



Propuesta de Trabajo Fin de Máster

Año académico 2025-2026

MÁSTER EN CIENCIA DE DATOS PARA CIENCIAS EXPERIMENTALES

Proyecto Nº 19

Título: Métodos computacionales aplicados al estudio físico-químico de la degradación física, química y biológica de plásticos

Departamento/ Laboratorio: Departamento de Química, Instituto de Biodiversidad y Medio Ambiente (BIOMA), Facultad de Ciencias

Director: Adrián Durán Benito

Correo electrónico: adrianduran@unav.es

Codirector: Sheila Izquieta Rojano

Correo electrónico: sizquieta@unav.es

Resumen:

Los microplásticos son partículas de plástico, con un tamaño inferior a 5 mm, que se generan por la fragmentación de plásticos más grandes o se producen intencionalmente para diversos usos, como en la industria cosmética y textil. Los microplásticos representan una amenaza creciente para el medio ambiente y la salud humana, debido a su persistencia en el medio ambiente, debido a su difícil reciclaje y baja degradabilidad.

Los plásticos son, en su mayoría, polímeros derivados de la industria petrolífera, que pueden sufrir procesos de degradación mediante diferentes factores, tanto en el medio ambiente como en los procesos industriales.

Entre los polímeros más utilizados podemos citar: polietileno de baja densidad (LDPE), polietileno de alta densidad (HDPE), polietilentereftalato (PET), polipropileno (PP), poliestireno (PS), poliuretano (PU), cloruro de polivinilo (PVC), poliéster (PES) y poliamida (nylon, PA).

El objetivo principal de este TFM es la **aplicación de métodos computacionales** en el **estudio físico-químico** de los **procesos de degradación** de **polímeros** empleados habitualmente.

1. Se aplicarán las siguientes técnicas físico-químicas de caracterización: difracción de rayos X (DRX), fluorescencia de rayos X (FRX), espectroscopia de infrarrojos (FTIR), espectroscopia micro-Raman, microscopia infrarroja directa por láser (LDIR), colorimetría, termogravimetría (TG), análisis térmico diferencial (DTA), calorimetría diferencial de barrido (DSC), etc.
2. Los procesos de degradación serán los siguientes: - físicos (radiación ultravioleta, radiación infrarroja, temperatura, humedad), - químicos (medios ácidos, medios básicos, lejía), - biológicas (con cepas de al menos dos bacterias), - mecánicos (molino de bolas sin y con abrasivos), etc.

El/la masterando/a aplicará los métodos computacionales más adecuados para cuantificar todas las variables de degradación, hacer predicciones, y extraer toda la información química microestructural y de composición a partir de los difractogramas, espectros, curvas y datos obtenidos en el laboratorio. Se analizarán además microplásticos recolectados de muestras tomadas de sedimentos y ríos.



Universidad
de Navarra

Facultad de Ciencias

OPTATIVAS RECOMENDADAS

1. Adquisición de datos
2. Análisis de datos en química
3. Gestión de datos experimentales
4. Programación avanzada