



UNIVERSIDAD DE JAÉN
Escuela Politécnica Superior de Linares

Trabajo Fin de Grado

**OPTIMIZACIÓN DE LOS PARÁMETROS PARA
LA PIROLISIS DE POLIETILENO DE BAJA
DENSIDAD (LDPE) CON EL OBJETO DE
REDUCIR BENCENO-DERIVADOS EN LOS
EFLUENTES GASEOSOS.**

Alumno: Natalia Cajiao Navia

Tutor: Prof. D. Antonio Jose Ortiz Hernandez
Depto.: Química Inorgánica y Organica

Mayo, 2023

TABLA DE CONTENIDO

1.	RESUMEN	6
2.	INTRODUCCIÓN	8
	Polímeros	8
	Tipos de polímeros.	8
	Polietileno.	10
	Diferencias entre LDPE y HDPE.	11
	Mecanismo de ruptura del polietileno.	11
	Tratamiento de residuos poliméricos.....	12
	Contaminación del medio ambiente por residuos de polímeros.....	14
	Aditivos en productos plásticos.....	15
	Consecuencia del uso de aditivos en materia prima de polímeros y derivados.....	19
	Pirólisis	20
	Procedimiento general de la pirólisis.....	22
	Pirólisis de polietileno	23
	Cromatografía de gases acoplada con espectrometría de masa	25
	Componentes de un sistema de cromatografía de gases.....	26
	Clasificación del proceso de pirólisis para polímeros	29
	Técnica de Py-GC/MS.....	30
3.	OBJETIVOS	32
	Objetivo general.	32
	Objetivos específicos.....	32
4.	MATERIALES Y MÉTODOS	33
	Reactivos	33
	Instrumentación	33
	Materiales	37
	Procedimiento experimental	39
5.	RESULTADOS EXPERIMENTALES.	42
	5.1 Resultados de la espectrometría de masa de la muestra de bolsa azul	42
	5.2 Resultados de la cromatografía de la muestra de bolsa color lila.....	52
	5.3 Resultados de la cromatografía de la muestra de bolsa color amarilla.....	61
	5.4. Resultados de la cromatografía de la muestra de bolsa transparente.	70
	5.5. Resultados de la cromatografía de la muestra de mix de bolsas.	80
6.	DISCUSIÓN DE RESULTADOS	90
7.	CONCLUSIONES	93
8.	BIBLIOGRAFÍA	94

Índice de Tablas

Tabla 1. Tipos de aditivos con % utilización del polímero.....	16
Tabla 2. Condiciones de pirólisis.....	30
Tabla 3. Masa de las muestras tomadas para el procedimiento experimental.	39
Tabla 4. Descripción de Rampas.	40
Tabla 5. Compuestos orgánicos detectados en la espectrometría de masa de la muestra de bolsa azul en la rampa 1.	43
Tabla 6. Compuestos orgánicos detectados en la espectrometría de masa de la muestra de bolsa azul en la rampa 2.	45
Tabla 7. Compuestos orgánicos detectados en la espectrometría de masa de la muestra de bolsa azul en la rampa 3.	48
Tabla 8. Compuestos orgánicos detectados en la espectrometría de masa de la muestra de bolsa azul en la rampa 4.	50
Tabla 9. Compuestos orgánicos detectados en la espectrometría de masa de la muestra de bolsa de color lila en la rampa 1.....	53
Tabla 10. Compuestos orgánicos detectados en la espectrometría de masa de la muestra de bolsa de color lila en la rampa 2.....	55
Tabla 11. Compuestos orgánicos detectados en la espectrometría de masa de la muestra de bolsa de color lila en la rampa 3.....	58
Tabla 12. Compuestos orgánicos detectados en la espectrometría de masa de la muestra de bolsa de color lila en la rampa 4.....	60
Tabla 13. Compuestos orgánicos detectados en la espectrometría de masa de la muestra de bolsa de color amarilla en la rampa 1.....	62
Tabla 14. Compuestos orgánicos detectados en la espectrometría de masa de la muestra de bolsa de color amarilla en la rampa 2.....	64
Tabla 15. Compuestos orgánicos detectados en la espectrometría de masa de la muestra de bolsa de color amarilla en la rampa 3.....	67
Tabla 16. Compuestos orgánicos detectados en la espectrometría de masa de la muestra de bolsa de color amarilla en la rampa 4.....	69
Tabla 17. Compuestos orgánicos detectados en la espectrometría de masa de la muestra de bolsa transparente en la rampa 1.	71
Tabla 18. Compuestos orgánicos detectados en la espectrometría de masa de la muestra de bolsa transparente en la rampa 2.	73
Tabla 19. Compuestos orgánicos detectados en la espectrometría de masa de la muestra de bolsa transparente en la rampa 3.	76
Tabla 20. Compuestos orgánicos detectados en la espectrometría de masa de la muestra de bolsa transparente en la rampa 4.	78
Tabla 21. Compuestos orgánicos detectados en la espectrometría de masa de la muestra de mix de bolsas en la rampa 1.	81
Tabla 22. Compuestos orgánicos detectados en la espectrometría de masa de la muestra de mix de bolsas en la rampa 2.	84
Tabla 23. Compuestos orgánicos detectados en la espectrometría de masa de la muestra de mix de bolsas en la rampa 3.....	87
Tabla 24. Compuestos orgánicos detectados en la espectrometría de masa de la muestra de mix de bolsas en la rampa 4.....	89

Índice de Figuras

Figura 1. Estructura química del polímero de polietileno.....	10
Figura 2. Síntesis del polietileno a partir de etileno.....	10
Figura 3. Esquema de la disposición y tratamiento de gestión de residuos plásticos	12
Figura 4. Proceso de pirolisis de la biomasa.....	22
Figura 5. Descripción general y diseño del proceso de pirolisis en la industria	23
Figura 6. Proceso cromatográfico de la separación de dos compuestos presentes en la muestra A+B21.....	26
Figura 7. Diagrama esquemático de los componentes de un cromatógrafo de gases típico.	27
Figura 8. Equipo SCION GC-MS System marca Bruker y pirolizador FrontierLab modelo EGA/PY-3030D.....	34
Figura 9. Pirolizador de micro horno de disparos múltiples modelo Scion - SQ GC-MS - Detector de rango dinámico extendido (EDR)	35
Figura 10. Configuración de los parámetros de la primera rampa de 330°C a 450°C en el MS.	40
Figura 11. Espectro Muestra Azul- R1	42
Figura 12. Grafica de grupos funcionales Muestra Azul-R1	43
Figura 13. Espectro Muestra Azul- R2	44
Figura 14. Grafica de grupos funcionales Muestra Azul- R2.	46
Figura 15. Espectro Muestra Azul-R3	47
Figura 16. Grafica de grupos funcionales Muestra Azul-R3.	48
Figura 17. Espectro Muestra Azul-R4	49
Figura 18. Grafica de grupos funcionales Muestra Azul-R4.	51
Figura 19. Espectro Muestra Lila-R1	52
Figura 20. Grafica de grupos funcionales Muestra Lila-R1.....	53
Figura 21. Espectro Muestra Lila-R2	54
Figura 22. Grafica de grupos funcionales Muestra Lila-R2.....	56
Figura 23. Espectro Muestra Lila-R3	57
Figura 24. Grafica de grupos funcionales Muestra Lila-R3.....	58
Figura 25. Espectro Muestra Lila-R4	59
Figura 26. Grafica de grupos funcionales Muestra Lila-R4.....	60
Figura 27. Espectro Muestra Amarilla- R1.....	61
Figura 28. Grafica de grupos funcionales Muestra Amarilla-R1	62
Figura 29. Espectro Muestra Amarilla-R2.....	63
Figura 30. Grafica de grupos funcionales Muestra Amarilla-R2	65
Figura 31. Espectro Muestra Amarilla- R3.....	66
Figura 32. Grafica de grupos funcionales Muestra Amarilla-R3	67
Figura 33. Espectro Muestra Amarilla-R4.....	68
Figura 34. Grafica de grupos funcionales Muestra Amarilla-R4.....	69
Figura 35. Espectro Muestra Transparente-R1	70
Figura 36. Grafica de grupos funcionales Muestra Transparente-R1	71
Figura 37. Espectro Muestra Transparente-R2	72
Figura 38. Grafica de grupos funcionales Muestra Transparente-R2	74
Figura 39. Espectro Muestra Transparente-R3	75
Figura 40. Grafica de grupos funcionales Muestra Transparente-R3	76
Figura 41. Espectro Muestra Transparente-R4	77
Figura 42. Grafica de grupos funcionales Muestra Transparente-R4	79
Figura 43. Espectro del Mix de muestras-R1.....	80
Figura 44. Grafica de grupos funcionales del Mix de muestras-R1.....	82
Figura 45. Espectro del Mix de muestras-R2.....	83
Figura 46. Grafica de grupos funcionales del Mix de muestras-R2.....	85
Figura 47. Espectro del Mix de muestras-R3.....	86
Figura 48. Grafica de grupos funcionales del Mix de muestras-R3.....	87
Figura 49. Espectro del Mix de muestras-R4.....	88
Figura 50. Grafica de grupos funcionales del Mix de muestras-R4.....	89

Índice de Imágenes

Imagen 1. Balanza analítica de alta precisión.....	33
Imagen 2. Espectrómetro de masas.....	33
Imagen 3. Cubilotes de pirolizador.....	35
Imagen 4. Equipo utilizado SCION GC-MS System marca Bruker acoplado el pirolizador Frontier Lab modelo EGA/Py-3030D.....	36
Imagen 5. Bolsa Azul.....	37
Imagen 6. Bolsa Lila.....	37
Imagen 7. Bolsa Amarilla.....	38
Imagen 8. Bolsa Transparente.....	38
Imagen 9. Mix de Bolsas	39

1. RESUMEN

Desde el nacimiento de la industria y su crecimiento, las actividades de manufactura han buscado materiales resistentes a muy bajo costo para poder ofrecer sus productos. En la actualidad los plásticos (polímeros) son la mejor opción cuando se habla de empaques, bolsas y otros, sin embargo, la demanda de este material ha incentivado a la investigación sobre su reciclaje, o de como degradarlo. Cuando a un material a base de polímeros no se le puede dar otro uso, se piensa directamente en su incineración (quemar el material), esto libera gases altamente tóxicos que afectan a la salud y al medio ambiente. Los retos medioambientales causados por la industria del plástico han convertido a el reciclaje en una de las principales soluciones. El reciclado tiene varios significados, como forma de reciclado primaria, secundaria, terciaria y cuaternaria. El reciclado terciario devuelve los plásticos a sus monómeros constituyentes o a su materia prima básica de hidrocarburos ^[28].

La pirolisis es una técnica de descomposición que por medio de un proceso térmico y sin oxígeno se degrada un material orgánico, en el caso de un polímero hace que su cadena molecular larga quiebre por las altas temperaturas, volatilizando el material en cadenas carbonadas más pequeñas (sin quemar el material como lo haría la incineración). La idea básica del reciclado terciario es romper las moléculas de polímero en moléculas orgánicas más pequeñas o monómeros, y es aquí donde entra la pirolisis que es el proceso de reciclado terciario más importante y utilizado. El reciclado terciario de residuos plásticos no puede considerarse una solución para la eliminación de residuos plásticos, sino más bien para generar un combustible de transporte aceptable para el medio ambiente o un material de alimentación para la producción de plásticos vírgenes. ^[28]

La cromatografía de gases o la espectrometría de masa son métodos cualitativos y cuantitativos para determinar los compuestos formados después de aplicar la pirolisis.

La espectrometría de masa aplicada en un proceso de pirolisis, detecta una gran cantidad de compuestos, para su análisis se agrupan por grupo funcional y se observa su presencia por cada rampa de temperatura evaluada.

En el presente trabajo se presentan diferentes muestras de polímeros de baja densidad que se estudiarán por Py-GC/MS. Las variables estudiadas en el proceso pirolítico han sido la velocidad de calentamiento y las rampas de temperatura entre 350 y 900 °C

En las condiciones experimentales, el análisis de la espectrometría de masas arroja que las cadenas predominantes son de grupos alquenos, seguido de aromáticos y los ciclos alcanos, lo cual se

confirma ya que esta técnica además proporciona un análisis cuantitativo de la estructura del polímero.

2. INTRODUCCIÓN

Polímeros

Los polímeros son moléculas de gran tamaño compuestas por unidades repetidas denominadas monómeros entre 500 y 20000 repeticiones para polímeros comunes. Los polímeros son, además, materiales orgánicos con características de ligereza, higiénicas y resistencia que se pueden moldear en una variedad de formas. La Directiva 82/711/EEC establece y define el concepto del polímero como: “compuesto macromolecular orgánico obtenido por polimerización, policondensación, poliadición u otro procedimiento similar a partir de moléculas de peso molecular inferior o por modificación química de macromoléculas naturales”. Hay tres categorías principales en el mundo de los polímeros: termoplásticos, termoestables y elastómeros. La principal diferencia se basa en sus modificaciones de composición, estructura y funcionalidad una vez alcanzado ciertos valores de temperaturas; es decir, los termoplásticos consisten en moléculas individuales sin enlaces covalentes entre ellas, pero unidas por enlaces intermoleculares, que después de ser reciclados se pueden fundir para ser moldeados y remoldeados repetidamente. Por otro lado, los termoestables tienen muchos enlaces covalentes entre las cadenas, lo que lleva a una estructura tridimensional, que puede considerarse como una sola molécula. Se pueden moldear por calor y presión solo una vez dado que es una reacción irreversible manteniendo su forma sólida y ya no se pueden volver a fundir o reformar. Finalmente se encuentran los elastómeros siendo sólidos amorfos que, como su nombre indica, son elásticos. Esto significa que tales polímeros están definidos no por su estructura química sino por su respuesta mecánica, que al momento de suprimir fuerza elástica las cadenas enrolladas contenidas pueden volver a su forma original^[4].

Tipos de polímeros.

Existen diferentes tipos de poliméricos, entre ellos los más comunes son: polietileno de alta densidad (PEAD), polietileno de baja densidad (PEBD), polipropileno (PP), poliestireno (PS), cloruro de polivinilo (PVC) y polietileno tereftalato (PET).

- Tereftalato de polietileno (PETE o PET): Introducido por J. Rex Whinfield y James T. Dickson en 1940, este polímero es uno de los más utilizados en el planeta en envases de bebidas y textiles.

- Polietileno: Es un polímero sintético termopolímero que se obtiene por polimerización del etileno. Es un material parcialmente cristalino y amorfo, de color blanquecino y translucido. En forma general se puede clasificar tres tipos diferentes de Polietileno de acuerdo a la densidad que presentan ya que esta es un buen indicativo del tipo de estructura que posee el polímero, polietileno de baja densidad (PEBD), polietileno de mediana densidad y polietileno de alta densidad (PEAD) ^[4].
- El Cloruro de polivinilo (PVC): Es uno de los materiales sintéticos más antiguos en la producción industrial. Fue descubierto en 1838 por el físico francés Henri Víctor Regnault. Es uno de los polímeros más usados en el mundo por su gran versatilidad y variedad.
- Polipropileno: En 1954 el italiano G. Natta logró obtener polipropileno de estructura muy regular denominado isotáctico. El polipropileno es un material muy versátil, ofrece una gran combinación de propiedades como baja densidad, alta resistencia mecánica y térmica. Entre estos y muchas otras excelentes propiedades. El polipropileno puede ser sometido a una amplia gama de métodos y aplicaciones de fabricación.
- Poliestireno: En 1839, el boticario alemán Eduard Simon encontró este material aislando resinas naturales. El poliestireno es un polímero extremadamente versátil que puede inyectarse, extruirse o moldear por soplado para la aplicación requerida. Además del poliestireno expandido o espumado utilizado en el embalaje, es ampliamente utilizado para una variedad de aplicaciones como rellenos livianos y amortiguación semirrígida para electrodomésticos.

Actualmente, el sector de los polímeros juega un papel importante en la vida cotidiana, debido que se encuentran como productos de consumo en muchos sectores, por ejemplo, en el sector de automoción, alimentación, embalaje, electrónica, construcción, agricultura entre otros, aumentando cada vez más la demanda de polímeros debido al rápido crecimiento de la población mundial, lo que genera se aumente también la producción de residuos de este material. Así bien, la generación de residuos poliméricos está fuertemente influenciada por el uso primario del polímero, pero también por la vida útil del producto. El embalaje, por ejemplo, tiene una vida útil muy corta "en uso" (típicamente alrededor de 6 meses o menos). Esto contrasta con la construcción, donde el uso de polímero tiene una vida media de 35 años. Por lo tanto, el embalaje es el generador dominante de residuos poliméricos, responsable de casi la mitad del total mundial con 141 millones de toneladas por año ^[9].

Polietileno.

El polietileno hace referencia a un grupo de homopolímeros termoplásticos formados por cadenas moleculares compuestas por múltiples monómeros repetidos de eteno (nombre IUPC "eteno") este y sus variantes son los plásticos básicos más utilizados. El polietileno se utiliza normalmente para bolsas de plástico, envases de alimentos/bebidas y aplicaciones médicas como las articulaciones de rodilla.

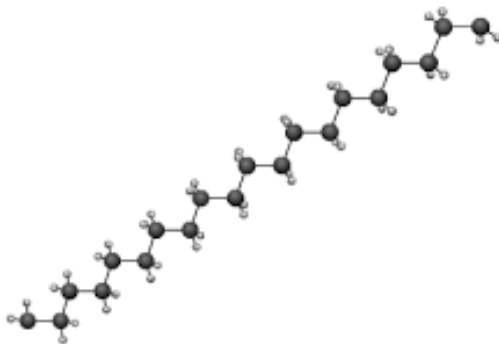


Figura 1. Estructura química del polímero de polietileno²⁹

Su estructura química consiste en monómeros repetidos formados por átomos de carbono e hidrógeno, esta puede describirse como $(C_2H_4)_n$, que representa la molécula de etileno que se repite dentro de la cadena polimérica^[29].

El etileno es una molécula estable con dos átomos de carbono unidos por un doble enlace. El polietileno se fabrica por reacción de varias moléculas de etileno en presencia de un catalizador^[30].

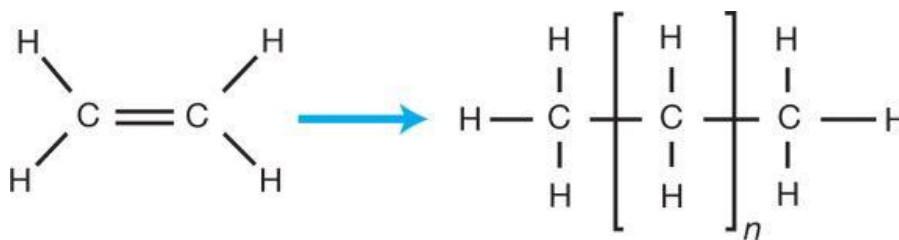


Figura 2. Síntesis del polietileno a partir de etileno.³⁰

El polietileno se puede clasificar en varias subcategorías dependiendo la estructura molecular^[10].

Los tipos más comunes de polietileno son:

- Polietileno de alta densidad (HDPE).

- Polietileno de baja densidad (LDPE).

Diferencias entre LDPE y HDPE.

LDPE es básicamente más suave y más flexible en comparación con HDPE. También tiene un punto de fusión más bajo que es de 115 ° C y es más transparente. Sin embargo, en comparación con el HDPE, es más probable que se rompa bajo estrés (estructura química de cadenas lineales muy ramificadas).

Por otro lado, el HDPE es excepcionalmente rígido, duradero y proporciona una resistencia química mucho mejor. Su punto de fusión más alto es de 135°C lo que le permite resistir temperaturas más altas en comparación con el LDPE. Además, su estructura cristalina conduce a una mayor resistencia y transparencia del material (estructura química de cadenas lineales poco ramificadas y condensadas).

El LDPE se genera aplanando gas etileno monómero en un autoclave o reactor tubular para simplificar la polimerización; es decir, la asociación de monómeros en cadenas poliméricas.

El HDPE se produce calentando petróleo a temperaturas extremadamente altas. Este procedimiento deja salir los monómeros de gas etileno, que luego se mezclan para crear cadenas de polímeros.

Aunque tanto el HDPE como el LDPE son reciclables, deben reciclarse individualmente. El HDPE se clasifica con el número de reciclaje 2 y el LDPE se clasifica con el número de reciclaje 4.

Según el producto, el LDPE puede ser bastante difícil de reciclar, ya que es más blando y puede atascarse en la máquina de reciclaje. Por el contrario, el HDPE es mucho más fácil de transportar y procesar a través de la herramienta de reciclaje.

