente polimerizan, y la homopolimerización de s(g-BL) reducen la contracción después de la gelificación.

Finalmente, se ha analizado la influencia del iniciador en el curado y de forma preliminar, se ha estudiado el hecho de que los sistemas ensayados sean materiales potencialmente degradables mediante degradación hidrolítica y térmica.

211 Gómez Flores, José Luis

Protocolo de cualificación de un equipo de microfiltración para producir inmunoglobulina intravenosa

Director: Fernández Santín, José M^a

Departament: Enginyeria Química

Resum:

La inmunoglobulina es una proteína derivada del plasma sanguíneo que actúa como agente terapéutico de gran valor para pacientes con problemas de deficiencias de anticuerpos e inmunoregulatorios. Durante su fabricación, que se inicia con el fraccionamiento del plasma sanguíneo, son muy importantes las operaciones de separación por membrana en etapas de concentración, purificación, clarificación y esterilización de la proteína. Una de estas operaciones de separación por membrana que juega un papel importante en el proceso de fabricación es la microfiltración. Por lo tanto, en el presente proyecto se incluye el protocolo de cualificación del equipo de microfiltración de flujo tangencial empleado en la fabricación de inmunoglobulina intravenosa (IGIV). Este protocolo lo he ideado, creado y desarrollado formando parte del personal de la empresa Instituto Grifols, S.A. como técnico del departamento de validaciones.

Para llegar a la elaboración del protocolo, el presente estudio cuenta también con una presentación del producto fabricado (IGIV) en la que se hace referencia a la evolución de su uso como terapia curativa, a sus características y propiedades, a sus aplicaciones clínicas, etc. Además se incluye una descripción del método de producción, una referencia a las operaciones de separación por membrana más importantes (dada su relevancia en el proceso de fabricación) -haciendo especial hincapié en la microfiltración- y un breve repaso a los pilares principales de la normativa GMP (Good Manufacturing Practices), uno de los cuales incide en la obligatoriedad de las validaciones de procesos e instalaciones, entre otras, dentro de la industria farmacéutica.

El protocolo de cualificación está constituido, a grosso modo, por cuatro partes destacadas: una descripción del equipo de microfiltración y de su operativa dentro del proceso de fabricación; una descripción del método de cualificación (en ella se incluyen la cualificación de la instalación, la cualificación operacional y la validación del proceso de microfiltración); los criterios de aceptación para dar por válida la cualificación; y las exigencias de recualificación periódica del equipo.

También se realiza una valoración económica y un estudio medioambiental. En la valoración económica se compara el desembolso que supone para una empresa farmacéutica la cualificación de la unidad de microfiltración si ésta la hace un técnico de un departamento propio de validaciones, o si se contrata un técnico de una empresa externa. En el estudio medioambiental se indican los principales impactos ambientales que conlleva la actividad de la unidad de microfiltración y cómo se gestionan los residuos que ésta genera.

Finalmente como conclusiones, destacar que son de vital importancia las validaciones, además de para conseguir los permisos oficiales de fabricación y venta, para asegurar una correcta calidad del producto fabricado y una correcta ejecución de los diferentes procesos de fabricación.

212 González Ciurana, Ester

Eliminació de contaminants en aigües subterrànies mitjançant partícules metàl·liques impregnades en suports polimèrics

Director: Cortina Pallas, José Luis

Departament: Enginyeria Química

Resum:

“Tractament passiu in situ mitjançant material reactiu que degrada o immobilitza contaminants a mida que l'aigua subterrània flueix a través seu” [EPA, 2004]. Les barreres reactives permeables s'instal·len com a unitats permanents, semi-permanents o mòbils. El medi de tractament degrada, adsorbeix, precipita o elimina els contaminants de l'aigua. Aquesta tècnica està guanyant acceptació en els últims anys degut a la bona relació cost-eficiència que presenta en aplicacions ambientals.

