

# GRADO EN QUÍMICA// DOBLE GRADO EN QUÍMICA E INGENIERÍA DE MATERIALES



Facultad de Química

## PROPUESTA DE TRABAJO FIN DE GRADO

**CURSO ACADÉMICO 2024/2025:**

|   |  |
|---|--|
| <b>TÍTULO (Español)</b>                       | Bandas electrónicas en cristales 1D. Comparación de modelos. |
| <b>TÍTULO (Inglés)</b>                        | Electronic bands in 1D crystals. Comparison of models.       |
| <b>DEPARTAMENTO</b>                           | Física de la Materia Condensada                              |
| <b>Area de Conocimiento</b>                   | Física de la Materia Condensada                              |
| <b>TUTORES (máximo 2) (Indicar categoría)</b> | Manuel Jiménez Melendo                                       |

En el caso de que el alumno deba realizar el trabajo en una instalación externa a la Facultad de Química, indíquelo:

### OBJETIVOS (max. 600 caracteres)

Resolver numéricamente la ecuación de Schrödinger para los electrones de Bloch en cristales 1D en diversos potenciales con objeto de obtener las bandas electrónicas. Comparación con los distintos modelos teóricos.

### METODOLOGÍA (max. 600 caracteres)

Resolver la ecuación de autovalores y autofunciones con un número limitado de términos del desarrollo en serie de Fourier del potencial periódico.

Desarrollar los modelos teóricos (libre, cuasilibre, fuertemente ligado, ligado) para los potenciales usados y realizar las correspondientes comparaciones.

|                                     |                                       |
|-------------------------------------|---------------------------------------|
| <b>VºBº DIRECTOR/A DEPARTAMENTO</b> | <b>PROFESORES TUTORES</b>             |
| <b>FECHA</b>                        | <b>FECHA 24 DE SEPTIEMBRE DE 2024</b> |
|                                     |                                       |
| <b>FIRMADO.</b>                     | <b>FIRMADO Manuel Jiménez Melendo</b> |

# GRADO EN QUÍMICA// DOBLE GRADO EN QUÍMICA E INGENIERÍA DE MATERIALES



## PROPUESTA DE TRABAJO FIN DE GRADO

Facultad de Química

**CURSO ACADÉMICO 2024/2025:**

|   |   |
|---|---|
| <b>TÍTULO (Español)</b>                       | Estudio sobre la cinética de la reacción de NaOH + fosfoyeso            |
| <b>TÍTULO (Inglés)</b>                        | Study on the kinetics of the reaction of NaOH + phosphogypsum           |
| <b>DEPARTAMENTO</b>                           | Física de la Materia Condensada   |
| <b>Área de Conocimiento</b>                   | Química Inorgánica, Ingeniería Química, Física de la Materia Condensada |
| <b>TUTORES (máximo 2) (Indicar categoría)</b> | Luis Esquivias Fedriani<br>CU   |

En el caso de que el alumno deba realizar el trabajo en una instalación externa a la Facultad de Química, indíquelo:

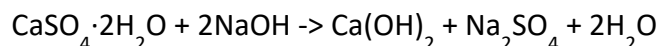
El trabajo se realizará en el departamento de Física de la Materia Condensada

### OBJETIVOS (max. 600 caracteres)

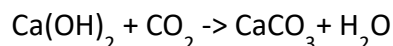
Se estudiará la reacción de sosa cáustica, o de residuos industriales que la contienen, con fosfoyeso, que es el residuo de la industria del ácido fosfórico. Se monitorizará el pH y la conductividad del medio en diferentes condiciones con objeto de determinar y optimizar el tiempo de residencia para una reacción completa. Se usarán fosfoyesos provenientes de diversas balsas europea.

### METODOLOGÍA (max. 600 caracteres)

Se estudiará la cinética de la reacción



y la carbonatación de la cal



Se realizarán ensayos a nivel laboratorio (decenas de g) para su escalado a kg.

Se intentará trabajar en condiciones de solubilidad del fosfoyeso y su variación en presencia del sulfato sódico

|                                     |                           |
|-------------------------------------|---------------------------|
| <b>VºBº DIRECTOR/A DEPARTAMENTO</b> | <b>PROFESORES TUTORES</b> |
| <b>FECHA</b>                        | <b>FECHA</b>              |

# GRADO EN QUÍMICA// DOBLE GRADO EN QUÍMICA E INGENIERÍA DE MATERIALES

|                             |   |
|-----------------------------|---|
| <b>TÍTULO (Español)</b>     | Estudio sobre la cinética de la reacción de NaOH + fosfoyeso            |
| <b>TÍTULO (Inglés)</b>      | Study on the kinetics of the reaction of NaOH + phosphogypsum           |
| <b>DEPARTAMENTO</b>         | Física de la Materia Condensada   |
| <b>Área de Conocimiento</b> | Química Inorgánica, Ingeniería Química, Física de la Materia Condensada |
| <b>FIRMADO.</b>             | <b>FIRMADO</b>  |