HDPE y LDPE comparten varias similitudes, pero tienen algunas diferencias que afectan su utilidad en varias aplicaciones.

Mecanismo de ruptura del polietileno.

Los mecanismos de reacción para el polietileno son dos: Ruptura de final de cadena, la cual produce monómeros principalmente y la ruptura de cadena aleatoria, la cual rompe la cadena en fragmentos de diferentes tamaños. La vía de corte de fin de cadena parte en un extremo de la cadena del polímero y sucesivamente libera unidades del monómero, disminuyendo el peso

molecular del polímero lentamente y liberando gran cantidad de monómero; este tipo de ruta de degradación también se conoce como reacción de despolimerización. La reacción de corte aleatorio ocurre en un sitio al azar a lo largo de la cadena del polímero, en este caso se degrada para generar fragmentos de menor peso molecular y prácticamente no se liberan monómeros. En diversos estudios se ha mostrado que el corte aleatorio es la principal vía de degradación en la pirólisis térmica de varios polímeros, en particular poliolefinas tales como PE y PP ^[9].

Tratamiento de residuos poliméricos

Existen varios métodos para la eliminación de residuos poliméricos municipales e industriales, como la incineración (recuperación de energía), reciclaje de materiales (productos reciclados similares o recuperación de monómeros) y recuperación química. El tratamiento adecuado de los residuos poliméricos es una de las preguntas clave de la gestión de residuos y es importante desde el punto de vista energético, medioambiental, económico y político^[2].

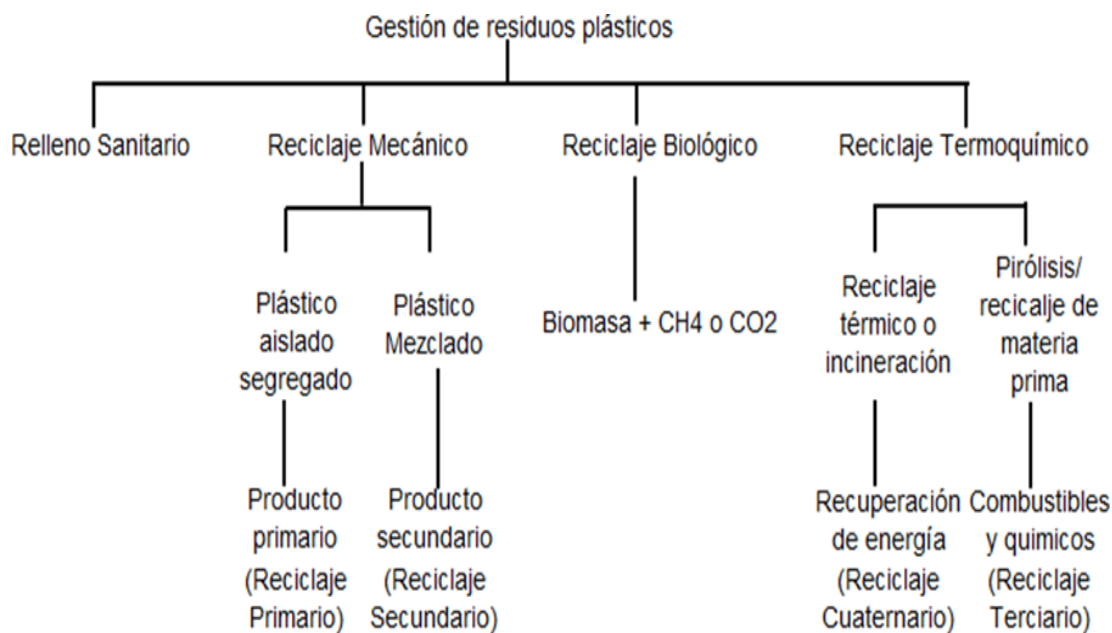


Figura 3. Esquema de la disposición y tratamiento de gestión de residuos plásticos.²

- **Relleno sanitario.** Es el lugar técnicamente seleccionado, diseñado y operado para la disposición final controlada de residuos sólidos, sin causar peligro, daño o riesgo a la salud pública, minimizando y controlando los impactos ambientales y utilizando principios de

ingeniería, para la confinación y aislamiento en un área mínima, con compactación de residuos, cobertura diaria de los mismos, control de gases y lixiviados, y cobertura final.

- **Reciclaje mecánico.** El reciclaje mecánico, también conocido como reciclaje secundario, es el proceso de recuperación de residuos sólidos poliméricos(PSW) para la reutilización en la fabricación de productos de poliméricos a través de medios mecánicos. Antes de la reprocesamiento real de materiales reciclados en nuevos productos, la conversión de residuos a nuevas materias primas debe ocurrir. Esta fase generalmente se denomina "Fin de la basura" y comienza después del paso de recolección. Para los desechos sólidos poliméricos, este proceso puede incluir los siguientes pasos:
 1. Separación y clasificación: esto ocurre según la forma, densidad, tamaño, color o composición química.
 2. Embalaje: si el polímero no se procesa dónde se clasifica, a menudo se embala en el medio para fines de transporte.
 3. Lavado: eliminación de contaminantes (a menudo orgánicos)
 4. Molienda: Reducción de tamaño de productos a escamas u hojuelas
- **Reciclaje biológico.** El biorreciclaje es una tecnología emergente que utiliza microbios, como bacterias u hongos, para descomponer el plástico en sus componentes básicos y reutilizarlo. Las proteínas especializadas de los microbios, llamadas enzimas, degradan el plástico en sus componentes químicos más básicos, o monómeros. Los monómeros pueden recombinarse en plásticos del mismo tipo y calidad. En un proceso llamado "upcycling", los monómeros se recombinan en diferentes materiales o sustancias químicas con cualidades más deseables, como plásticos más biodegradables que los originales o sustancias químicas de alto valor, como la vainillina que se encuentra en los aromatizantes de vainilla^[31].

- **Reciclaje químico.** También llamado reciclaje termoquímico o de materia prima, el reciclaje químico involucra mecanismos en los cuales los desechos poliméricos recolectados se degradan químicamente en sus monómeros u otros químicos básicos. Los procesos involucrados son, entre otros, hidrólisis, pirólisis, hidrocrackeo y gasificación.
- **Incineración.** La incineración de polímeros libera el valor calórico de los mismos y también se considera como un proceso de reciclaje. Es un método común y altamente practicado para la reducción de desechos y la recuperación de energía, a menudo utilizado en corrientes de desechos de polímeros altamente contaminados o complejos, como desechos médicos y envases de productos peligrosos. Si bien la recuperación de energía inevitablemente termina el ciclo de vida de un producto polimérico, sigue siendo preferible al vertedero. Salvo en casos donde la incineración de polímero genere partículas nocivas para la salud como las dioxinas y furanos.

Contaminación del medio ambiente por residuos de polímeros.

La gran aplicabilidad de los polímeros plásticos no solo está en los productos de consumo cotidiano, también se presentan en otros tipos de materias primas como fibras sintéticas, revestimientos, selladores, espumas entre otros. Los grandes cambios revolucionarios de la tecnología han aportado al uso indispensable del polímero como lo es el caso de Europa que maneja en un 38% de uso solo en embalaje de cargamentos, en edificaciones y construcción con un 21%, en la automotriz con un 7%, electricidad y electrónica con 6% y otras áreas como medicina y artículos de uso personal con el 28% en el 2008.

La utilidad de usar productos de plástico en ciertos puntos es beneficioso como:

- Envasar alimentos o bebidas para su portabilidad o almacenamiento del mismo sin la necesidad de desperdiciarlos.
- Es físicamente ligero y se puede mover con facilidad en comparación a otros materiales.
- Resistente y moldeable cuando se le acondicione para la sustitución de materiales más pesados y con similar resistencia.

La gran diversidad de polímeros y diferentes utilidades han generado un flujo de residuos diversos, esto genera un exceso de residuos que requieren diferentes tipos de tratamiento para su reutilización, considerando un aproximado de vida útil mínimo de un polímero (*40% de los diferentes tipos de polímeros*) de 1 mes se está generando serios problemas ambientales producto al manejo no adecuado de la disposición de los mismos ^{[11], [12]}.

La gran problemática que involucra el uso de los plásticos es su eliminación y tipo de tratamiento que se requiere en ese proceso, a pesar de conocer el tratamiento respectivo de cada polímero la situación se centra en la forma de cómo está terminando la disposición última del plástico por lo que complica la forma en cómo remediar esta problemática. Otra alerta que preocupa en la disposición final de los plásticos es el uso de aditivos en diferentes tipos de plásticos para mejorar las características químicas y físicas de los polímeros, implicando una mayor duración y resistencia a la degradación, además de ser dañinos al medio exterior al momento de la emisión o lixiviación con sustancias potencialmente tóxicas.

Aditivos en productos plásticos.

Los aditivos son compuestos químicos que se le añaden a una materia prima determinada para mejorar el rendimiento de las características físicas y químicas de los materiales para garantizar un mejor resultado del producto final a elaborar. En el caso de los plásticos se presentan muchas aplicaciones como, por ejemplo, otorgar la facilidad de conformar cadenas de polímeros más largas y densas, favorecer un mejor moldeo del plástico al momento aplicarse por inyección, mejorar características de extrusión, ayudar en el moldeo por soplado o al moldeo con vacío, agregar más funcionalidad a los polímeros (Ej. plásticos conductores) y mejorar las propiedades de envejecimiento del polímero ^[13].

Los tipos de aditivos más utilizados en empaques poliméricos son ^[14]:

- ✓ Plastificantes.
- ✓ Retardantes de llama.
- ✓ Antioxidantes.

- ✓ Eliminadores de ácidos.
- ✓ Estabilizadores de luz y calor.
- ✓ Lubricantes.
- ✓ Pigmentos.
- ✓ Agentes antiestáticos.
- ✓ Compuestos deslizantes.
- ✓ Estabilizadores térmicos.

Cada uno de ellos juega un papel distinto en la entrega/mejora de las propiedades funcionales (finales) de un producto plástico.

En la siguiente tabla se reflejan los tipos de aditivos más utilizados y el porcentaje de polímero añadido.

Tabla 1. Tipos de aditivos con % utilización del polímero ^[14].

Categoría/Tipo de aditivo	%uso de utilidad del polímero (% p/p)	Sustancias
Plastificantes	10–70	Parafinas cloradas(cadena media y larga) (SCCP/MCCP/LCCP). Diisoheptilftalato (DIHP). DHNUUP ftalato de bencilo butilo (BBP); Ftalato de bis (2-etilhexilo) (DEHP). Adipato de di-(2-etilhexilo) (DEHA),adipato de dioctilo (DOA), ftalatos de dietilo (DEP), ftalato de diisobutilo (DiBP). Tris(2cloroetil)fosfato (TCEP). Ftalato de dicitclohexilo (DCHP), ftalato de butilbencilo (BBP), adipato de diheptilo (DHA), adipato de heptilo (HAD) y adipato de heptilooctilo (HOA).

Retardantes de llama	3–25 (para bromado)	Parafinas cloradas de cadena corta, media y larga (SCCP/MCCP/LCCP): ácido bórico. Retardantes de llama bromados con antimonio (Sb) como sinergista (por ejemplo, éteres de difenilo polibromados (PBDE). Decabromodifeniletano. Tetrabromobisfenol A (TBBPA)). Fósforo ignífugo (p. ej., tris(2-cloroetil)fosfato (TCEP) Tris(2-cloroisopropil)fosfato (TCPP)).
	0.7–3	Hexabromociclohexano (HBCDD)
Estabilizantes, Antioxidantes y Estabilizadores UV	0.05–3	Bisfenol A (BPA); compuestos de cadmio y plomo; compuestos de nonilfenol. Octilfenol. 1,3,5-tris(oxiran-2-ilmetil)- 1,3,5-triazinano-2,4,6-triona (TGIC)/1,3,5-tris[(2 S y 2R)- 2,3-epoxipropil]-1,3,5-triazina-2,4,6-(1H,3H,5H)-triona (β-TGIC), hidroxitolueno butilado (BHT), 2- y 3-t-butil- 4 hidroxianisol (BHA), tetraquismetilen-(3,5-di-t-butil-4-hidroxihidrocinamato) metano (Irganox 1010). Bisfenoles como Cyanox 2246 y 425, tris-nonil-fenil fosfato (TNPP), tris (2, 4-di- <i>terc</i> -butilfenil) fosfito, (Irgafos 168).
Estabilizadores de calor	0.5–3	Compuestos de cadmio y plomo; Nonilfenol (sales de bario y calcio).
Agentes de deslizamiento	0.1–3	Amidas de ácidos grasos (erucamida primaria y oleamida), ésteres de ácidos grasos, estearatos

		metálicos (por ejemplo, estearato de zinc) y ceras.
Lubricantes (internos y externos)	0.1–3	–
Antiestático	0.1–1	–
agentes de curado	0.1–2	4,4'- Diaminodifenilmetano (MDA); 2,2'-dicloro-4,4'-metilendianilina (MOCA); Formaldehído: productos de reacción con anilina; hidracina; 1,3,5-tris(oxiran-2-ilmetil)-1,3,5-triazinano-2,4,6-triona (TGIC)/1,3,5-tris[(2 S y 2R)- 2 ,3-epoxipropil]-1,3,5-triazina-2,4,6-(1H,3H,5H)-triona (β-TGIC).
Agentes de soplado	Depende de la densidad de la espuma y de la producción potencial de gas del agente	–
Biocidas	0.001–1	Compuestos de arsénico; compuestos orgánicos de estaño; triclosán.
<i>colorantes</i>		
Soluble (p. ej. colorantes azoicos)	0,25–5	–

pigmentos organicos	0.001–2.5	Diacetato de cobalto (II).
Pigmentos inorgánicos	0.01–10	Compuestos de cadmio; compuestos de cromo; compuestos de plomo.
Efecto especial	Varía según el efecto y la sustancia en cuestión.	–
<i>Rellenos</i>		
	Hasta 50	–
<i>Refuerzos</i>		
	15–30	–

Consecuencia del uso de aditivos en materia prima de polímeros y derivados.

Desde el proceso de fabricación de los polímeros los productos químicos auxiliares que se le adicionan para mejorar sus características son liberados en cada etapa de del ciclo manufactura del mismo; cada producto químico presenta contraindicaciones pueden ser irritantes, corrosivos, cancerígenos, y otros riesgos que atentan con la humanidad y el medio ambiente. Estos polímeros que son cargados y dopados con aditivos pueden ser afectados de muchas maneras y depende a que se expongan estos polímeros iniciaran su proceso de degradación lenta o rápida respecto a sus propiedades ^[15].

- Solubles en agua.
- Hidrofobicidad.
- Temperatura de transición vítrea.
- Cristalinidad
- Composición mineral
- Inclusión de nano partículas

Estas propiedades se pueden ver afectadas en los diferentes factores ambientales como la temperatura, humedad, procesos de meteorización.

Considerando la premisa de que la tierra es aproximadamente un 60% de agua, la gran mayoría de los desechos plásticos terminan en contacto frente a una fuente importante de agua, por lo que grandes cantidades de aditivos plásticos quedan expuestos de forma directa con los ecosistemas del planeta. Se ha determinado que la cinética de liberación en agua de éteres de difenilo polibromados (PBDE) (*estudios recientes indican que este polímero se acumula en la leche materna y en la sangre pudiendo generar alteraciones neurológicas durante el desarrollo de las personas* ^[16]. y 1,2 - bis(2,4,6-tribromofenoxi)etano^[17] (irritante para la piel) fueron producto de la exposición de unos gránulos microplásticos hechos de terpolímero de acrilonitrilo butadieno estireno , estos tipos de polímeros son comúnmente usados en la industria automotriz, juguetes, electrodomésticos y materiales de oficina principalmente^[18].

Otros polímeros comúnmente encontrados son los ésteres organofosforados (OPE) son ampliamente usados como plastificantes y retardantes de llama. Sin embargo, algunos OPE son cancerígenos conocidos o continúan siendo estudiados debido a que se han presentado otros tipos de polímeros de este tipo que son neurotóxicos, estos han sido hallados en su mayoría producto a los análisis del aire y en los ambientes acuáticos^{[19], [20]}.

Pirolisis

La pirolisis es un proceso termoquímico de carácter irreversible mediante el cual se somete materia sólida a altas temperaturas, provocando la vibración y posterior ruptura de los enlaces moleculares que la componen. Lo anterior resulta en la degradación de la materia en productos mayormente gaseosos y sólidos, cuya naturaleza dependerá de la materia de partida y de las condiciones de la reacción. Es importante resaltar que la pirolisis no hace referencia a un cambio de estado, sino a la degradación de moléculas complejas en moléculas más pequeñas por efecto del calor; y que en

este proceso no hay intervención del oxígeno, por lo que no se produce la combustión de la materia^[1].

Una reacción pirolítica es de tipo endotérmico, la cual ocurre a temperaturas en el rango de los 400 a 800 °C y puede llevarse a cabo en un entorno a presión atmosférica, vacío o a altas presiones. Durante la descomposición térmica de la materia se generan productos volátiles primarios que generalmente sufren reacciones secundarias de polimerización e isomerización, favorecidas por altas temperaturas y tiempos de residencia al interior del reactor. Adicionalmente, teniendo en cuenta que no es posible lograr un entorno completamente libre de oxígeno, se producen reacciones oxidativas, aunque en menor medida^[1].

Los productos finales de la pirolisis incluyen: una fase sólida compuesta por cenizas y productos residuales; una fase gaseosa ligera denominada gas de síntesis cuyos principales componentes son el hidrógeno y el metano; y una fase líquida generada a partir de la condensación de gases pesados, la cual puede ser utilizada como fuente de energía, ya que tiene propiedades similares a las de combustibles derivados del petróleo. La optimización de estos subproductos dependerá de los parámetros de la reacción, como lo son temperatura, presión, tiempo de residencia, velocidad de transferencia de calor, tipo de reactor, entre otros^[4].

La producción de combustible de alta calidad puede realizarse mediante la aplicación de pirólisis lenta, debido a que conduce a una transferencia de calor superior, un mejor control sobre los caudales de entrada y salida (recolección controlada de productos) y un alto rendimiento del líquido. **La degradación de los residuos poliméricos**, la calidad y la cantidad de diferentes fracciones de producto, como líquido, gas y sólido, varían dependiendo de factores como la temperatura de degradación, la presencia de catalizador, la naturaleza del catalizador y tipo de reactor utilizado, etc.^[5]

El gas de pirólisis es un combustible de alto poder calorífico, puede ser utilizado en la etapa de calentamiento del mismo proceso, los principales componentes son metano, etano, etileno y propileno. La parte líquida está formada por hidrocarburos alifáticos de alto peso molecular, dependiendo del residuo de resina de pirólisis, y el residuo sólido o carbón obtenido de la pirólisis del polímero puede utilizarse como carbón activado, antes de sufrir la activación.

La pirólisis se divide en pirólisis térmica y catalítica. La primera implica la descomposición de materiales poliméricos por medio de la temperatura cuando se aplica en condiciones

atmosféricas inertes. Este proceso generalmente se realiza a temperaturas entre 350 y 900°C. Por otro lado, la pirólisis catalizada promueve estas reacciones de descomposición a temperaturas más bajas y tiempos más cortos, debido a la presencia de catalizadores que ayudan en el proceso. Por lo tanto, la pirólisis catalítica presenta una serie de ventajas sobre la térmica, como un menor consumo de energía y la formación de productos con una distribución más estrecha del número de átomos de carbono, que pueden dirigirse a hidrocarburos aromáticos. Debido a la baja conductividad térmica de los polímeros junto con la endotermia del agrietamiento, la pirólisis térmica consume grandes cantidades de energía en comparación con la pirólisis catalítica. Por lo tanto, se han propuesto tecnologías catalíticas para promover el agrietamiento a temperaturas más bajas, lo que resulta en un menor consumo de energía y mayores tasas de conversión.

Procedimiento general de la pirólisis

Se inicia con el pretratamiento de la muestra garantizando óptimas condiciones de almacenamiento(no tenga hongos o esté contaminada), seguidamente se realiza un proceso de secado para eliminar la mayor cantidad de humedad (evitando procesos de hidrólisis u oxidación al momento de iniciar la pirólisis), se realiza un proceso de molienda para garantizar una distribución homogénea de la muestra, para luego ser vertido en el reactor de pirólisis, después del proceso de pirólisis se presentan unas cámaras de recolección de cenizas y material particulado (para evitar interferencias en los productos finales) y finalmente alcanzar las cámaras de recolección del producto final(gas y bio-aceite), en esta cámara hay una salida de gas combustible producido que va direccionada a la cámara de pirolisis [6], [7].