En aquest projecte es vol fer una avaluació preliminar, a nivell de laboratori, de l'eficiència de diversos materials de farciment per a l'eliminació dels contaminants cromat i arseniat presents en aigües subterrànies. S'estudien dos tipus ben diferenciats de medis reactius: per una part, les nanopartícules metàl·liques suportades en una matriu polimèrica i, per l'altra, compostos de ferro i bari de diferents composicions. Aquesta és una etapa absolutament necessària per a valorar l'aplicació posterior a escala real.

Els suports polimèrics utilitzats son resines d'intercanvi iònic – aniònic i catiònic -, que degut a la seva elevada àrea superficial específica, presenten una major superfície reactiva. S'estudia també la síntesi i la impregnació d'aquests suports i se'n fa una caracterització físico-química.

El tractament d'aigües subterrànies mitjançant el ferro com a medi reactiu en barreres reactives permeables es basa en la reacció redox entre el ferro metàl·lic – fort reductor - i el contaminant oxidant. En canvi, en el tractament d'arsenic el fonament de l'eliminació resideix en la formació de formes insolubles de Ba (II) i - 3 4 AsO () (2 4 3) (s AsO Ba).

213 González Milà, Héctor

Construcción de un sistema de movimiento biomimético empleando polímeros conductores

Director: Armelin, Elaine

Departament: Enginyeria Química

Resum:

Las aplicaciones de los polímeros conductores son numerosas y variadas, entre ellas destacan: baterías orgánicas, visores electrocrómicos, sensores químicos, diodos emisores de luz, aditivos anticorrosivos, entre otras. Por otra parte cualquier dispositivo que incorpore un polímero conductor requiere un compromiso entre la conductividad, la procesabilidad, la solubilidad y la estabilidad química y ambiental.

El presente proyecto de fin de carrera está dividido en tres apartados:

1. La primera parte consiste en la síntesis de polímeros conductores y copolímeros del politiofeno, sustituido en la posición 3, por medio de polimerización electroquímica.
2. A partir de los polímeros obtenidos se realizan ensayos fisicoquímicos pertinentes con la finalidad de evaluar la procesabilidad, la solubilidad y las propiedades conductoras.
3. Por último se plantea la construcción de un dispositivo capaz de simular el mecanismo de un músculo artificial, una de las aplicaciones más espectaculares en el campo de la biomedicina y biotecnología publicadas hasta el momento.

La síntesis electroquímica de polímeros conductores ha resultado exitosa especialmente en el caso del homopolímero del 3-metil tiofeno, y ha resultado más complicada en el caso de intentar sintetizar electroquímicamente copolímeros de este monómero con sus derivados sustituidos con grupos ácidos en la

posición 3, debido a la dificultad de encontrar un medio de generación adecuado. La construcción del dispositivo capaz de simular el mecanismo de un músculo artificial ha resultado exitosa en el caso del polipirrol. Además, el poli-3-metiliofeno representa un serio candidato para simular dicho mecanismo debido a la estabilidad de su par redox y a su capacidad de almacenar carga por unidad de masa.

214 Haro Fernández, Joan

Estudi de processos d'obtenció de dimetil éter per a ús químic i energètic

Director: Fernández Santín, José M^a

Departament: Enginyeria Química

Resum:

El DME (dimetil éter) s'utilitza en la indústria de l'aerosol per les seves excel·lents propietats com a propulsor. Tanmateix, el continu augment dels preus del petroli i la preocupació global sobre el medi ambient poden provocar que es creï un nou mercat per aquest producte, i és el mercat energètic. En aquest document es pretén estudiar el DME des d'un punt de vista de producte i de mercat i avaluar la viabilitat de produir DME amb característiques energètiques.

Un bon propulsor per a la indústria de l'aerosol és necessari que tingui una elevada pressió de vapor, que no sigui inflamable, que no constitueixi una amenaça per a la capa d'ozó i que sigui un bon dissolvent. Totes aquestes característiques les compleix el DME a excepció de la inflamabilitat, doncs el DME és un compost inflamable. Alhora, és necessari que el propulsor no confereixi olors i per tant les especificacions són exigents, traduint-se això en costos de producció alts i en última instància en un preu elevat. En l'estudi d'un procés d'obtenció de DME pur, on s'ha emprat el simulador HYSYS per calcular els balanços de matèria i energia, s'ha arribat a un cost de producció de 0,595 €/kg de DME, que es considera baix tenint en compte que el preu de venda del DME està al voltant de l'euro per kg de producte.

