RESUMEN

En la presente Tesis Doctoral se estudió la degradación de una mezcla de ocho compuestos fenólicos mediante diferentes procesos de oxidación avanzada. Se trataron mediante proceso foto-Fenton solar donde aplicando un diseño experimental tipo Doehlert se determinó que el proceso se puede extender hasta valores por encima de pH 2.8, probablemente debido a la formación de complejos del hierro con los compuestos fenólicos. En el tratamiento mediante ozono y la combinación de ozono con luz se estudió el efecto que la concentración de contaminante, el pH y la dosis de ozono tienen sobre el proceso. En general, la combinación del ozono con la luz resultó más eficaz en los casos más desfavorables, es decir, aquellos en los que la dosis de ozono era baja y/o el pH más ácido. La mineralización resultó ser superior en la combinación de ozono con luz y se alcanzó la detoxificación de las muestras en ambos ensayos. Se analizó la toxicidad mediante diferentes bioensayos, resultando el compuesto 2,4-dinitrofenol ser el más toxico para todos los ensayos.

Para la monitorización de los contaminantes en los tratamientos, se midieron matrices de Excitación/Emisión (EMM) de fluorescencia. En el caso del proceso foto-Fenton, a los 12 minutos, todos los cromóforos habían desaparecido. En el tratamiento con ozono, se observa la aparición de nuevos cromóforos cuya intensidad va disminuyendo con el tiempo de tratamiento sin llegar a desaparecer por completo.

Se han realizado matrices de Excitación/Emisión (EEMs) para estudiar la posible formación de complejos entre sustancias tipo húmicas (STH) y el hierro, así como los posibles cambios experimentados a lo largo del proceso foto-Fenton. Mediante análisis de factores paralelos (PARAFAC) se identificaron tres componentes. Se determinó la constante de estabilidad de los componentes con el Fe(III) a diferentes valores de pH, obteniéndose el máximo para pH 5. Los experimentos fotoquímicos empleando STH y Fe(III), en presencia y ausencia de H2O2, mostraron la dependencia del pH de los componentes modelados.

En vista de la capacidad de las STH aisladas a partir de residuos urbanos de actuar como complejantes del Fe, se consideró la posibilidad de emplear otro tipo de residuos como material de partida; en concreto se empleó alperujo para la extracción de STH. Se probaron diferentes condiciones de extracción, obteniéndose los mejores resultados para valores de pH elevados y tiempos de digestión largos. Se comprobó la capacidad fotocatalíca de la STH extraídas y se profundizó en el estudio de la generación de especies radicales.

Demostrada la utilidad de las EEMs y PARAFAC para profundizar en el conocimiento de mezclas complejas y teniendo en cuenta la dificultad que supone la aplicación del análisis matemático, se decidió colaborar en el desarrollo de una interfaz gráfica de usuario que facilitara dicho análisis. La aplicación EEMlab facilita la carga, pretratamiento y análisis mediante PARAFAC de sets de datos muy numerosos. Se creó un ejemplo con muestras que contenían mezclas de compuestos conocidos en diferentes proporciones y se empleó EEMlab para la corrección, preprocesamiento y análisis de los datos, validando la utilidad de la aplicación.