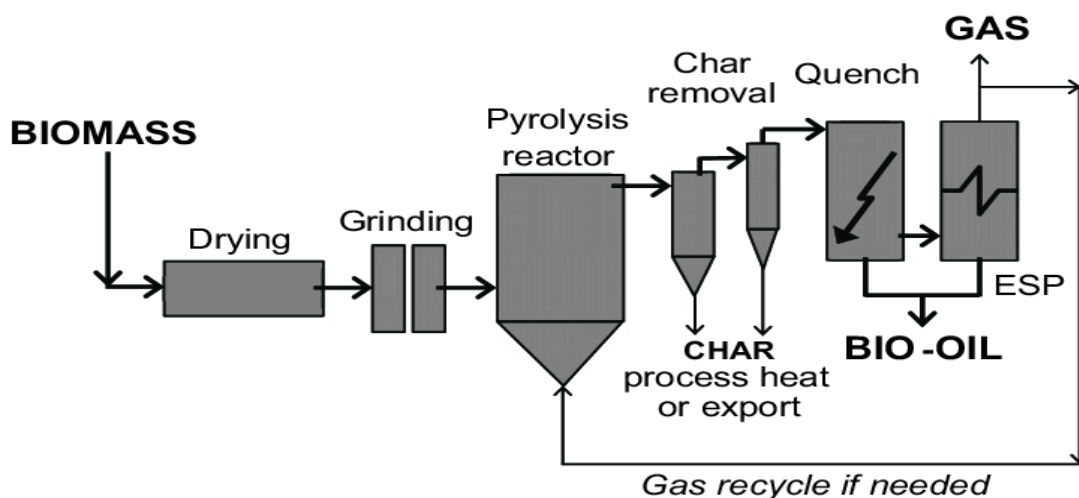


Figura 4. Proceso de pirolisis de la biomasa³⁵

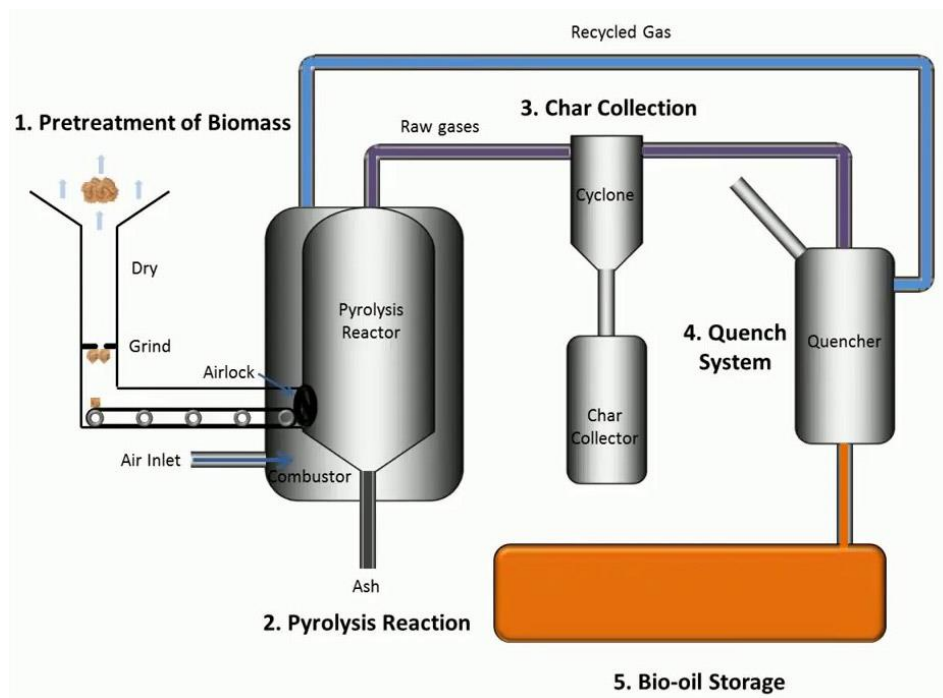


Figura 5. Descripción general y diseño del proceso de pirólisis en la industria.³⁶

Actualmente la pirólisis ha ido llamando la atención gracias a su flexibilidad para generar una mezcla entre compuestos sólidos, líquidos y gaseosos en diferentes proporciones, únicamente con la variación de los parámetros de funcionamiento como la temperatura o la velocidad de calentamiento. Además, ofrece la posibilidad de transformar materiales de baja densidad energética en biocombustibles de alta densidad energética y recuperar productos químicos de mayor valor y si el producto de la pirólisis es de interés por su valor, este puede ser recuperado^[8]. China es uno de los países donde la mayoría de sus desechos en los hogares son los residuos plásticos alimenticios, estos empaques están conformados en su mayoría por polímeros de baja densidad.

Pirólisis de polietileno

El polietileno (PE) es un polímero y su aspecto es de pellets transparente a translúcido formado por cadenas lineales de alcanos. Su punto de fusión puede variar entre 110 y 150°C aunque es usualmente procesado por encima de 190°C, en donde es completamente amorfo. Polimerizando el monómero que en este caso es el etileno, se puede obtener un material con propiedades físicas

muy variadas, con propiedades químicas de un alcano de peso molecular elevado y su origen viene del etano^[5].

El polietileno pertenece al grupo de los termoplásticos los cuales son polímeros lineales a bajas temperaturas y solubles en disolventes orgánicos; al enfriarse después de pasar por un proceso de fundición, recuperan las propiedades originales. En el enfriamiento pueden formar vidrio (una especie de "líquido congelado") por debajo de una temperatura llamada Temperatura de transición del vidrio (Tg) puede cristalizarse; en caso de que se cristalicen, sólo lo hacen parcialmente, permaneciendo el resto en un estado similar al líquido que se llama normalmente amorfo, pero preferiblemente se llama no cristalino Ej: Poliamidas, Celofán, etc. El termoplástico, por consiguiente, el polietileno es procesado sencillamente por extrusión o moldeo por inyección obteniendo formas variables y una alta producción, siendo potencialmente reciclables; el estado de fusión del polímero se adquiere a temperaturas por encima de 150°C y bajo una resistencia al corte causando la modificación de las propiedades de las fibras^[6].

Este polímero puede a su vez clasificarse según su densidad, la cual puede ser alta o baja. El polietileno de baja densidad (PEBD) es un polímero lineal altamente ramificado con baja densidad. Este compuesto implica cientos de ramas de átomos de carbono e hidrógeno, aumentando el contenido amorfo, asimismo su facilidad de procesamiento. Su polimerización es realizada por adición generalmente en presencia de un catalizador que puede ser peróxido benzoico y requiere mayor presión de polimerización que el polietileno de alta densidad. Es un material flexible con un grado de cristalización que está alrededor del 55% y que funde a 115 °C aproximadamente y su temperatura de transición vítrea es de -110 °C. Es utilizado en la industria para la fabricación de hojas plásticas, películas plásticas, aislamiento para alambres, entre otros^[6].

Al igual que la mayoría de materia orgánica utilizada para reacciones pirolíticas, el PEBD genera subproductos de tipo sólido, líquido y gaseoso, descritos a continuación:

- **Sólido:** está compuesto en un 85% por carbón, aunque también puede contener oxígeno e hidrógeno. Su rendimiento en la pirólisis puede estar entre 10% y 50% con respecto al polietileno.

- **Líquido:** el rendimiento del aceite pirolítico puede ir desde 15 a 86% para el polietileno. Este aceite es un fluido oscuro que generalmente contiene un 20% de agua. Consiste en su mayoría por compuestos fenólicos homogéneos. El aceite es una mezcla compleja de hidrocarburos con grandes cantidades de oxígeno y agua. También un aceite que puede ser refinado para la obtención de un combustible, este varía su viscosidad y el contenido de oxígeno de acuerdo a la materia prima que se utilice durante el proceso de pirólisis junto con las condiciones empleadas.
- **Gas:** para este producto puede presentarse un rendimiento que alcanza a ser de 9% y llegar a superar el 70%. En la pirólisis de polietileno reciclado puede presentarse como producto gases condensables y no condensables.

Cromatografía de gases acoplada con espectrometría de masa.

La cromatografía de gases es una técnica de separación en la que los componentes de una muestra se reparten con la ayuda de dos fases ^[21].

- **La fase estacionaria** de la cromatografía de gases se puede clasificar en cromatografía gas-sólido (GSC), donde la fase estacionaria es un sólido, y cromatografía gas-líquido (GLC) que utiliza un líquido como fase estacionaria. GLC es en gran medida más utilizado que GSC.
- **La fase móvil** es con ayuda de un gas (*es decir, el gas portador puede ser de helio, hidrógeno o nitrógeno grado de pureza mínima de 5s*), este transporta la muestra inyectada en el equipo con el fin de atravesar la columna (donde se ubica la fase estacionaria). La separación de los diferentes componentes se logra en base a su presión de vapor relativa y afinidades por la fase estacionaria. La afinidad de una sustancia hacia la fase estacionaria se puede describir en términos químicos como una constante de equilibrio llamada constante de distribución **K_c**, también conocida como coeficiente de partición, , donde **[A]_s** es la concentración del compuesto *A* en la fase estacionaria y **[A]_m** es la concentración del compuesto *A* en la fase móvil (Ecuación 1).

$$Kc = [A]_s/[A]_m$$

Ec. 1 Constante de distribución

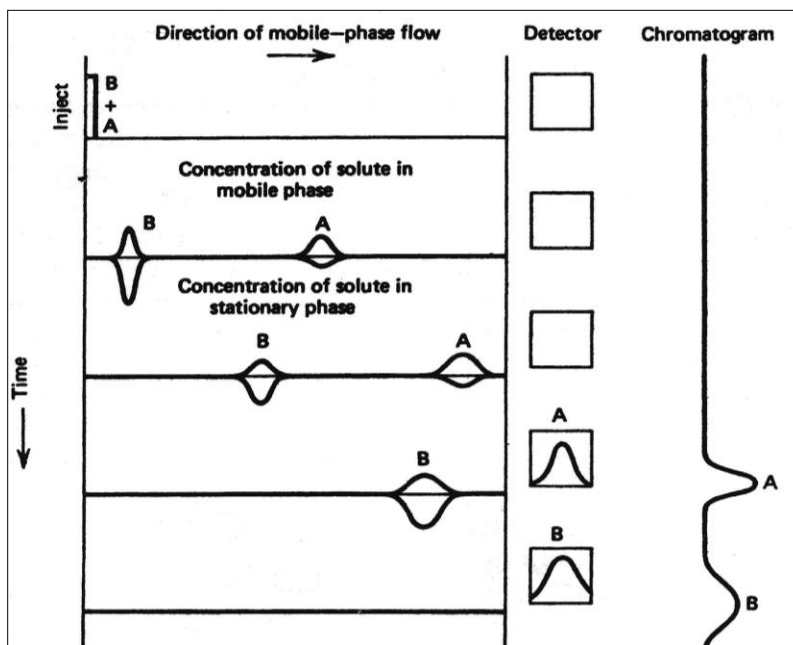


Figura 6. Proceso cromatográfico de la separación de dos compuestos presentes en la muestra A+B²¹.

La constante de distribución (**Kc**) controla el movimiento de los diferentes compuestos a través de la columna, esta constante (**Kc**) depende de la temperatura y de la naturaleza química de la fase estacionaria. Por lo tanto, la temperatura se puede utilizar para mejorar la separación de diferentes compuestos a través de la columna o fase estacionaria diferente.

Componentes de un sistema de cromatografía de gases

La Figura muestra un diagrama esquemático de los componentes de un cromatógrafo de gases típico, mientras que la Figura muestra una fotografía de un cromatógrafo de gases típico acoplado a un espectrómetro de masas (GC/MS) ^[21].

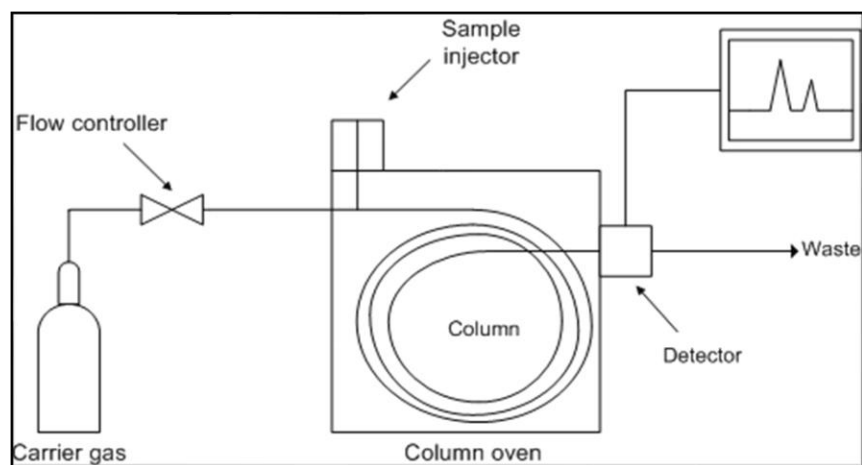


Figura 7. Diagrama esquemático de los componentes de un cromatógrafo de gases típico³⁸.

- **Gas portador**

La función del gas portador -fase móvil del GC- es transportar las moléculas de la muestra a lo largo de la columna mientras no se disuelven ni se adsorben en la fase estacionaria. El gas portador es inerte y no interactúa con la muestra, por lo que la selectividad de la separación por GC puede atribuirse únicamente a la fase estacionaria. Sin embargo, la elección del gas portador es importante para mantener una alta eficiencia.

- **Inyector**

Este es el lugar donde la muestra se volatiliza (*se debe garantizar este proceso previo al ingreso de la muestra a la columna capilar*) y se introduce cuantitativamente en la corriente de gas portador. Por lo general, se usa una jeringa para inyectar la muestra en el puerto de inyección. Las muestras se pueden inyectar de forma manual o automática con dispositivos mecánicos que a menudo se colocan encima del cromatógrafo de gases: *los muestreadores automáticos*.

- **Columna**

La columna de cromatografía de gases puede considerarse el corazón del sistema GC, donde tiene lugar la separación de los componentes de la muestra. Las columnas se clasifican como columnas empaquetadas (primeros tipos de columnas utilizadas en GC) o capilares (Son las columnas que se utilizan hoy en día en GC).

En el presente laboratorio se utilizaron columnas capilares, por lo que nos centraremos en este tipo de columnas. Para definir una columna capilar, se deben especificar cuatro parámetros:

1. La fase estacionaria es el parámetro que determinará la resolución final obtenida, e influirá en otros parámetros de selección. Cambiar la fase estacionaria es la forma más poderosa de alterar la selectividad en el análisis de GC.
2. La longitud está relacionada con la eficiencia general de la columna y con el tiempo de análisis general. Una columna más larga aumentará la eficiencia máxima y la calidad de la separación, pero también aumentará el tiempo de análisis.
Una de las ventajas y desventajas clásicas en las separaciones por cromatografía de gases (GC) se encuentra entre la velocidad de análisis y la resolución máxima.
3. El diámetro interno (ID) de la columna puede influir en la eficiencia de la columna (*y, por lo tanto, en la resolución*) y también en la capacidad de la columna. Al disminuir el diámetro interno de la columna, se pueden lograr mejores separaciones, pero la sobrecarga de la columna (*aumenta la presión de la columna*) y el ensanchamiento de los picos pueden convertirse en un problema.
4. La capacidad de muestra de la columna también dependerá del espesor de la película. Además, la retención de los componentes de la muestra se verá afectada por el grosor de la película y, por lo tanto, por su tiempo de retención. Se puede lograr un tiempo de ejecución más corto y una resolución más alta utilizando películas delgadas; sin embargo, estas películas ofrecen una capacidad menor.

- **Detector**

El detector detecta una propiedad fisicoquímica del analito y proporciona una respuesta que se amplifica y convierte en una señal electrónica para producir un cromatograma. La mayoría de los detectores utilizados en GC se inventaron específicamente para esta técnica, excepto el detector de conductividad térmica (TCD) y el espectrómetro de masas ^[21].

El espectrómetro de masas se ha convertido en un detector estándar que permite límites de detección más bajos y no requiere la separación de todos los componentes presentes en la muestra.

La espectroscopia de masas es uno de los tipos de detección que proporciona más información con solo microgramos de muestra. La identificación cualitativa de compuestos desconocidos, así como el análisis cuantitativo de muestras, es posible mediante GC-MS. Cuando el GC se acopla a un espectrómetro de masas, los compuestos que eluyen de la columna del GC se ionizan mediante el uso de electrones (EI, ionización electrónica) o un reactivo químico (CI, ionización química). Los fragmentos cargados se enfocan y aceleran en un analizador de masas: típicamente un analizador de masas cuadrupolar. Los fragmentos con diferentes proporciones de masa a carga generarán señales diferentes, por lo que se detectará cualquier compuesto que produzca iones dentro del rango de masa del analizador de masa. Se pueden lograr límites de detección de 1-10 ng o incluso valores más bajos (p. ej., 10 pg) seleccionando el modo de escaneo apropiado.

Clasificación del proceso de pirólisis para polímeros

La pirólisis también puede clasificarse en lenta, rápida y flash en función de la velocidad de calentamiento y los tiempos de residencia del vapor. En la pirólisis lenta, la temperatura y la velocidad de calentamiento son bajas, pero el tiempo de residencia del vapor es demasiado largo (de 5 a 30 minutos), lo que provoca el craqueo de los productos primarios de la pirólisis. Además, un mayor tiempo de residencia del vapor puede hacer que reaccionen entre sí y da lugar a una mayor producción de carbón, pero la producción de aceite pirolítico se reduce significativamente. La pirólisis rápida y flash son más adecuadas para la pirólisis de plásticos, ya que presentan alta temperatura, altas velocidades de calentamiento y corto tiempo de residencia del vapor para producir mayores rendimientos de aceite pirolítico que gas y char, que es el material sólido que queda después de los gases ligeros.

La pirólisis rápida tiene el potencial de generar alrededor de un 60-75 % en peso de productos derivados del petróleo, con un 15-25 % de productos sólidos y un 10-20 % de productos gaseosos. La tecnología de pirólisis rápida requiere menores costes de inversión y tiene una alta eficiencia energética en comparación con otros procesos, sobre todo en el caso de plantas a pequeña escala. Por otro lado, la pirólisis flash tiene el potencial de producir hasta un 75% de aceite. Algunos de los inconvenientes de la pirólisis flash son la presencia de sólidos en el aceite, la escasa estabilidad térmica y la corrosividad del aceite, así como el aumento de la viscosidad con el tiempo debido a

la acción catalítica del carbón residual en el aceite. Las condiciones del proceso de pirólisis se muestran en la Tabla 2^[32].

Tabla 2. Condiciones de pirolisis

Tipo de pirolisis	Tiempo de residencia (s)	Tamaño de la partícula (mm)	Velocidad de calentamiento (K/s)	Temp (K)	Rendimiento del producto (%)		
					Aceite	Char	Gas
Lenta	450 - 550		0.1-1	550-950	30	35	35
Rápida	0.5-10	<1	10-200	850-1250	50	20	30
Flash	<0.5	<0.2	>1000	1050-1300	75	12	13

Técnica de Py-GC/MS.

Conocida como la cromatografía de gases de pirólisis acoplada a espectrometría de masas (Py-GC/MS) se utiliza para caracterizar las estructuras de composición de compuestos previamente volatilizados. Esta caracterización se realiza en atmósfera inerte (normalmente con helio, menos volátil que el H), analizando los productos de degradación térmica de los compuestos obtenidos tras calentar la muestra a altas temperaturas, normalmente entre 250 °C y 700 °C ^[22].

Py-GC/MS en sus principios iniciales fue aplicado para estudiar la estructura de sistemas poliméricos ^[23], y se establecido como una técnica analítica práctica, rápida y confiable para una variedad de aplicaciones para muestras de biomasa (poder calórico y generación de gases volátiles reutilizables), incluido el análisis de varios aspectos químicos de materiales poliméricos y la caracterización de aditivos de plásticos orgánicos (OPA) ^{[24], [25]}.

Esta es una técnica muy potente, ya que permite la identificación de componentes poliméricos a partir de una mezcla pirolítica compleja utilizando un enfoque de búsqueda en bibliotecas. Además, las bibliotecas de pirólisis comerciales pueden ser una ayuda realmente útil.

En casos más complejos, la simple identificación espectral de masas mediante comparación de bibliotecas (por ejemplo, NIST, Wiley, etc.) tendrá una utilidad limitada. Un enfoque basado en bases de datos es muy útil para automatizar la extracción de información significativa, simplificando la tarea de evaluación de los datos. Este enfoque consta básicamente de tres pasos: medición de sustancias de referencia para generar una base de datos, medición de muestras desconocidas o difíciles y utilización de la base de datos para la identificación de estas muestras^[33].