Si es pretén utilitzar el DME com a combustible, ja sigui en motors Dièsel o simplement com a substitut del propà, és necessari una disminució substancial dels costos de producció que només es pot assolir amb un procés de síntesi global a partir d'una matèria prima abundant i barata com el gas natural i una capacitat de producció elevada per aprofitar l'economia d'escala. Aquesta reducció en els costos de producció es veu afavorida pel tipus de producte que es fabrica, doncs no és necessari una puresa de DME elevada. Un disseny d'un procés d'obtenció de DME energètic, realitzat en part amb el simulador HYSYS, ha donat un cost de producció de 0,441 €/kg de DME, cost superior al necessari per tal d'oferir un producte competitiu i que pot considerar-se de 0,3 €/kg de DME.

El preu de venda del DME energètic no es pot preveure fàcilment doncs depèn de moltes variables, però en qualsevol cas la conversió d'una planta productora de DME químic a partir de metanol en una altra de DME energètic no és possible doncs cal una reducció important en els costos de fabricació i per tant és imprescindible un procés diferent.

215 Jaureguiberry Stagnaro, Tomás

Estudio comparativo de procesos de recuperación de CO2 por absorción con aminas

Director: Fernández Santín, José M^a

Departament: Enginyeria Química

Resum:

El reciente movimiento en el mercado del dióxido de carbono, y el renovado interés por la reducción en la emisión atmosférica de gases de efecto invernadero, está dando lugar a diferentes estudios para la recuperación de este gas procedente de gases de combustión.

El siguiente estudio contiene dos partes principales, claramente diferenciadas:

1. Un estudio comparativo con diferentes aminas sobre un esquema básico del proceso de absorción química. La comparación se divide en una parte cuantitativa, llevada a cabo con la ayuda de un simulador de procesos químicos, y otra donde se reflejan otras características de gran importancia no incorporadas en la simulación. El resultado es la selección de la monoetanolamina (MEA) con inhibidor, que optimiza el coste de producción, y a su vez se ajusta de mejor manera a las propiedades y condiciones de operación fijadas.

2. Diseño preliminar de una planta de recuperación de CO₂ de gases de combustión por absorción química, utilizando el solvente seleccionado en el estudio anterior. Aquí se contemplan todas las etapas de las que consta un proceso real: enfriamiento, absorción, recuperación y regeneración de la amina, y finalmente la licuación del CO₂.

Mediante una purificación del producto final, se ajustaría a las especificaciones requeridas por las diversas aplicaciones industriales relacionadas con el dióxido de carbono.

Finalmente, se estudia la viabilidad económica del proceso. El indicador más importante para hacer las valoraciones pertinentes será el coste de producción por tonelada de producto, que tiene que ajustarse a las

condiciones que marca el mercado referente a la cotización del CO₂ licuado. Y como complemento a este indicador, se hace una valoración de los ahorros económicos (relacionados directamente con el pago por derechos de emisión de dióxido de carbono, regulado en el Plan Nacional de Asignación de Derechos de Emisión) y del beneficio en el impacto ambiental que implica la disminución de la emisión atmosférica de CO₂ por parte de las empresas que utilizan este tipo de tecnologías.

Los resultados obtenidos son prometedores, cumpliendo así con dos de las premisas más importantes que mueven el mundo industrial: costes de producción competitivos y disminución de las emisiones atmosféricas de dióxido de carbono.

216 Martí Barroso, Mireia

Caracterización y propiedades anticorrosivas de pinturas marinas modificadas con polímeros conductores

Director: Iribarren Laco, J. Ignacio

Departament: Enginyeria Química

Resum:

El objetivo del presente proyecto es evaluar los distintos conceptos teóricos relacionados con la corrosión y analizar las medidas de protección para evitarla. En concreto, el estudio se basa en la aplicación de algunos polímeros conductores como potenciales inhibidores de la corrosión. El trabajo consta de una parte experimental donde se caracteriza una serie de pinturas marinas de diversa naturaleza, mediante espectroscopía de infrarrojos, termogravimetría, y ensayos de tracción-deformación. Una vez caracterizadas, el objetivo es añadir uno o varios polímeros conductores a estas formulaciones, pintar pequeñas placas de acero y someterlas a ensayos acelerados de corrosión con la ayuda de un robot automatizado. Los resultados son analizados por medio de espectroscopía de infrarrojo y microscopía óptica. Además de la caracterización físico-química y de los ensayos de corrosión, otro objetivo de este trabajo es definir las propiedades reológicas de las pinturas estudiadas. El estudio reológico es de vital importancia en las pinturas y por este motivo se lleva a cabo un análisis cuantitativo de algunos parámetros reológicos, como son la viscosidad y la tixotropía.

Por otro lado, la utilización de monómeros de polímeros conductores como inhibidores de la corrosión es una posible medida de protección descrita en la literatura. En este caso no se utilizan pinturas que recubran las placas de acero, sino que el monómero, ácido 3-tiofenilacético, directamente se introduce en el medio de corrosión. Los ensayos se realizan mediante el mismo robot automatizado mencionado anteriormente. El objetivo en este caso es la protección de depósitos u otros espacios en los que el medio corrosivo sea finito y se pueda mantener una concentración constante de inhibidor. En conclusión, los resultados de los ensayos realizados muestran que la acción del inhibidor sólo es positiva para concentraciones intermedias, entre 5·10⁻⁵M y 5·10⁻⁴M, de inhibidor. Para concentraciones bajas o elevadas el ácido 3-tiofenilacético no funciona como inhibidor.

Otras conclusiones que se derivan de este proyecto son principalmente que la mejora de la protección contra la corrosión que ofrecen las pinturas modificadas con polímeros conductores depende de factores como: la naturaleza de la pintura, composición del polímero conductor y su miscibilidad en la mezcla pintura/disolvente. El mejor resultado se ha obtenido con una pintura alquídica modificada con polianilina, un polímero conductor derivado de la anilina. De los ensayos reológicos se deduce que las pinturas siguen distintos comportamientos reológicos: plástico general, plástico de Bingham y pseudoplástico. En las mismas condiciones de ensayo, la tixotropía de las pinturas aumenta para tiempos de proceso bajos y gradientes de velocidad elevados. Así mismo, la viscosidad se reduce en aumentar la temperatura.

217 Mesas Suárez, Mireia

Avaluació de sistemes d'eliminació de matèria orgànica natural d'aigües potables

Director: Cortina Pallas, José Luis

Departament: Enginyeria Química

Resum:

Aquest projecte es centra en la problemàtica derivada de la presència de matèria orgànica natural (MON) a l'aigua potable, estudiant el cas concret de les aigües de la ciutat de Manresa. Quan es sotmet l'aigua a la cloració durant el tractament a l'Estació de Tractament Aigua Potable (ETAP), la MON reacciona amb el clor i origina compostos halogenats, principalment trihalometans (THM) i àcids acètics halogenats (HAA), que suposen un greu perill per la salut pública.

En la primera part del projecte es detallen els processos que donen lloc a la formació dels compostos halogenats, fent un estudi dels diferents factors que afavoreixen aquest procés.

A l'etapa següent del document, s'exposa una relació dels mètodes existents actualment per a l'eliminació de MON de l'aigua, comentant i analitzant els seus avantatges, inconvenients, aplicacions habituals i la viabilitat en

el cas que es tracta.