La cromatografía de gases/espectrometría de masas por pirólisis (Pyrolysis-GC-MS) es una herramienta analítica utilizada para caracterizar una amplia variedad de polímeros y materiales compuestos que no pueden analizarse con la GC-MS tradicional. Se introduce una muestra en un ambiente caldeado y se descompone en fragmentos/componentes estables más pequeños (también conocidos como pirolizados) para su análisis^[34].

3. OBJETIVOS

Objetivo general.

Identificar los compuestos volátiles generados por un proceso de pirolisis de polímeros de baja densidad (LDPE) constituidos por diferentes bolsas de plásticas de uso doméstico.

Objetivos específicos.

1. Identificación de los efluentes gaseosos generados por la pirolisis de LDPE con distintos aditivos.
2. Estudio de la influencia de la temperatura, rampa de temperaturas y tiempo de residencia en el reactor sobre el perfil volátil fluidos gaseosos.
3. Determinación de los parámetros del pirolizador para reducir al máximo en contenido benceno-derivados en los efluentes gaseosos.

4. MATERIALES Y MÉTODOS

Reactivos

No se utilizó ningún reactivo en la preparación de la muestra.

Instrumentación

- **Balanza Analítica** para obtener con precisión el peso de la muestra.



Imagen 1. Balanza analítica de alta precisión.

- **Espectrómetro de masas** cuadrupolo-GC, SCION GC-MS System marca Bruker acoplado a un pirolizador multidisparo de FrontierLab modelo EGA/Py-3030D.



Imagen 2. Espectrómetro de masas.

A continuación, se encuentra la información general de las condiciones y parámetros con los que se trabajó durante la pirolisis.

- Parámetros del espectro de masas:
 - Rango m/z: 90-300m/z
 - Pendiente RF : 2.30288
 - Pendiente DC : 0.20599
 - Polaridad de la varilla : Positiva
- Fuente de iones.
 - Energía de electrones: 70 eV.
 - Corriente fijada en los filamentos: 40 μ A.
 - Filamentos usados: 2.
 - Temperatura: 300°C
- Turbo bomba.
 - Velocidad : 100% Velocidad
 - Potencia : 19 W



Figura 8. Equipo SCION GC-MS System marca Bruker y pirolizador FrontierLab modelo EGA/PY-3030D²⁶



Figura 9. Pirolizador de micro horno de disparos múltiples modelo Scion - SQ GC-MS - Detector de rango dinámico extendido (EDR) ²⁷

- **Cubilotos de pirolizador**, se utilizan para introducir la muestra de plástico en el Inyector.

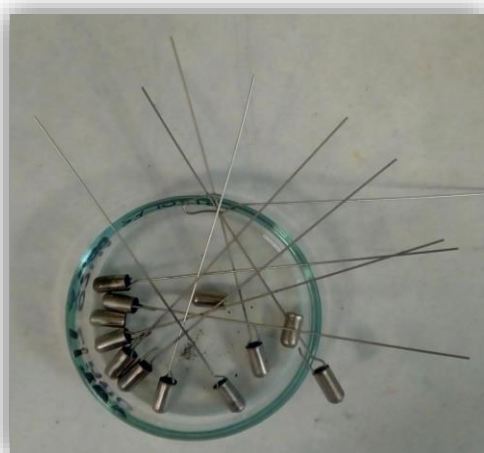


Imagen 3. Cubilotos de pirolizador.

- **Columna HP-5:** Constituida comúnmente por Fenilo al 5% y Dimetilpolisiloxano al 95%, trabaja en un rango de temperatura de -60 a 325/350°C.

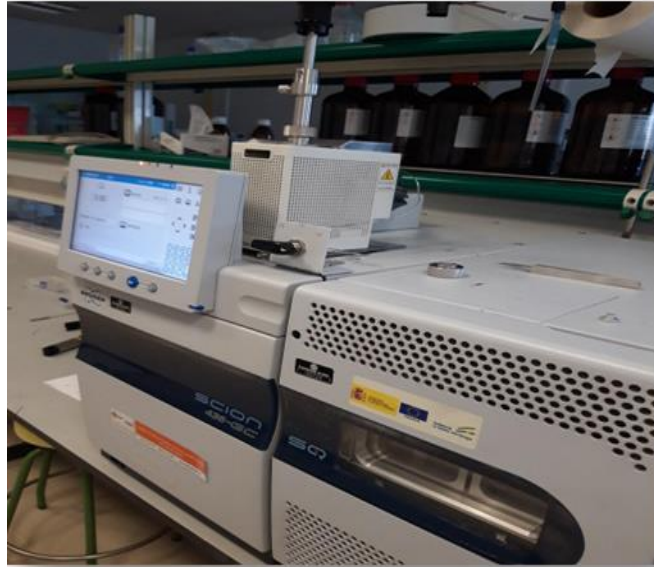


Imagen 4. Equipo utilizado SCION GC-MS System marca Bruker acoplado el pirolizador Frontier Lab modelo EGA/Py-3030D.

- **Columna capilar del cromatógrafo de gases.** Es una columna Bruker BR-5ms, HP-5 de 30m x 0.25mm, 0.25 micras. Las condiciones de trabajo establecidas son las siguientes:
 - Condiciones del inyector:
 - La temperatura del inyector tipo (Split/Splitless) a 300°C.
 - Temperatura de la línea de transferencia: 297°C.
 - Potencia del horno: Encendido.
 - Refrigerante: Apagado.
 - Habilitar refrigerante a: 30.1 C
 - Tiempo de refrigeración: 0.01 min
 - Condiciones de la columna:
 - Temperatura inicial de la columna: 40°C
 - Temperatura Final de la columna: 320°C
 - Razón de incremento de temperatura de columna: 10°C/min
 - Tiempo total del análisis: 35 min.

Materiales

Se utilizaron como muestras 5 bolsas de uso doméstico, con diferentes colores y con una leve percepción de aromas.

- Bolsa de basura nueva azul.



Imagen 5. Bolsa Azul.

Muestra de color Azul utilizada para la identificación de los efluentes gaseosos después de someterse a la pirolisis.

- Bolsa de basura nueva lila



Imagen 6. Bolsa Lila.

Muestra de color Lila utilizada para la identificación de los efluentes gaseosos después de someterse a la pirolisis.

- Bolsa de basura nueva amarilla



Imagen 7. Bolsa Amarilla.

Muestra de color Amarillo utilizada para la identificación de los efluentes gaseosos después de someterse a la pirolisis.

- Bolsa de alimentación usada transparente



Imagen 8. Bolsa Transparente.

Muestra incolora utilizada para la identificación de los efluentes gaseosos después de someterse a la pirolisis.

- Mix de todas las bolsas.



Imagen 9. Mix de Bolsas

Mezcla de bolsas utilizada para la identificación de los efluentes gaseosos después de someterse a la pirolisis.

Procedimiento experimental

En la siguiente sección se describe el proceso de análisis de 4 bolsas diferentes (azul, amarilla, lila, incolora usada y la mezcla de las bolsas). Se le realizó un proceso de pirolisis previo a la lectura de los gases producidos de la degradación de las muestras. Los gases recolectados se analizaron en un Py-GC/MS donde se identificaron algunos polímeros.

Después de seleccionadas y cortadas las bolsas correspondientes, se determinó la masa de cada una de las muestras, obteniendo la tabla 3:

Tabla 3. Masa de las muestras tomadas para el procedimiento experimental.

MUESTRAS (mg)				
	Rampa 1	Rampa 2	Rampa 3	Rampa 4
Bolsa Azul	1,20	1,10	0,70	0,32
Bolsa Lila	1,20	1,10	0,46	0,36
Bolsa Amarilla	1,24	1,15	0,52	0,40

Bolsa Transparente	1,55	1,50	0,62	0,25
Mix de bolsas	1,62	2,01	0,80	0,90

El equipo SCION GC-MS System marca Bruker y pirolizador FrontierLab modelo EGA/Py-3030D se preparó a diferentes condiciones de trabajo, para cada análisis se realizó una rampa de temperatura. Son 4 rampas con un rango de temperatura que va de 330°C a 900°C siguiendo diferentes parámetros configurados en el sistema del software, como se puede apreciar en la figura 10.

Tabla 4. Descripción de Rampas.

Descripción	T Inicial (°C)	T Final (°C)
Rampa 1	330	450
Rampa 2	450	500
Rampa 3	500	700
Rampa 4	700	900

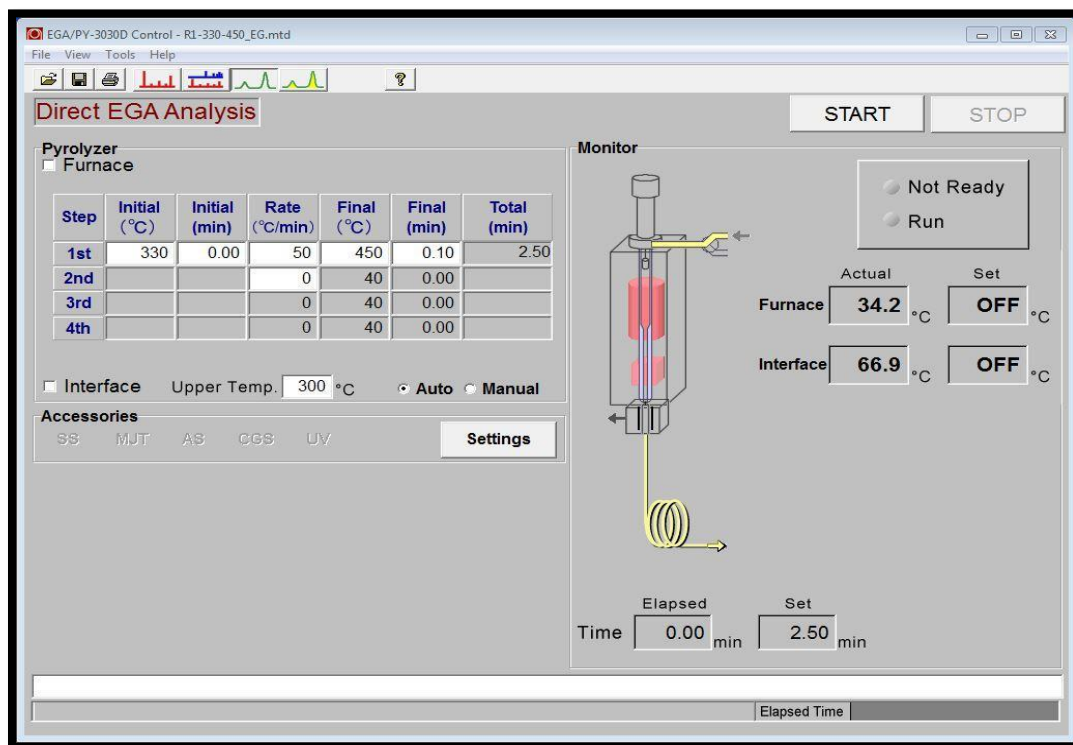


Figura 10. Configuración de los parámetros de la primera rampa de 330°C a 450°C en el MS.

1) Rampa 1: Rango de temperatura de trabajo 330-450:

El pirolizador inició con una temperatura de 330°C, hasta una temperatura final de 450°C, con una razón de incremento de 50°C/min, tomando un tiempo total de 2,50 min.

2) Rampa 2: Rango de temperatura de trabajo 450-500:

El pirolizador inició con una temperatura de 450°C hasta una temperatura final de 500°C, con una razón de incremento de 50°C/min, tomando un tiempo total de 1,10 min.

3) Rampa 3: Rango de temperatura de trabajo 500-700:

El pirolizador inició con una temperatura de 500°C hasta una temperatura final de 700°C, con una razón de incremento de 50°C/min, tomando un tiempo total de 4,10 min.

4) Rampa 4: Rango de temperatura de trabajo 700-900:

El pirolizador inició con una temperatura de 700°C hasta una temperatura final de 900°C, con una razón de incremento de 50°C/min, tomando un tiempo total de 4,10 min.

Luego de la pirólisis, se procede a aplicar la cromatografía de gases acoplada a espectrometría de masas (SCION GC-MS System Marca Bruker), las condiciones de trabajo establecidas:

La interfaz del equipo se configura a 300°C

• Condiciones del inyector: - La temperatura del inyector tipo (Split/Splitless) a 300°C. - Temperatura de la línea de transferencia: 297°C.	• Condiciones de la columna: - Temperatura inicial de la columna: 40°C - Temperatura Final de la columna: 320°C - Razón de incremento de temperatura de columna: 10°C/min. - Tiempo total del análisis: 35 min.
• Parámetros del espectro de masas: - Rango m/z: 90-300m/z.	• Para la fuente: - Temperatura: 300°C (Verificar la temperatura de fuente). - El voltaje es de 70 eV. - Corriente fijada en los filamentos: 40µA. - Filamentos usados: 2.”

5. RESULTADOS EXPERIMENTALES.

5.1 Resultados de la espectrometría de masa de la muestra de bolsa azul

Muestra pirolizada aplicando la cromatografía de gases.

5.1.1. Rampa 1.

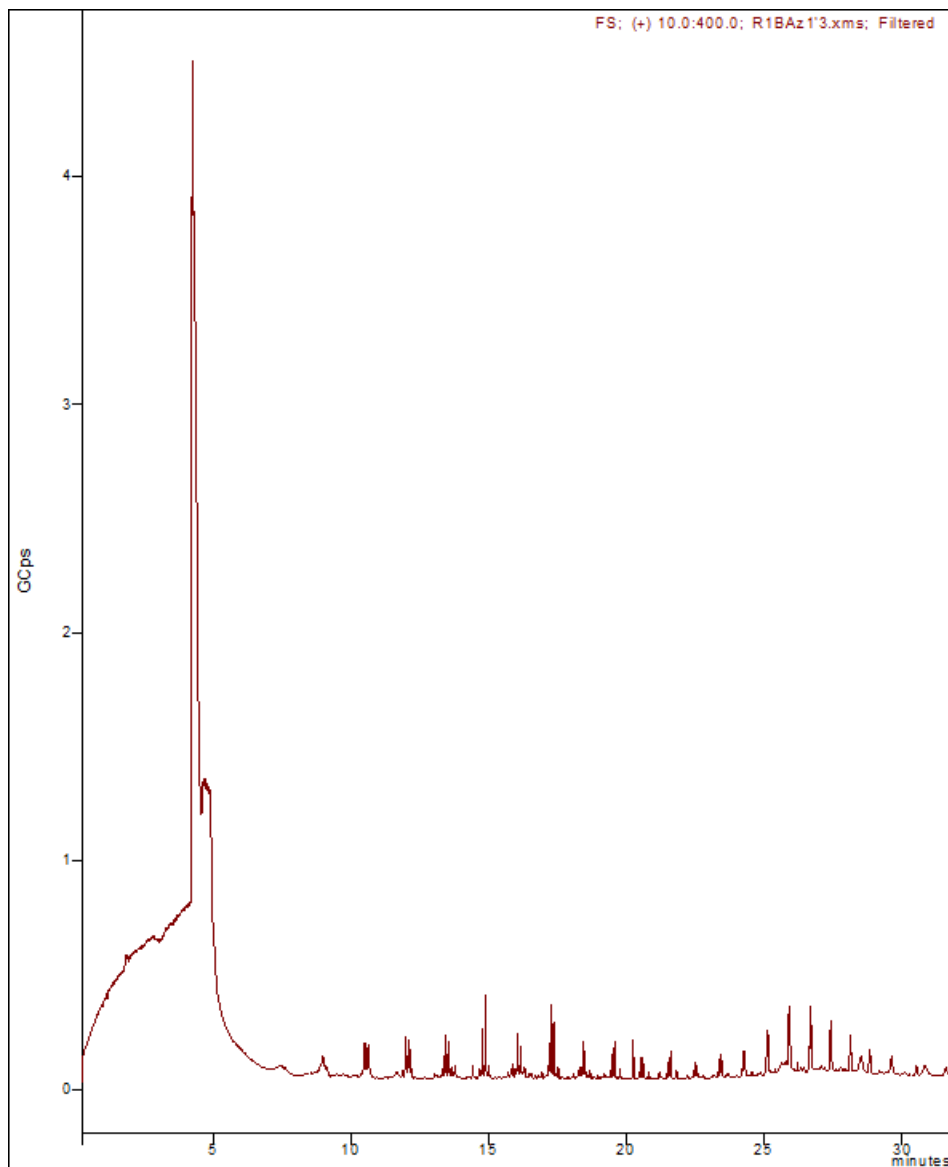


Figura 11. Espectro Muestra Azul- R1

Espectrometría de masa de la muestra de bolsa azul en condiciones de la rampa 1 al pirolizar.

Tabla 5. Compuestos orgánicos detectados en la espectrometría de masa de la muestra de bolsa azul en la rampa 1.

Nombre del compuesto	Tiempo de retención	Área
1-Tridecene	13.41	3.11E+08
Pentadecane	13.52	3.08E+08
1-Tetradecene	14.76	3.90E+08
Heptadecane	14.87	6.44E+08
7-Hexadecene, (Z)-	16.04	2.88E+08
Nonadecane	16.14	1.88E+08
Diethyl Phthalate	17.25	7.04E+08
Eicosane	17.34	3.95E+08
5-Octadecene, (E)-	18.40	2.64E+08
1-Nonadecene	19.50	2.05E+08
Tetracosane	19.57	2.34E+08
1,2-Benzenedicarboxylic acid, bis(2-methylpropyl) ester	20.23	3.04E+08
1-Docosene	21.52	1.28E+08
Octacosane	21.59	2.03E+08
1-Hexacosene	23.38	1.07E+08
Tetratetracontane	24.29	1.17E+08
1,19-Eicosadiene	25.04	1.14E+08
1-Tetracosene	25.08	3.46E+08
Hentriacontane	25.12	3.10E+08

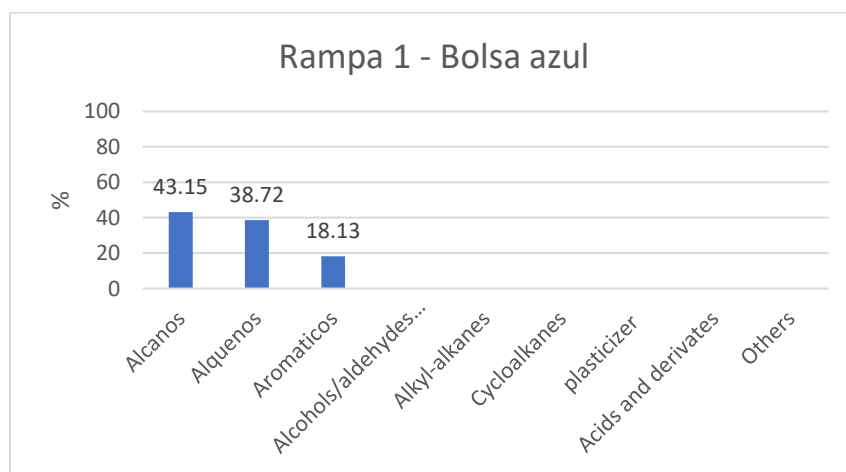


Figura 12. Gráfica de grupos funcionales Muestra Azul-R1

Porcentajes de los compuestos detectados y clasificados en sus grupos funcionales, en la espectrometría de masas de la muestra azul en condiciones de la rampa 1.