Posteriorment, es procedeix a la selecció de diferents sorbents segons criteris econòmics i tècnics que podrien ser adequats per al disseny d'un sistema d'eliminació de MON en el cas que s'estudia. Amb aquests sorbents es realitza un muntatge experimental amb columnes a escala laboratori, que permetrà determinar el comportament de cadascun dels materials, l'efecte d'aquests sobre alguns dels paràmetres de qualitat característics de l'aigua i fer una estimació de les respectives capacitats d'eliminació de MON. En conseqüència, l'experiència serà de gran utilitat per a decidir quin sistema de tractament és el més adequat.

A continuació, es defineixen les anàlisis a les quals s'ha sotmès l'aigua a la sortida de les columnes per a controlar els diferents paràmetres d'interès i s'exposen els resultats del seguiment i les conclusions que se'n poden extreure. Es demostra que els resultats obtinguts pels quatre sorbents han estat positius, és a dir, que s'ha donat una eliminació de MON eficient de l'aigua fins al moment en què s'ha finalitzat el projecte. L'efecte dels sorbents sobre els paràmetres de qualitat de l'aigua analitzats ha estat poc significatiu. De totes maneres, cal destacar que no s'ha arribat a la saturació dels sorbents i que en conseqüència les conclusions que s'exposen en el projecte són de tipus preliminar.

Finalment, es proposa de dur a terme un experiment de camp per a ampliar les conclusions i tenir més informació a l'hora de determinar el sistema idoni a instal·lar en una ETAP. Es realitza un disseny del possible experiment de camp, per a ser col·locat en les instal·lacions de l'ETAP, amb unes dimensions superiors a les del muntatge a escala laboratori estudiat, i amb un cabal d'aigua tractada més elevat, que permetrà obtenir resultats més similars als del sistema que es vol implementar.

218 Moreno Rabasco, M^a Carmen

Valoración del residuo de rapa de uva como bioadsorbente para la eliminación de cadmio de efluentes acuosos

Director: Martínez Martínez, María

Departament: Enginyeria Química

Resum:

Los metales pesados son sustancias tóxicas capaces de causar graves daños en los organismos vivos. Una de las principales propiedades de los metales pesados es que no son biodegradables y permanecen durante mucho tiempo en el entorno, circulando y acumulándose en el medio y los seres vivos, por lo que es necesario evitar su incorporación al entorno a través de vertidos contaminados.

De entre los distintos metales tóxicos, el cadmio es uno de los más peligrosos. La contaminación por este metal se debe principalmente a procesos industriales como la fabricación de baterías de Ni-Cd, procesos de electroplateado, fabricación de pigmentos y estabilizadores y la minería de otros metales que contienen cadmio como impureza.

Los principales métodos de eliminación de cadmio de efluentes acuosos son la precipitación química, el intercambio iónico, la ósmosis inversa y la adsorción, siendo el carbón activo y las resinas de intercambio iónico los principales materiales utilizados. El principal problema que plantean estos materiales es su alto coste y regeneración, lo que lleva a buscar materiales alternativos para la descontaminación de efluentes acuosos.

Residuos procedentes de procesos industriales o agrícolas, como es el caso del residuo de raspo de uva, corcho y hueso de oliva, se estudian como posibles biosorbentes para metales pesados.

En este proyecto se ha estudiado la sorción de cadmio sobre residuo de raspo de uva mediante experimentos en columna obteniéndose los siguientes resultados:

- El residuo de raspo de uva presenta una buena capacidad de sorción de cadmio.
- La presencia de cobre en disolución disminuye en más de un 50% la cantidad de cadmio retenida por el residuo vegetal.
- La elución de metal mediante disolución de HCl en flujo continuo no es factible debido al escaso porcentaje de metal recuperado.

219 Ochagavía Chueca, Ana Soraya

Estudio estructural de poliésteres derivados del 1,8-octanodiol y ácidos dicarboxílicos pares

Director: Puiggalí Bellalta, Jordi

Departament: Enginyeria Química

Resum:

Se han estudiado las estructuras cristalinas de los poliésteres alifáticos derivados del 1,8-octanodiol y los ácidos subérico y sebácico (PE(8,8) y PE(8,10)) mediante las técnicas de difracción de rayos X y microscopía electrónica.

Los citados poliésteres se sintetizaron mediante una policondensación en masa por etapas, utilizando como catalizador tetrabutóxido de titanio IV.

Se prepararon cristales lamelares a partir de cristalizaciones isotérmicas de disoluciones diluidas en alcoholes. La morfología básica de los cristales corresponde a rombos truncados, obteniéndose monocristales, crecimientos en terrazas y dislocaciones helicoidales - L y -D. Las técnicas de decoración con polietileno ponen de manifiesto una sectorización de los cristales y un plegamiento molecular regular a lo largo de éstos. Asimismo, se ha llevado a cabo la degradación enzimática con las lipasas de *Pseudomonas Cepacia* y *Rhizopus Arrhizus*.

La cristalización desde el fundido da lugar a esferulitas de textura fibrilar con una birrefringencia negativa. Destaca la obtención de diagramas de extinción anillados para el PE(8,8).

El PE(8,8) cristaliza en una celda rómbica con parámetros $a = 5,03\text{Å}$, $b = 14,78\text{Å}$ y $c = 21,70\text{Å}$ y simetría P21ab. Mediante los estudios de simulación del diagrama de difracción de electrones y rayos X, se ha podido determinar el ángulo azimutal y la disposición relativa de las cadenas moleculares en la celdilla cristalina.

El PE(8,10) cristaliza en una celda monoclinica con parámetros $a = 5,56\text{Å}$, $b = 7,50\text{Å}$, $c = 24,63\text{Å}$ y $\beta = 115,1^\circ$, con una simetría P121/a1. A semejanza del poliéster anterior, la cadena molecular adopta una conformación prácticamente extendida.

220 Pizarro Romero, Sara

Análisis de riesgos de una planta química fina ubicada en zona urbana

Director: Vílchez, Juan Antonio

Departament: Enginyeria Química

Resum:

El presente proyecto tiene como objetivo la realización de un estudio de riesgos de una planta de química fina. Se introduce en el primer capítulo la normativa legal aplicable a los establecimientos que contienen sustancias consideradas como peligrosas, tanto a nivel europeo como estatal, autonómico y local.

Se aborda a continuación una descripción de las diferentes técnicas de identificación de peligros, entre ellas el Análisis Histórico de accidentes y el Análisis de Peligros y operabilidad (HazOp) y los métodos utilizados para el cálculo de efectos (radiación térmica, dispersiones tóxicas, ondas de presión, etc.). Se comentan además las diferentes tipologías de accidentes que pueden producirse en este tipo de instalaciones y las zonas de riesgo definidas por la legislación, así como los métodos para la estimación de la vulnerabilidad de las personas, los bienes y el medioambiente frente a los accidentes.

En el Capítulo 4 se plantean los posibles escenarios accidentales y se presentan los resultados de la aplicación práctica realizada sobre un establecimiento real de química fina. En la primera parte se describe brevemente el proceso, la instalación y sus medidas de protección y las sustancias presentes.

Por último se realiza una interpretación del resultado en relación a la política urbanística de la zona, evaluando la adecuación del establecimiento a su ubicación en la zona urbana.

Pese a que los efectos de los accidentes planteados no exceden, en general, los límites del establecimiento, los resultados extraídos del estudio llevan a la conclusión de que su ubicación no es la adecuada según normativa vigente, cosa que podría causar problemas en el momento de la renovación de la Autorización Ambiental.

221 Ruiz Cano, Verónica

Centro de soporte a la pequeña y mediana industria para las mejoras de calidad y el desarrollo de nuevas aplicaciones de polímeros

Director: Fernández Santín, José M^a

Departament: Enginyeria Química

Resum:

El proyecto que se presenta a continuación, consiste en la concepción de un Centro de soporte destinado a la pequeña y mediana empresa dedicadas a la transformación de polímeros, principalmente, a la inyección de plásticos. Este Centro ofrecería ayuda y asesoramiento sobre temas relacionados con las mejoras en la calidad y sobre el desarrollo de nuevas aplicaciones de polímeros.