5.1.2. Rampa 2.

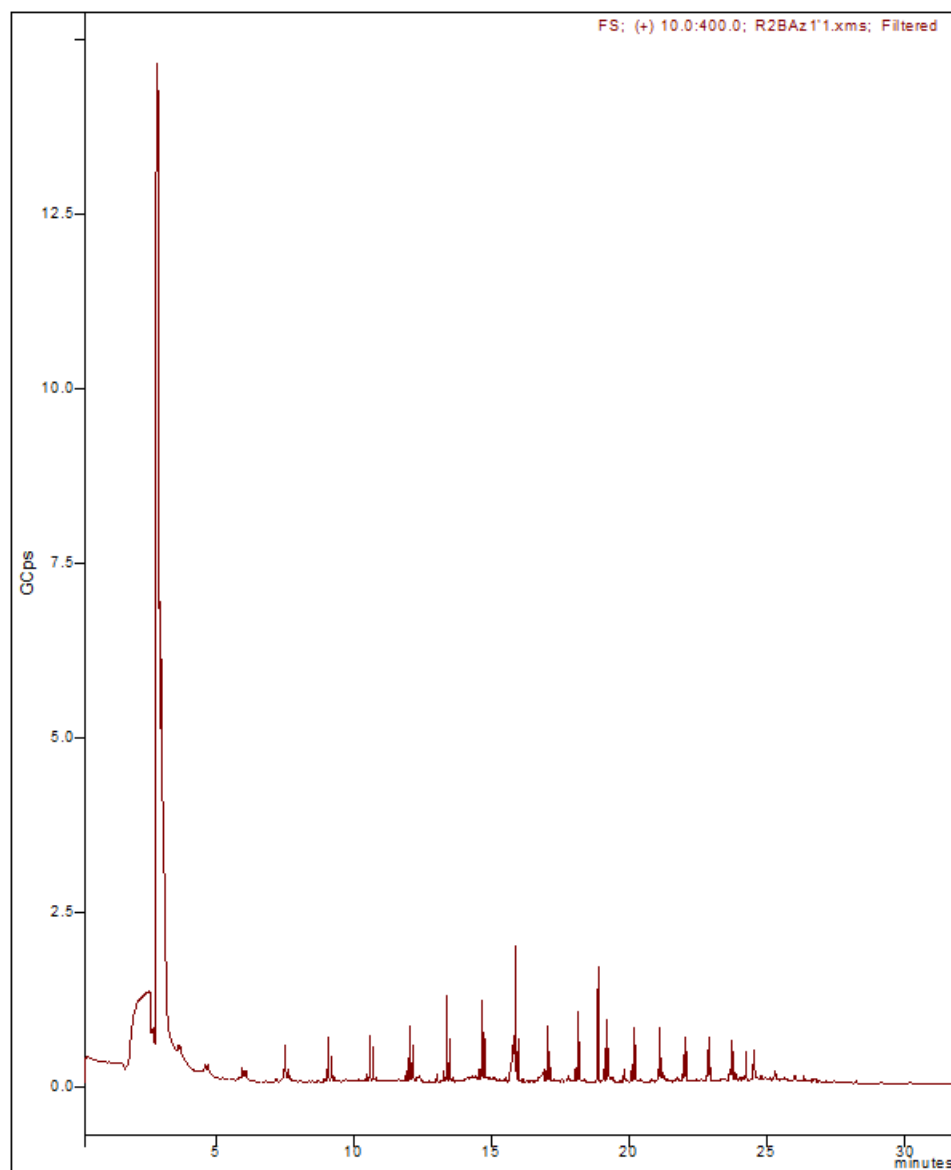


Figura 13. Espectro Muestra Azul- R2

Espectrometría de masa de la muestra de bolsa azul en condiciones de la rampa 2 al pirolizar.

Tabla 6. Compuestos orgánicos detectados en la espectrometría de masa de la muestra de bolsa azul en la rampa 2.

Nombre del compuesto	Tiempo de retención	Área
1-Heptene	3.61	3.55E+08
Hydroxylamine, O-(2-methylpropyl)-	3.68	7.70E+08
Heptane, 2,4-dimethyl-	4.69	2.49E+08
Cyclopropane, 1-hexyl-2-methyl-	5.94	3.95E+08
Nonane	6.07	2.53E+08
Cyclopropane, 1-heptyl-2-methyl-	7.49	1.07E+09
Decane	7.62	2.93E+08
Undecane	9.19	7.45E+08
1-Dodecene	10.57	1.08E+09
Tridecane	10.69	7.63E+08
1,12-Tridecadiene	11.89	2.47E+08
1-Tridecene	12.01	1.19E+09
Pentadecane	12.12	8.94E+08
2-Butyl-1-decene	13.00	2.18E+08
1-Tetradecene	13.38	2.00E+09
1-Heptadecene	14.66	1.73E+09
Diethyl Phthalate	15.78	9.77E+08
Heptadecane	15.95	8.66E+08
1,14-Tetradecanediol	16.93	2.52E+08
5-Octadecene, (E)-	17.02	1.12E+09
Eicosane	17.09	6.14E+08
1,15-Pentadecanediol	18.03	3.10E+08
E-14-Hexadecenal	18.11	1.47E+09
1,2-Benzenedicarboxylic acid, bis(1-methylethyl) ester	18.86	3.39E+09
3-Eicosene, (E)-	19.15	1.29E+09
Heneicosane	19.22	8.33E+08
Di-N-butylphthalate	19.80	3.02E+08
1,19-Eicosadiene	20.07	3.04E+08
1-Nonadecene	20.14	1.16E+09
Tetracosane	20.20	8.25E+08
18-Nonadecen-1-ol	21.03	3.01E+08
1-Hexyl-2-nitrocyclohexane	21.94	2.56E+08
1-Docosene	22.00	9.39E+08
Octacosane	22.91	4.53E+08
Hexacosane	23.74	4.93E+08
Carbobenzyloxy-L-phenylalanyl-L-norleucine methyl ester	24.22	6.36E+08
17-Pentatriacontene	24.50	5.22E+08
Hydrogen cyanide	34.62	4.21E+09
Monoethanolamine	35.19	2.06E+09
Formaldehyde	36.34	1.30E+09
L-Alanine, ethyl ester	36.55	1.29E+09

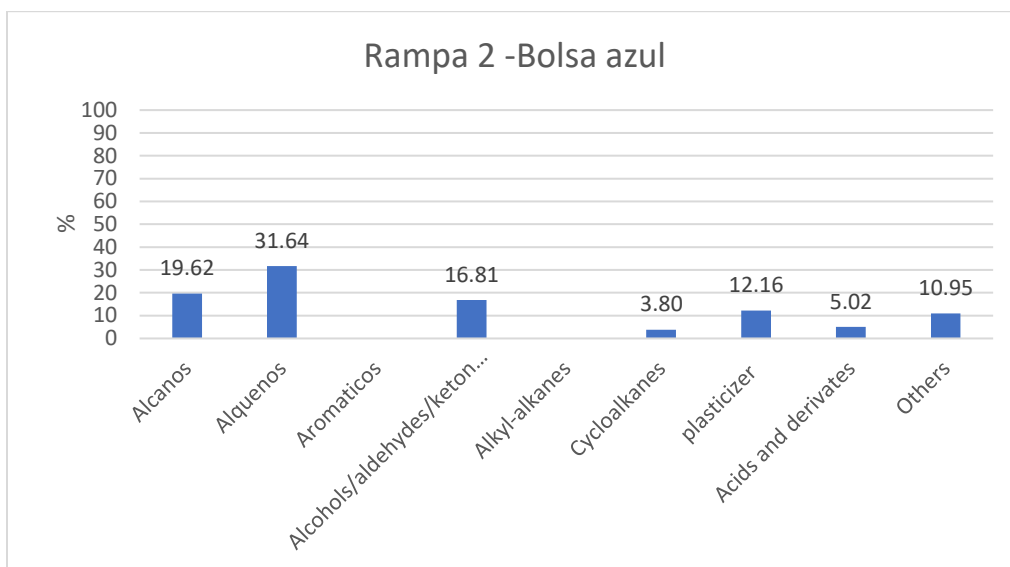


Figura 14. Grafica de grupos funcionales Muestra Azul- R2.

Porcentajes de los compuestos detectados y clasificados en sus grupos funcionales, en la espectrometría de masas de la muestra azul en condiciones de la rampa 2.

5.1.3. Rampa 3.

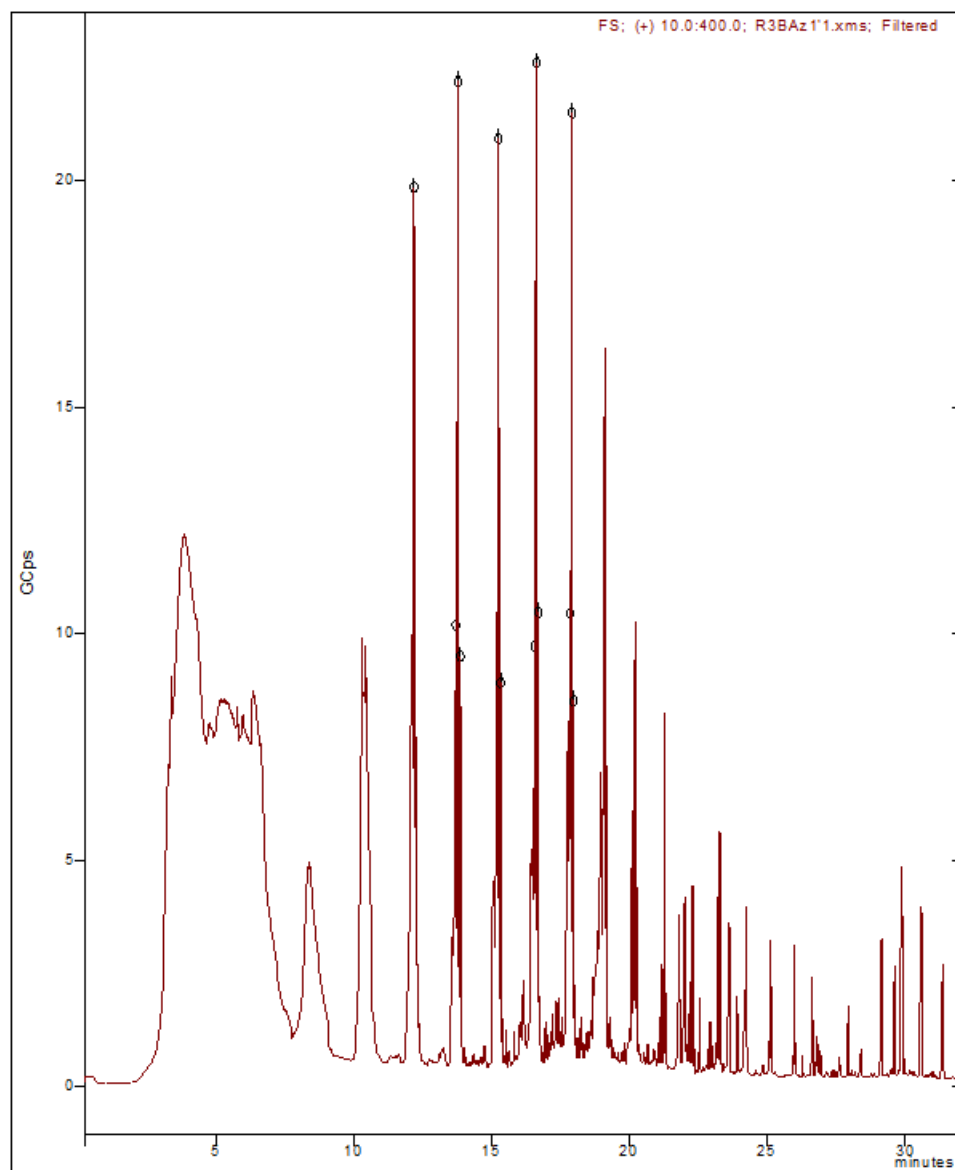


Figura 15. Espectro Muestra Azul-R3

Espectrometría de masa de la muestra de bolsa azul en condiciones de la rampa 3 al pirolizar.

Tabla 7. Compuestos orgánicos detectados en la espectrometría de masa de la muestra de bolsa azul en la rampa 3.

Nombre del compuesto	Tiempo de retención	Área
Cyclopropane, 1-heptyl-2-methyl-	12.17	3.75E+10
2-Tridecene, (Z)-	13.69	1.45E+10
1-Dodecene	13.77	5.30E+10
Tridecane	13.85	1.42E+10
Pentadecane	15.31	1.28E+10
1-Heptadecene	16.54	6.65E+09
1-Tetradecene	16.62	6.56E+10
Heptadecane	16.68	1.11E+10
7-Hexadecene, (Z)-	17.84	5.22E+09

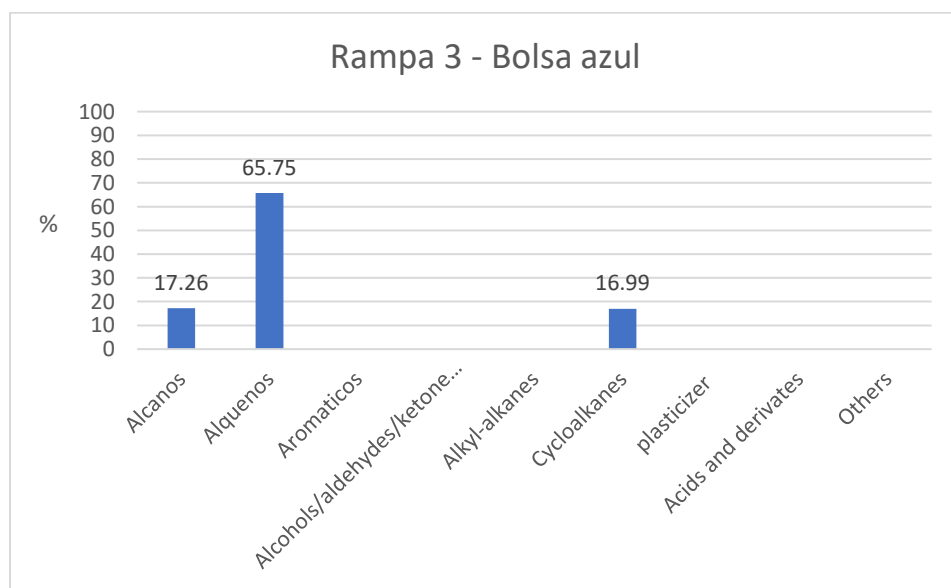


Figura 16. Grafica de grupos funcionales Muestra Azul-R3.

Porcentajes de los compuestos detectados y clasificados en sus grupos funcionales, en la espectrometría de masas de la muestra azul en condiciones de la rampa 3.

5.1.4. Rampa 4.

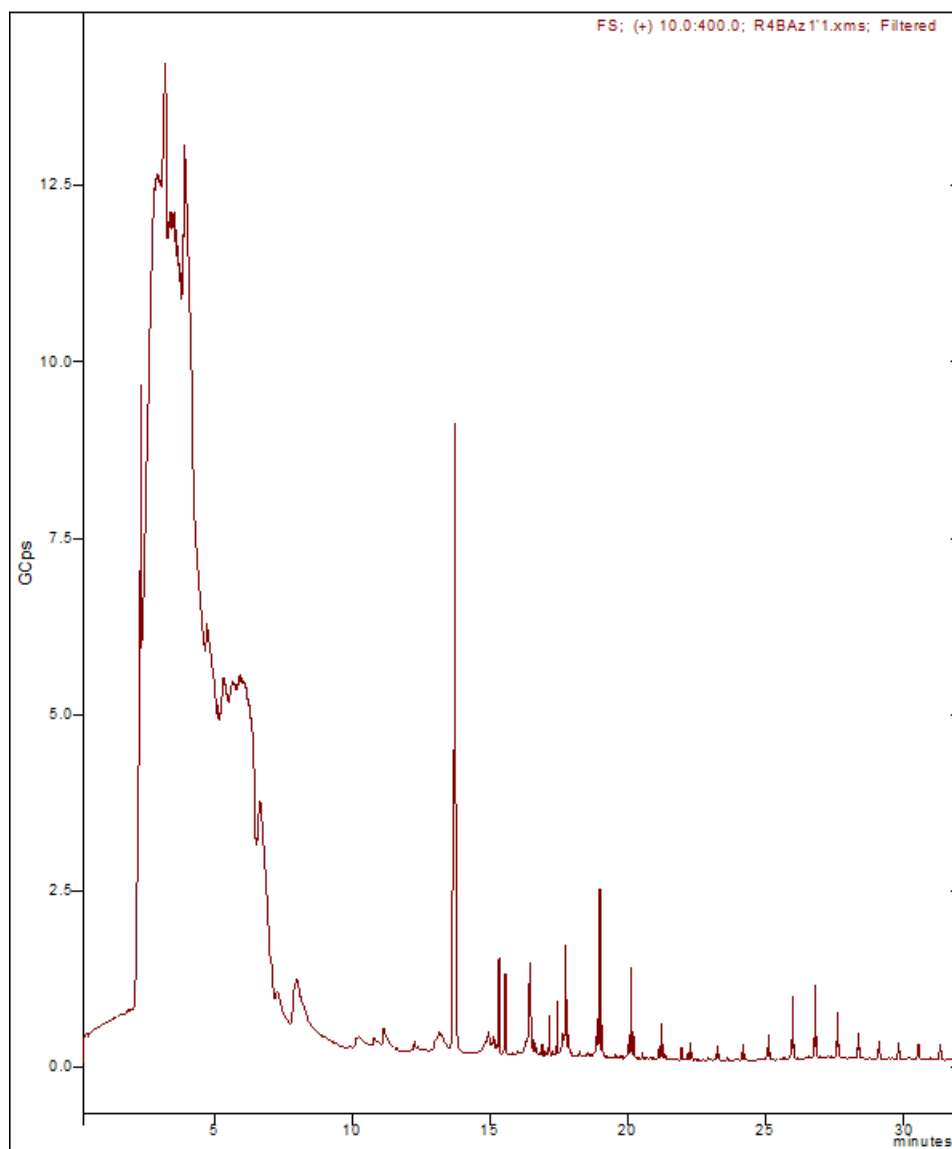


Figura 17. Espectro Muestra Azul-R4

Espectrometría de masa de la muestra de bolsa azul en condiciones de la rampa 4 al pirolizar.

Tabla 8. Compuestos orgánicos detectados en la espectrometría de masa de la muestra de bolsa azul en la rampa 4.

Nombre del compuesto	Tiempo de retención	Área
Vanadium, pentacarbonyl(.eta.3-2-propenyl)-	2.33	4.55E+10
Cyclopropene	2.65	1.26E+11
3-Methyl-1,2-diazirine	2.80	1.44E+10
Acetylene	3.28	1.07E+10
1-Octanamine, N-methyl-	3.31	2.08E+10
Benzene	3.35	1.13E+10
Pyridine, 2-nitro-	3.51	2.09E+10
Benzeneethanamine, 3-fluoro-.beta.,5-dihydroxy-N-methyl-	3.79	5.60E+09
Propanedinitrile, propylidene-	3.86	1.34E+10
2H-Pyrano[3,2-b]pyridine	3.90	1.29E+11
Hydrogen cyanide	5.10	3.53E+08
Toluene	5.21	9.74E+07
Phenethylamine, p,.alpha.-dimethyl-	5.35	3.11E+08
Ethylene	5.94	4.64E+07
Phenol, 4-[2-(methylamino)ethyl]-	6.38	1.21E+08
Cyclopropylacetonitrile	6.64	1.84E+10
Gln-Ala	7.26	1.49E+09
Bicyclo[4.2.0]octa-1,3,5-triene	7.96	1.42E+10
Styrene	9.37	1.94E+08
Naphthalene	13.72	3.98E+10
1-Tetradecene	15.12	2.23E+08
1H-Indene, 1-ethylidene-	15.31	3.28E+09
Biphenyl	16.45	3.28E+09
Pentadecane	16.57	2.30E+08
Naphthalene, 2-ethenyl-	17.14	7.91E+08
Acenaphthylene	17.43	1.20E+09
Cetene	17.73	3.17E+09
1,12-Tridecadiene	18.87	7.44E+08
Heptadecane	19.04	6.90E+08
1,14-Tetradecanediol	20.02	4.39E+08
Eicosane	20.19	4.18E+08
5-Eicosene, (E)-	21.20	7.64E+08
1-Nonadecene	22.24	3.87E+08
1-Docosene	24.17	4.62E+08
1,19-Eicosadiene	25.91	3.32E+08
Hentriacontane	26.83	3.57E+08
1-Hexyl-2-nitrocyclohexane	27.55	2.36E+08
1-Hexacosene	28.36	3.94E+08

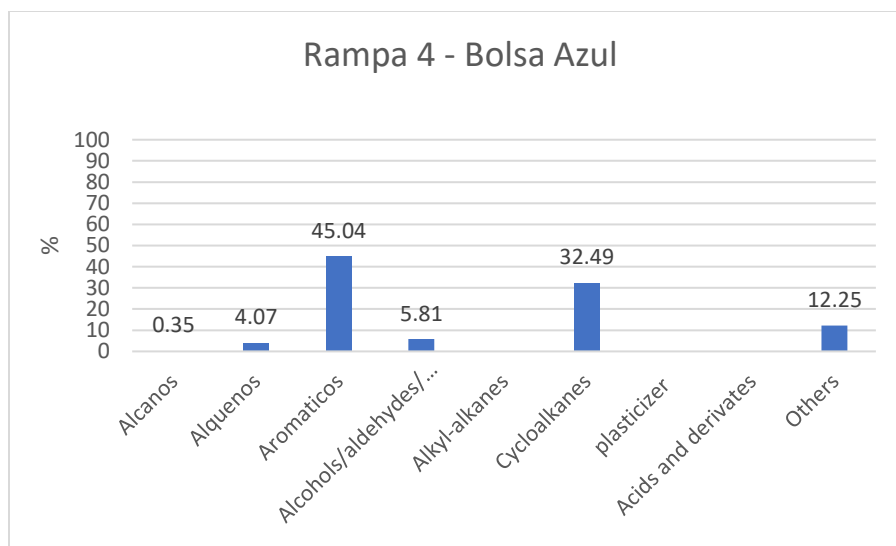


Figura 18. Grafica de grupos funcionales Muestra Azul-R4.

Porcentajes de los compuestos detectados y clasificados en sus grupos funcionales, en la espectrometría de masas de la muestra azul en condiciones de la rampa 4.

5.2 Resultados de la cromatografía de la muestra de bolsa color lila.

5.2.1. Rampa 1.

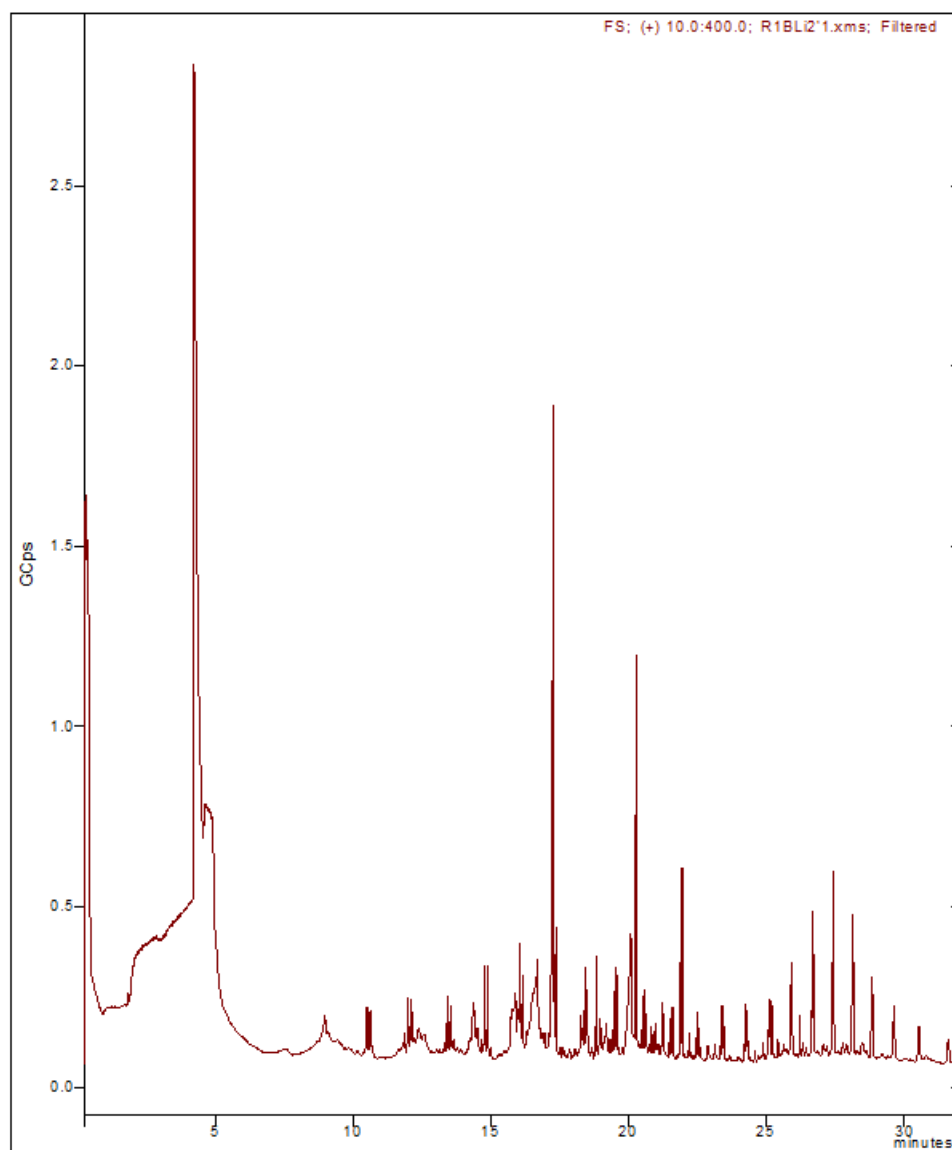


Figura 19. Espectro Muestra Lila-R1

Espectrometría de masa de la muestra de bolsa de color lila en condiciones de la rampa 1 al pirolizar.

Tabla 9. Compuestos orgánicos detectados en la espectrometría de masa de la muestra de bolsa de color lila en la rampa 1.

Nombre del compuesto	Tiempo de retención	Área
Cyclopropane, 1-heptyl-2-methyl-	10.481	4.44E+08
Oxalic acid, isobutyl nonyl ester	10.607	5.49E+08
3-Tetradecene, (E)-	11.974	3.41E+08
Tetradecane	12.098	2.71E+08
1-Tetradecene	13.403	3.27E+08
Pentadecane	14.861	4.51E+08
Cetene	16.044	3.83E+08
Hexadecane	16.137	2.99E+08
Diethyl Phthalate	17.255	6.70E+09
Heptadecane	17.345	5.45E+08
Cetene-Dup1	18.406	3.05E+08
bis(Butenyl) adipate	18.817	5.77E+08
1-Nonadecene	19.497	4.17E+08
Eicosane	19.568	3.50E+08
1,2-Benzenedicarboxylic acid, bis(1-methylethyl) ester	20.264	2.17E+09
Heneicosane	21.588	2.42E+08
Butenyl Butanediol Adipate	21.863	5.20E+08
Terephthalic acid, di(but-3-enyl) ester	21.929	8.96E+08
1-Tetracosene	23.38	1.80E+08
1-Docosene	24.247	3.99E+08
Hentriacontane	25.919	1.73E+08
1-Hexacosene	26.657	4.44E+08

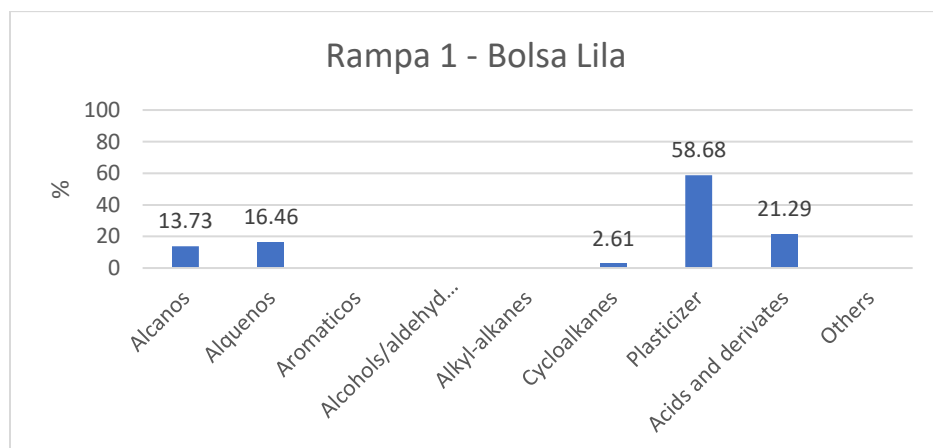


Figura 20. Grafica de grupos funcionales Muestra Lila-R1.

Porcentajes de los compuestos detectados y clasificados en sus grupos funcionales, en la espectrometría de masas de la muestra de bolsa lila en condiciones de la rampa 1.

5.2.2. Rampa 2.

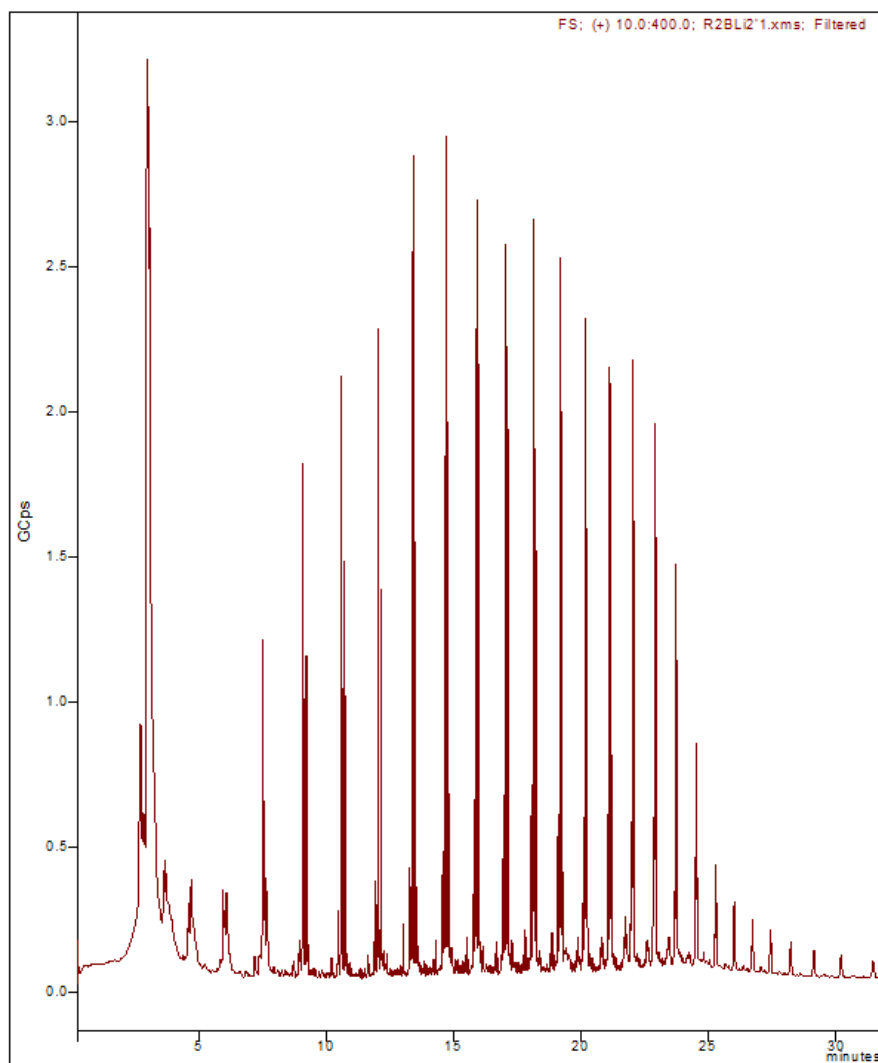


Figura 21. Espectro Muestra Lila-R2

Espectrometría de masa de la muestra de bolsa de color lila en condiciones de la rampa 2 al pirolizar.

Tabla 10. Compuestos orgánicos detectados en la espectrometría de masa de la muestra de bolsa de color lila en la rampa 2.

Nombre del compuesto	Tiempo de retencion	Area
2-Butene, (E)-	2.696	1.05E+09
Tetrazolo[1,5-b]1,2,4-triazine, 5,6,7,8-tetrahydro-6,7-dimethyl-	3.053	8.80E+09
1-Heptene	3.605	4.50E+08
Hexane, 3-methyl-	3.671	6.16E+08
1-Octene	4.577	5.29E+08
Octane	4.684	1.32E+09
1-Nonene	5.94	6.07E+08
Nonane	6.069	1.61E+09
1-Decene	7.496	3.50E+09
Decane	7.628	1.20E+09
Cyclopropane, 1-heptyl-2-methyl-	9.074	3.87E+09
1,11-Dodecadiene	10.451	5.44E+08
1-Dodecene	10.59	3.43E+09
Tridecane	10.71	2.17E+09
3-Tetradecene, (Z)-	12.028	3.54E+09
Pentadecane	12.139	1.92E+09
1,13-Tetradecadiene	13.267	6.27E+08
1-Tetradecene	13.396	5.28E+09
1,12-Tridecadiene	14.561	6.49E+08
5-Octadecene, (E)-	15.893	5.32E+09
Nonadecane	15.976	2.91E+09
1,14-Tetradecanediol	16.942	9.43E+08
Eicosane	17.117	2.85E+09
E-14-Hexadecenal	18.138	5.03E+09
3-Eicosene, (E)-	19.176	4.51E+09
Tetracosane	19.239	2.95E+09
1,19-Eicosadiene	20.085	8.22E+08
1-Docosene	22.017	3.87E+09
Octacosane	22.925	2.20E+09
Hexacosane	23.747	1.37E+09
Hentriacontane	24.533	4.61E+08

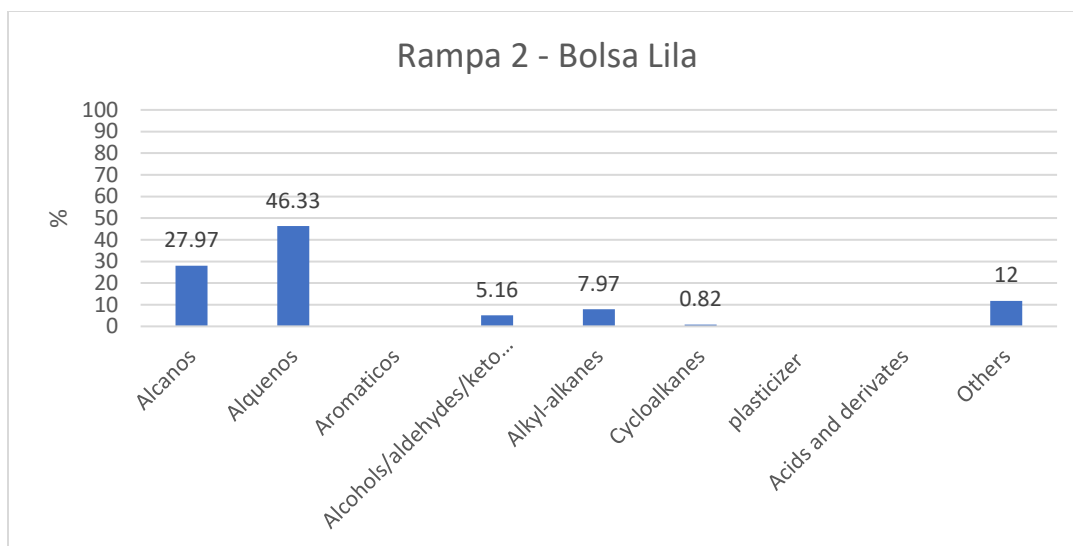


Figura 22. Grafica de grupos funcionales Muestra Lila-R2.

Porcentajes de los compuestos detectados y clasificados en sus grupos funcionales, en la espectrometría de masas de la muestra de bolsa lila en condiciones de la rampa 2.

5.2.3. Rampa 3.

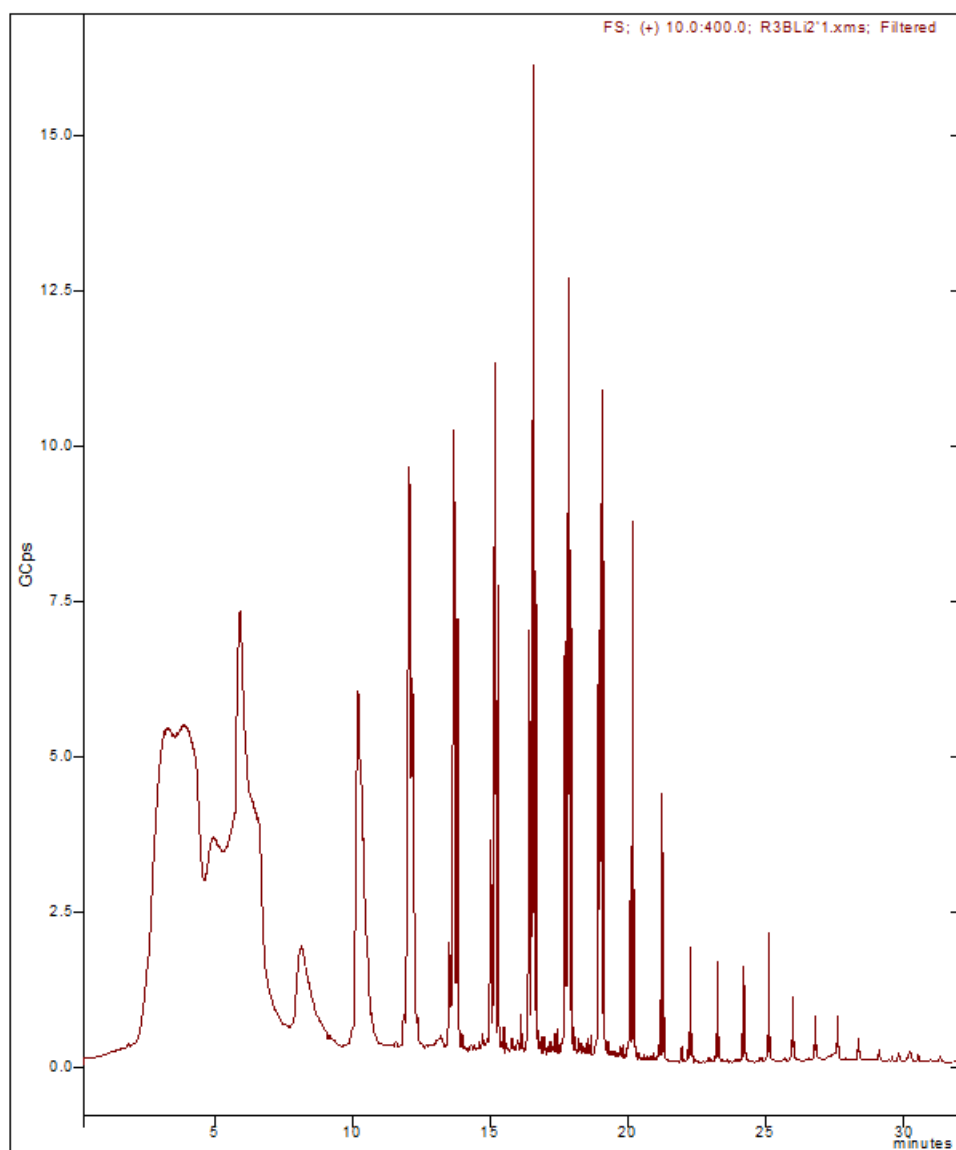


Figura 23. Espectro Muestra Lila-R3

Espectrometría de masa de la muestra de bolsa de color lila en condiciones de la rampa 3 al pirolizar.

Tabla 11. Compuestos orgánicos detectados en la espectrometría de masa de la muestra de bolsa de color lila en la rampa 3.

Nombre del compuesto	Tiempo de retención	Área
1-Decene	10.187	2.02E+10
Z-1,8-Dodecadiene	13.492	7.86E+09
1-Dodecene	13.664	3.61E+10
Tridecane	13.791	1.77E+10
1,12-Tridecadiene	14.996	1.28E+10
1-Tridecene	15.148	3.28E+10
Pentadecane	15.256	1.01E+10
2-Tridecene, (Z)-	15.298	1.10E+09
1-Tetradecene	16.499	1.61E+10
5-Octadecene, (E)-	16.664	1.04E+09
1-Tetradecene-Dup3	17.792	1.70E+10
1-Heptadecene	17.82	1.32E+10
7-Hexadecene, (Z)-	17.846	1.93E+10
Cetene	17.941	3.20E+08
1,14-Tetradecanediol	18.916	1.54E+10
Eicosane	19.105	1.32E+10
18-Nonadecen-1-ol	21.137	1.44E+09
E-14-Hexadecenal	21.224	6.19E+09
1-Nonadecene	22.253	2.46E+09
3-Eicosene, (E)-	23.242	2.08E+09
1-Docosene	25.095	2.15E+09

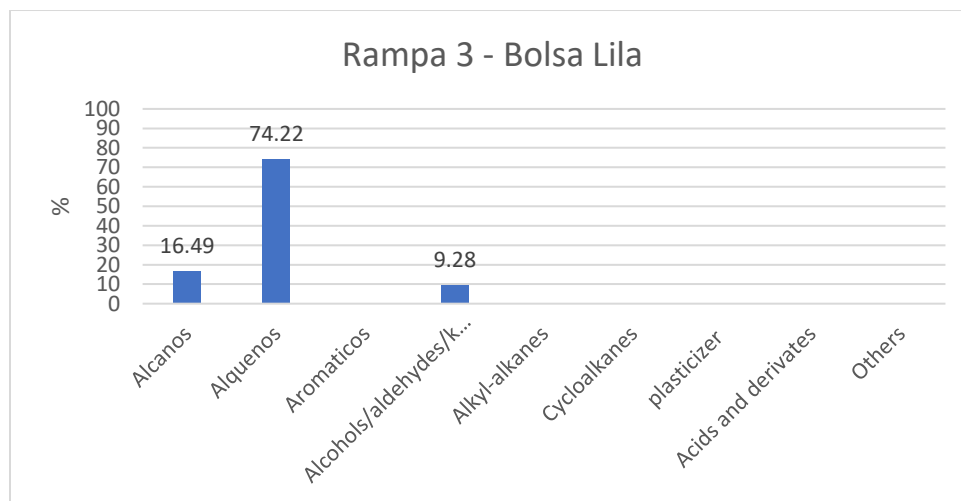


Figura 24. Gráfica de grupos funcionales Muestra Lila-R3.