En este documento se perfilan las características de los polímeros, así como, una breve introducción de la situación de la actividad económica relacionada con la aplicación de estos materiales. A continuación, se definen algunas nociones generales sobre la calidad, haciendo énfasis en los aspectos relacionados con la gestión de Calidad Total según las normas ISO 9000, terminando con la definición del concepto del control de la Calidad Total relacionado con el proceso de producción.

Una vez introducidos todos estos aspectos, se aplican los criterios de Calidad Total al proceso de inyección de piezas de plástico, aportando de forma esquemática los conceptos y la terminología necesarios para analizar los efectos de las variables en las distintas etapas del proceso, y elaborar a partir de toda esta información una serie de documentos para la comprobación de fallos y defectos en piezas, con miras a disponer de una

metodología para la corrección y mejora de la calidad.

Con lo expuesto, se aborda un caso práctico en el que se analizan las posibles causas de defectos y se proponen acciones correctoras a problemas que aparecen en diversas piezas de plástico inyectadas. Los resultados del análisis se contrastan con las decisiones que la empresa tomó en su día para corregir los defectos. De este modo, se comprueba que la documentación elaborada es adecuada y efectiva en un caso real.

Por último, se presenta el estudio del Centro tal y como se ha concebido, mostrando los servicios que podría ofrecer, mediante la formación de especialistas y la realización de pruebas y ensayos, así como su organización y los recursos necesarios. Además, se presenta la infraestructura necesaria, teniendo en cuenta aspectos relacionados con la seguridad y el medio ambiente, y se concluye con una evaluación de costes e inversión.

222 Travaille, Grégory

Técnicas de Análisis de Riesgo para la Remediación de Suelos y Aguas Subterráneas Contaminados por Hidrocarburos

Director: Cortina Pallas, José Luis

Departament: Enginyeria Química

Resum:

El objetivo de este proyecto es la elaboración de una herramienta de cálculo para todas las personas interesadas en la evaluación del riesgo debido a la contaminación de suelos y aguas subterráneas.

La contaminación de aire y de agua por compuestos volátiles presentes en el suelo y aguas subterráneas contaminadas es un área emergente debido a la preocupación en la salud pública. La liberación de estos vapores y su incorporación a depósitos en aguas tiene lugar a través de una serie de procesos de transporte desde el suelo a ambientes tanto exteriores como interiores (ambientes industriales y domésticos).

La Agencia de Protección Medioambiental de Estados Unidos (U.S. Environmental Protection Agency, EPA) ha desarrollado unas herramientas para evaluar el riesgo de la contaminación del suelo y aguas subterráneas. Estas herramientas fueron diseñadas para determinar solamente si hay un riesgo potencial inaceptable, pero no para proporcionar recomendaciones en cómo delinear el grado del riesgo o cómo eliminar el riesgo.

Tomando esos problemas en cuenta y tratando el caso de contaminación por hidrocarburos se ha desarrollado una herramienta de evaluación de contaminación de aguas subterráneas y aire que permite llegar a la determinación del tipo de riesgo al que están expuestas las personas.

La aplicación de modelos existentes para desarrollar y validar esta herramienta ha sido imprescindible. Los modelos más robustos como el modelo de Buscheck y Alcantar en el caso de contaminación de aguas o Johnson y Ettinger en el caso de contaminación de suelos fueron las bases de este estudio permitiendo modelizar la contaminación del agua subterránea y del suelo, en función respectivamente de la distancia de la fuente al pozo y de la altura de la fuente al edificio o emplazamiento en el que se encuentran las personas potencialmente afectadas.

Una vez modelizado la dispersión de contaminante a través del suelo y del acuífero, los datos obtenidos han permitido implementar la noción de riesgo haciendo una clara diferencia entre riesgo sistémico (no cancerígeno) y riesgo cancerígeno.

La implantación de una herramienta así ofrece la oportunidad, conociendo los datos referentes a un emplazamiento contaminado, de dar unas respuestas rápidas a las cuestiones sobre riesgo aceptable o inadmisibles.