Porcentajes de los compuestos detectados y clasificados en sus grupos funcionales, en la espectrometría de masas de la muestra de bolsa lila en condiciones de la rampa 3.

5.2.4. Rampa 4.

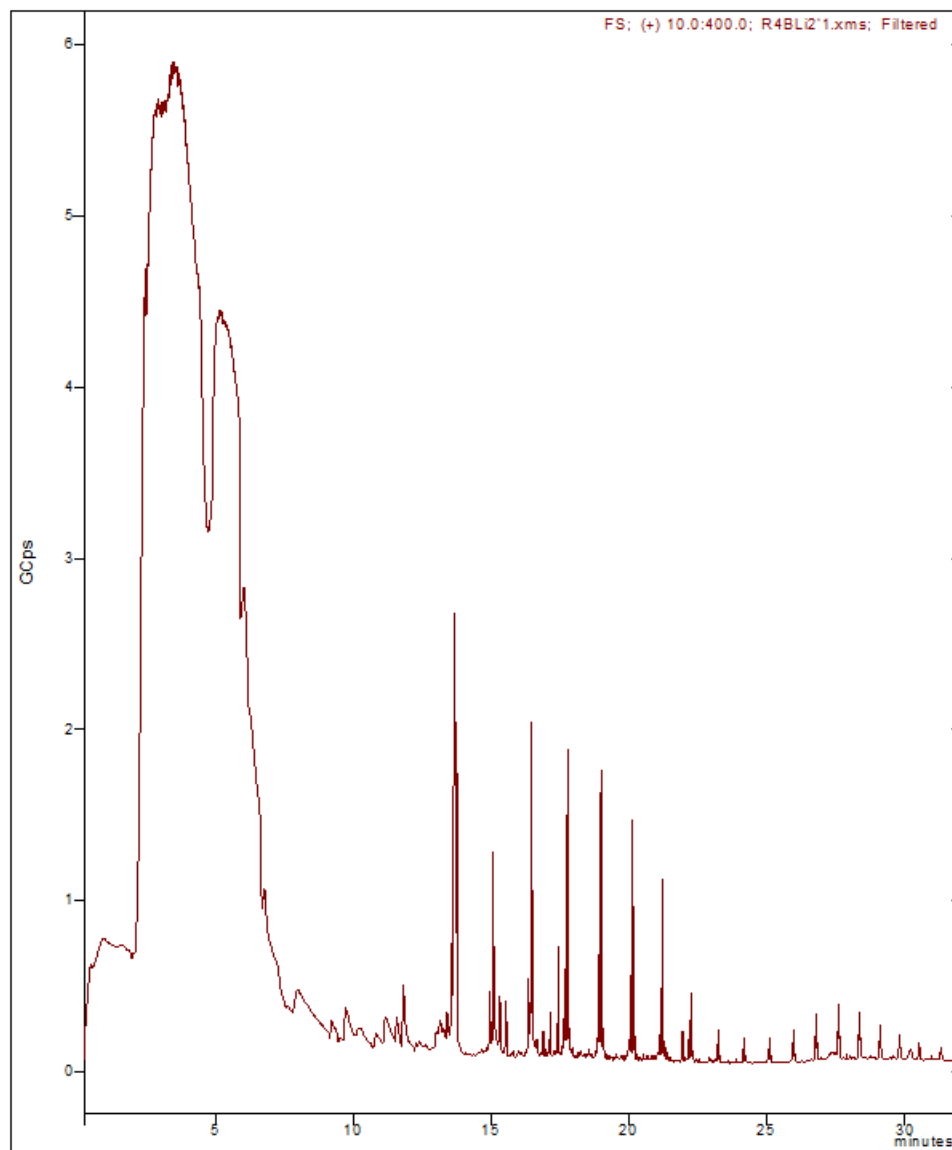


Figura 25. Espectro Muestra Lila-R4

Espectrometría de masa de la muestra de bolsa de color lila en condiciones de la rampa 4 al pirolizar.

Tabla 12. Compuestos orgánicos detectados en la espectrometría de masa de la muestra de bolsa de color lila en la rampa 4.

Nombre del Compuesto	Tiempo de retención	Área
2-Butene	2.439	1.54E+10
3-Methyl-1,2-diazirine	2.723	1.03E+10
Benzene	3.338	1.45E+08
Cyclopropane, 1-heptyl-2-methyl-	11.794	1.47E+09
1-Dodecene	13.545	1.37E+09
Azulene	13.652	7.37E+09
1,13-Tetradecadiene	14.933	8.55E+08
1-Tridecene	15.061	2.21E+09
Naphthalene, 2-methyl-	15.518	9.75E+08
1-Tetradecene	16.456	4.27E+09
Acenaphthylene	17.422	1.12E+09
1,12-Tridecadiene	17.649	7.94E+08
1-Heptadecene	17.755	2.77E+09
Cetene	18.971	3.05E+09
E,Z-2,13-Octadecadien-1-ol	20.034	7.53E+08
E-14-Hexadecenal	20.121	1.95E+09
11-Hexadecen-1-ol, (Z)-	21.132	6.85E+08
1,14-Tetradecanediol	22.173	3.76E+08
1-Nonadecene	22.242	7.87E+08
1-Tetracosene	25.947	3.05E+08
1-Hexacosene	27.585	4.19E+08

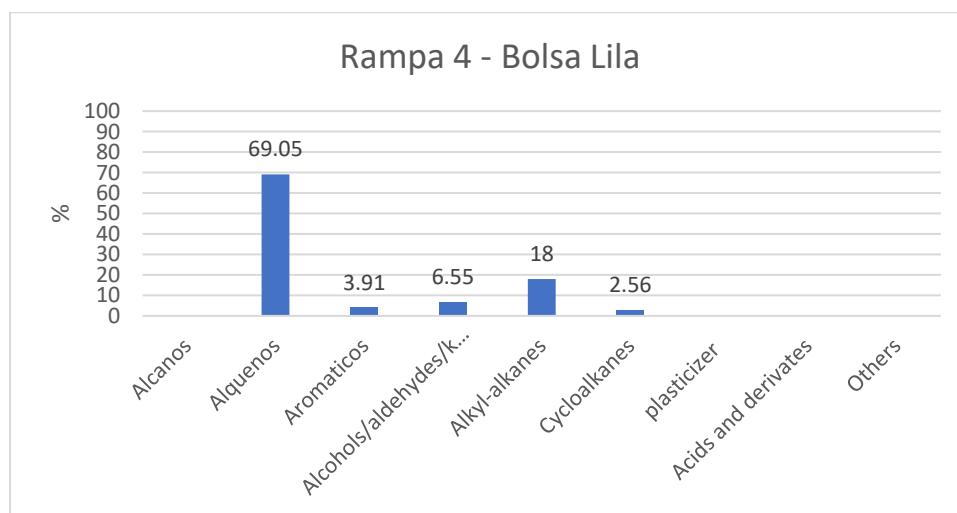


Figura 26. Grafica de grupos funcionales Muestra Lila-R4.

Porcentajes de los compuestos detectados y clasificados en sus grupos funcionales, en la espectrometría de masas de la muestra de bolsa lila en condiciones de la rampa 4.

5.3 Resultados de la cromatografía de la muestra de bolsa color amarilla.

5.3.1. Rampa 1.

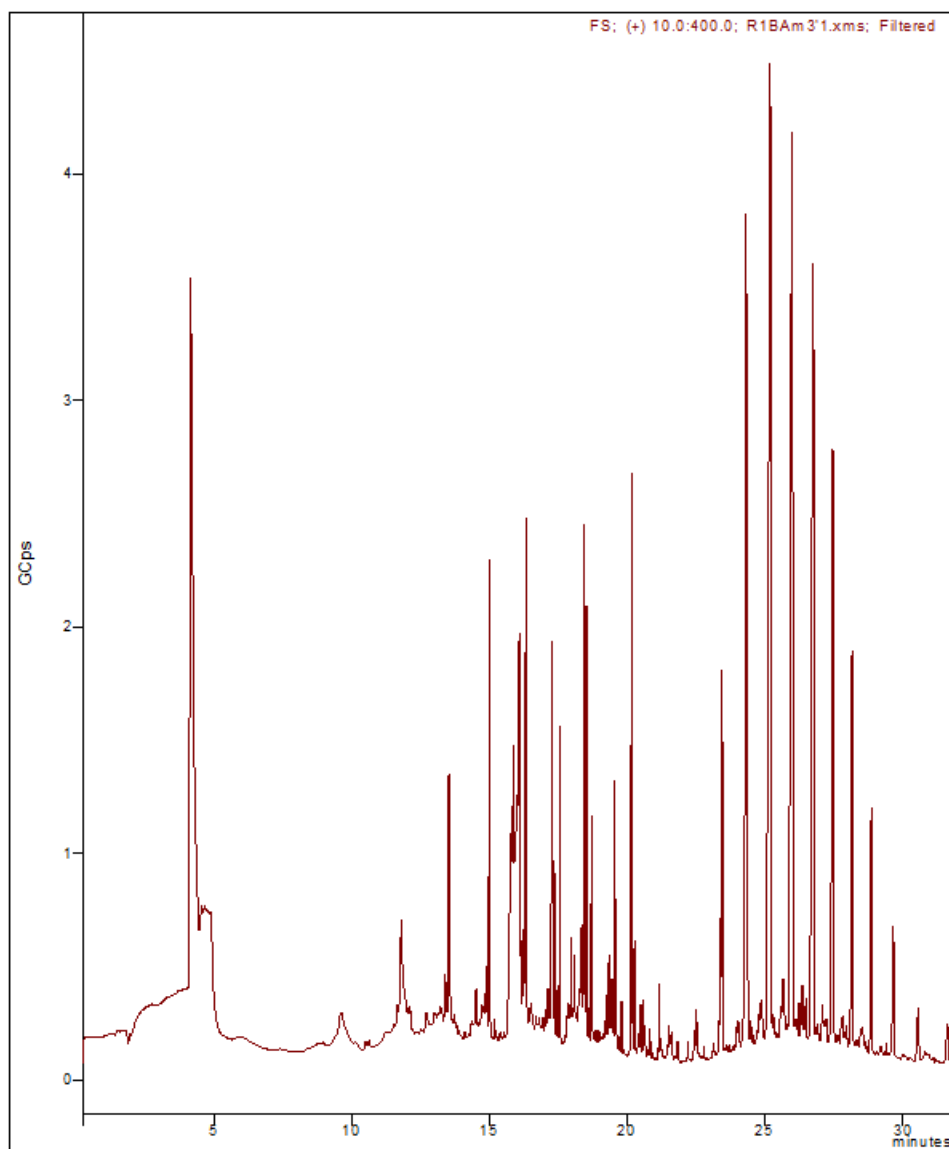


Figura 27. Espectro Muestra Amarilla- R1

Espectrometría de masa de la muestra de bolsa de color amarilla en condiciones de la rampa 1 al pirolizar.

Tabla 13. Compuestos orgánicos detectados en la espectrometría de masa de la muestra de bolsa de color amarilla en la rampa 1.

Nombre del compuesto	Tiempo de Retencion	Area
Undecanal	11.79	2.10E+09
2,4,6,8-Tetramethyl-1-undecene	13.38	8.08E+08
Dodecanal	14.98	3.87E+09
Diethyl Phthalate	15.75	1.67E+09
Hydroxylamine, O-decyl-	16.13	1.11E+08
9-Octadecenal	16.20	3.57E+08
Hexadecanal	16.31	3.67E+09
Pentadecane	17.35	1.76E+09
5-Octadecene, (E)-	17.95	5.89E+08
E-2-Octadecadecen-1-ol	18.33	5.88E+08
E-14-Hexadecenal	18.42	4.15E+09
Eicosane	18.50	2.79E+09
13-Methyltetradecanal	18.69	1.66E+09
11-Tricosene	19.32	6.02E+08
3-Eicosene, (E)-	19.51	1.69E+09
1,2-Benzenedicarboxylic acid, bis(2-methylpropyl) ester	20.17	8.38E+09
1-Docosene	23.40	2.71E+09
Tetracosane	23.45	2.02E+09
Octacosane	24.35	5.68E+09
17-Pentatriacontene	25.95	1.51E+10
Hentriacontane	26.75	4.40E+09
Hexacosane	28.17	2.03E+09

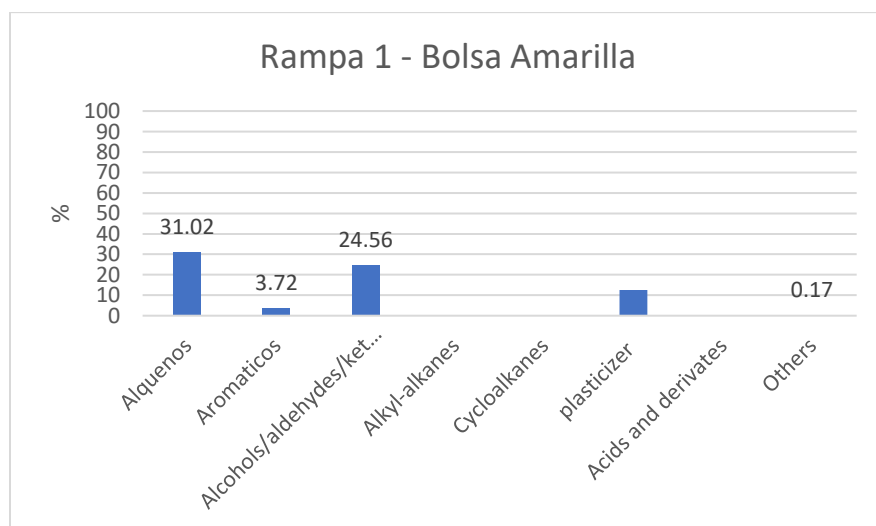


Figura 28. Grafica de grupos funcionales Muestra Amarilla-R1

Porcentajes de los compuestos detectados y clasificados en sus grupos funcionales, en la espectrometría de masas de la muestra de bolsa amarilla en condiciones de la rampa 1.

5.3.2. Rampa 2.

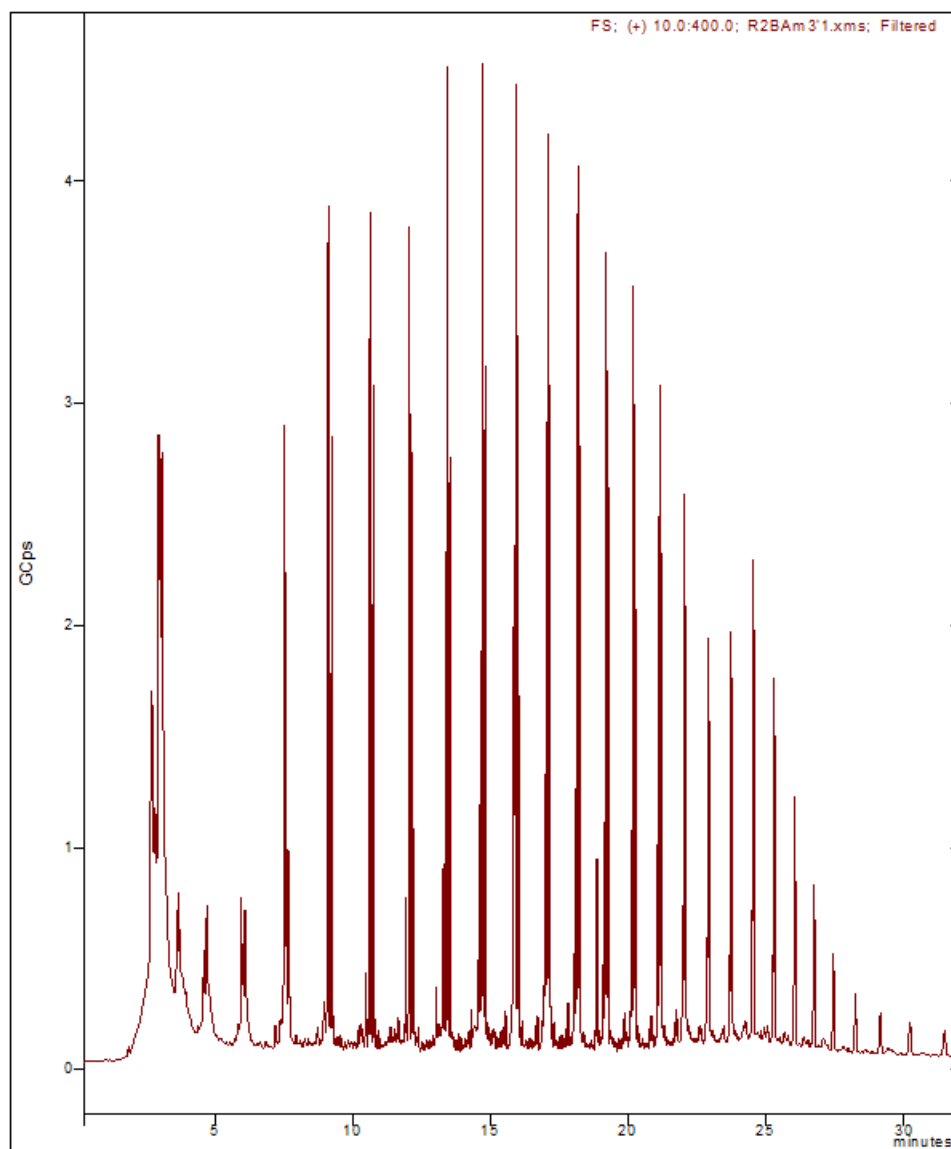


Figura 29. Espectro Muestra Amarilla-R2

Espectrometría de masa de la muestra de bolsa de color amarilla en condiciones de la rampa 2 al pirolizar.

Tabla 14. Compuestos orgánicos detectados en la espectrometría de masa de la muestra de bolsa de color amarilla en la rampa 2.

Nombre del compuesto	Tiempo de retencion	Area
2-Butene, (E)-	2.69	4.61E+09
Vanadium, pentacarbonyl(.eta.3-2-propenyl)-	2.92	1.27E+10
2H-Pyran-2-one, tetrahydro-3,6-dimethyl-	3.06	1.07E+10
1-Heptene	3.60	1.06E+09
Hexane, 3-methyl-	3.67	1.80E+09
1-Octene	4.58	8.80E+08
1-Nonene	5.94	7.09E+08
Heptane, 2,4-dimethyl-	6.07	9.44E+08
1-Decene	7.51	8.21E+09
Decane	7.64	2.15E+09
Cyclopropane, 1-heptyl-2-methyl-	9.09	9.32E+09
Dodecane	9.22	5.53E+09
1-Dodecene	10.61	7.78E+09
Tridecane	10.73	5.01E+09
1,13-Tetradecadiene	11.91	1.16E+09
1-Tridecene	12.05	7.76E+09
Pentadecane	12.16	4.24E+09
1,12-Tridecadiene	13.28	1.26E+09
1-Tetradecene	13.41	1.00E+10
1-Heptadecene	14.70	1.04E+10
Heptadecane	14.79	5.26E+09
1,14-Tetradecanediol	15.80	3.42E+09
5-Octadecene, (E)-	15.91	1.27E+10
Nonadecane	15.99	5.52E+09
Eicosane	17.14	5.15E+09
1,19-Eicosadiene	18.06	1.91E+09
5-Eicosene, (E)-	18.16	9.05E+09
1,2-Benzenedicarboxylic acid, bis(2-methylpropyl) ester	18.85	1.24E+09
3-Eicosene, (E)-	19.19	7.85E+09
Heneicosane	19.25	4.55E+09
Tetracosane	20.24	4.27E+09
1-Docosene	21.13	6.34E+09
Octacosane	22.07	3.11E+09
Hexacosane	22.93	1.91E+09
Hentriacontane	24.56	2.71E+09
17-Pentatriacontene	26.02	1.48E+09
1-Hexacosene	26.73	1.13E+09

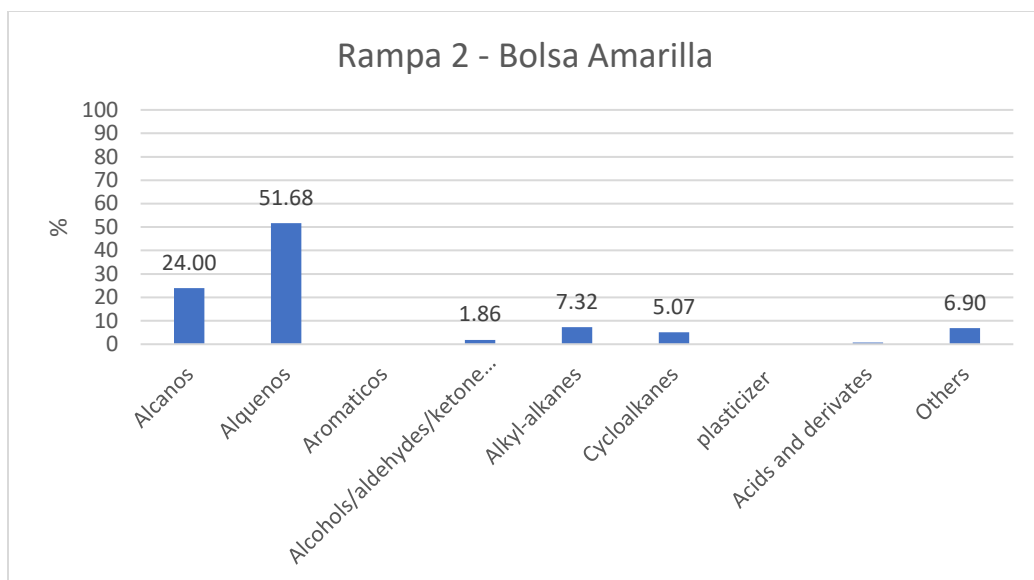


Figura 30. Grafica de grupos funcionales Muestra Amarilla-R2

Porcentajes de los compuestos detectados y clasificados en sus grupos funcionales, en la espectrometría de masas de la muestra de bolsa amarilla en condiciones de la rampa 2.

5.3.3. Rampa 3.

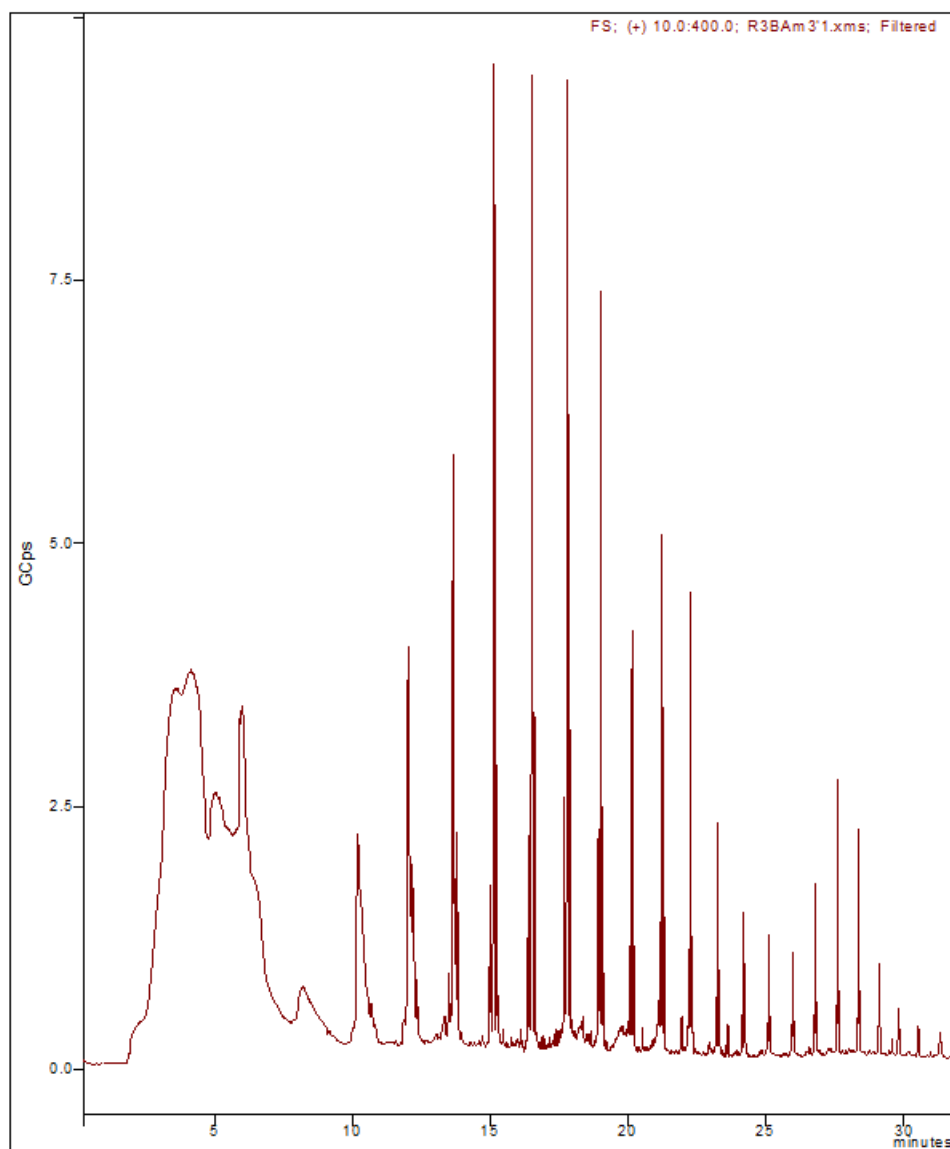


Figura 31. Espectro Muestra Amarilla- R3

Espectrometría de masa de la muestra de bolsa de color amarilla en condiciones de la rampa 3 al pirolizar.

Tabla 15. Compuestos orgánicos detectados en la espectrometría de masa de la muestra de bolsa de color amarilla en la rampa 3.

Nombre del compuesto	Tiempo de retención	Área
1-Decene	10.179	7.39E+09
Cyclopropane, 1-heptyl-2-methyl-	12.004	1.86E+10
1-Dodecene	13.638	1.32E+10
Pentadecane	13.747	2.41E+09
Nonane	13.813	1.24E+09
1,13-Tetradecadiene	14.976	3.42E+09
1-Tridecene	15.12	2.42E+10
1,12-Tridecadiene	16.368	4.16E+09
1-Tetradecene	16.496	2.49E+10
Heptadecane	17.868	4.08E+09
Cetene	18.996	1.69E+10
Eicosane	19.068	3.37E+09
18-Nonadecen-1-ol	20.036	1.33E+09
E-14-Hexadecenal	20.13	6.39E+09
3-Eicosene, (E)-	21.223	7.17E+09
1,19-Eicosadiene	22.181	1.36E+09
1-Nonadecene	23.246	3.27E+09
Tetracosane	23.299	1.19E+09
1-Docosene	24.185	1.68E+09
1-Hexacosene	26.793	2.44E+09

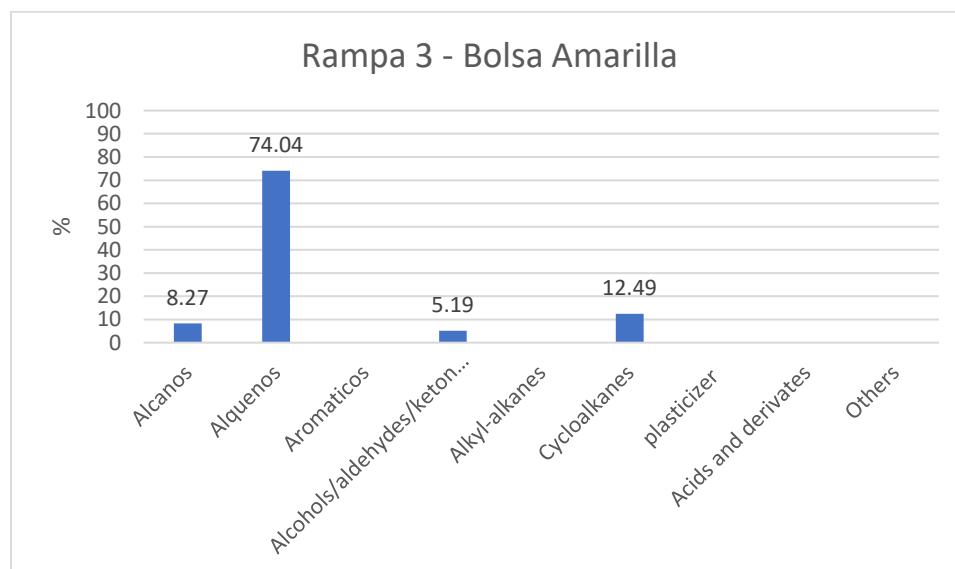


Figura 32. Grafica de grupos funcionales Muestra Amarilla-R3

Porcentajes de los compuestos detectados y clasificados en sus grupos funcionales, en la espectrometría de masas de la muestra de bolsa amarilla en condiciones de la rampa 3.

5.3.4. Rampa 4.

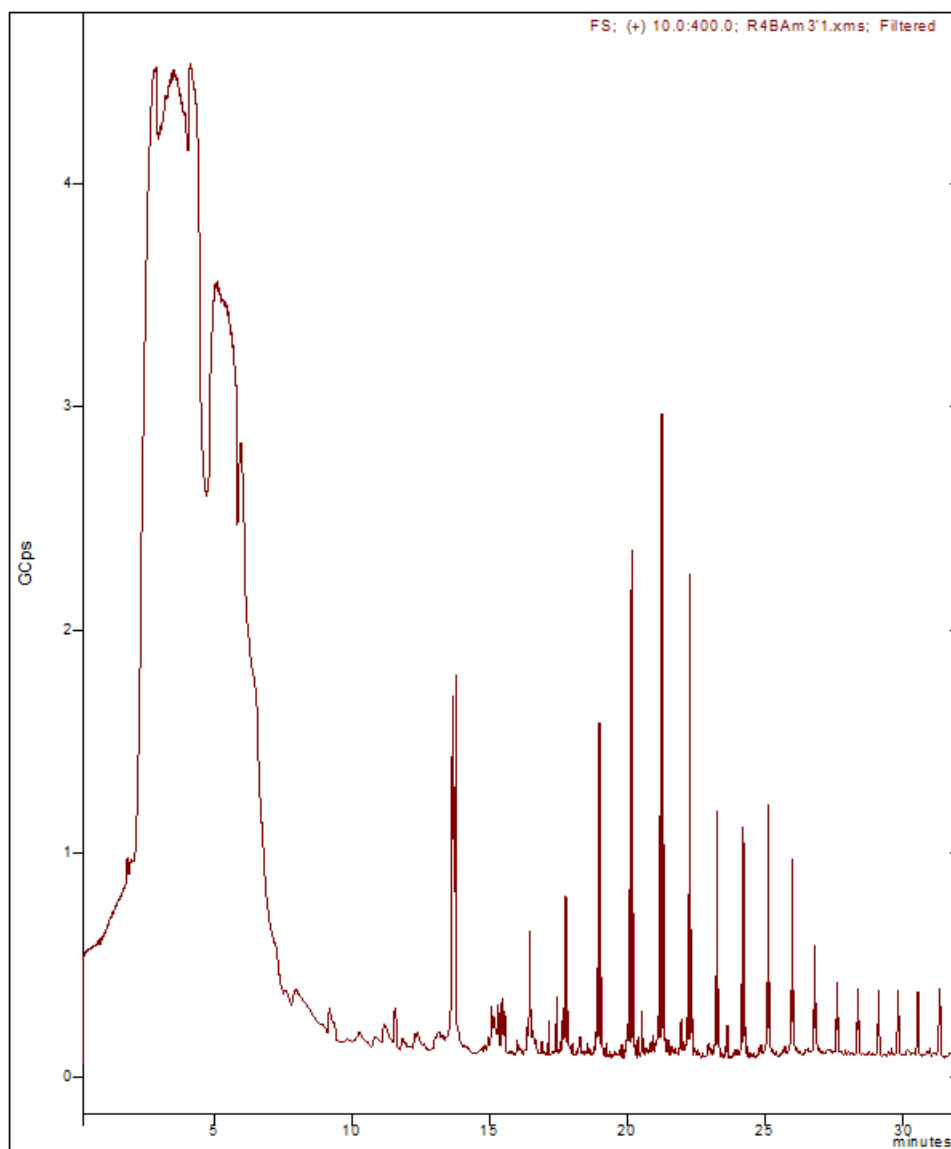


Figura 33. Espectro Muestra Amarilla-R4

Espectrometría de masa de la muestra de bolsa de color amarilla en condiciones de la rampa 4 al pirolizar.

Tabla 16. Compuestos orgánicos detectados en la espectrometría de masa de la muestra de bolsa de color amarilla en la rampa 4.

Nombre del compuesto	Tiempo de retencion	Area
1H-Indene, 1-methylene-	13.64	6.75E+09
Naphthalene	13.75	4.15E+09
11-Tricosene	15.05	3.79E+08
Naphthalene, 2-methyl-	15.29	3.89E+08
Naphthalene, 1-methyl-	15.32	1.83E+08
Phthalic anhydride	15.43	9.00E+08
1,12-Tridecadiene	16.33	1.88E+08
Biphenyl	16.44	1.44E+09
Acenaphthylene	17.42	5.50E+08
Cetene	17.74	1.28E+09
Eicosane	19.05	6.74E+08
E,Z-2,13-Octadecadien-1-ol	20.04	1.07E+09
5-Octadecene, (E)-	20.13	3.71E+09
3-Butenyl adipate	20.52	3.28E+08
1,14-Tetradecanediol	21.14	1.53E+09
1-Nonadecene	22.26	3.40E+09
1,19-Eicosadiene	23.17	5.81E+08
3-Eicosene, (E)-	23.24	1.60E+09
Heneicosane	23.30	5.40E+08
1-Docosene	24.19	1.46E+09
Tetracosane	24.24	4.81E+08
Hentriacontane	26.00	4.52E+08
1-Hexacosene	26.79	7.73E+08

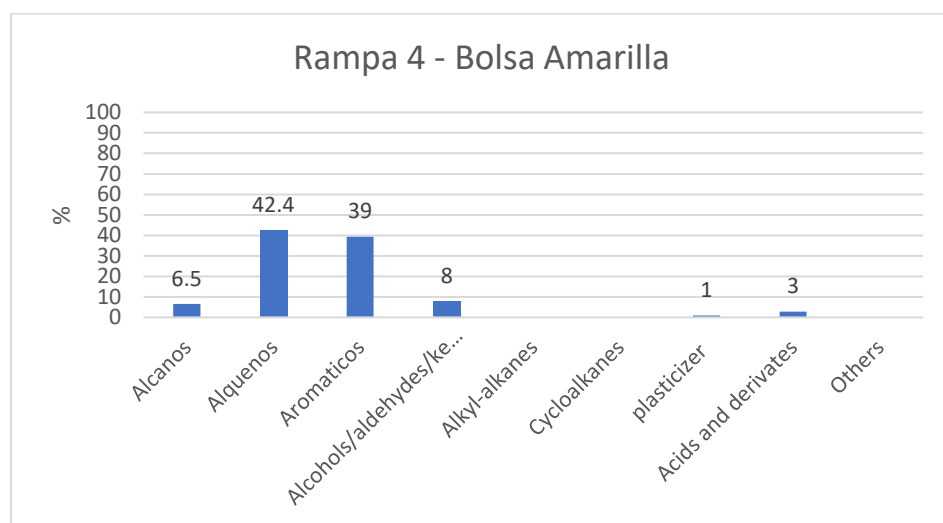


Figura 34. Grafica de grupos funcionales Muestra Amarilla-R4

Porcentajes de los compuestos detectados y clasificados en sus grupos funcionales, en la espectrometría de masas de la muestra de bolsa amarilla en condiciones de la rampa 4.

5.4. Resultados de la cromatografía de la muestra de bolsa transparente.

5.4.1. Rampa 1.

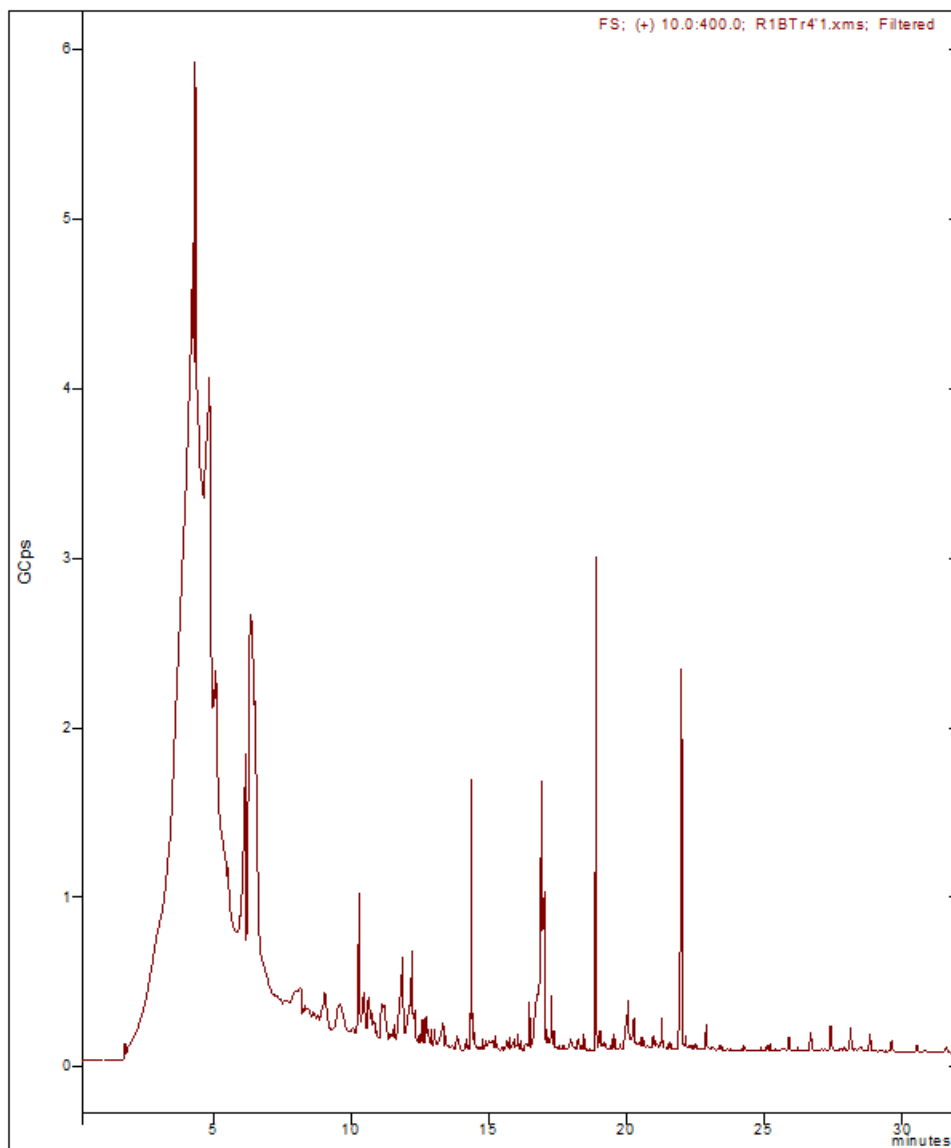


Figura 35. Espectro Muestra Transparente-R1

Espectrometría de masa de la muestra de bolsa transparente en condiciones de la rampa 1 al pirolizar.

Tabla 17. Compuestos orgánicos detectados en la espectrometría de masa de la muestra de bolsa transparente en la rampa 1.

Nombre del compuesto	Tiempo de retención	Área
l-Guanidinosuccinimide	4.254	3.57E+10
Carbohydrazide	4.318	1.15E+09
Pyrimidine-2,4(1H,3H)-dione, 5-amino-6-nitroso-	4.421	5.76E+08
Tetrahydrofuran	4.737	3.71E+09
Di(1,2,5-oxadiazolo)[3,4-b:3',4'-E]pyrazine, 4,8-diacetyl-	4.974	2.08E+08
1,3-Butadiene	5.058	3.21E+07
Cyclopentanone	6.041	2.37E+09
2,4-Imidazolidinedione, 1-methyl-	9.027	6.25E+08
Pentanoic acid, 3-butenyl ester	10.27	2.16E+09
2-Nonen-1-ol	10.611	1.06E+09
Nonanal	10.718	6.16E+08
Cyclohexane, 1-bromo-4-methyl-	11.542	1.08E+08
Benzoic acid, 3,5-difluorophenyl ester	14.357	2.90E+09
Pentanoic acid, propyl ester	14.408	3.38E+08
Succinic acid, di(but-3-en-1-yl) ester	16.456	4.72E+08
Butanimidamide, N-(1-chloro-2-methyl-1-butenyl)-2-methyl-	16.891	1.97E+09
Diethyl Phthalate	17.26	5.42E+08
bis(Butenyl) Adipate	18.888	7.48E+09
Butenyl Butanediol Adipate	21.884	3.12E+08
4-(Trifluoroacetyl)benzoic acid	21.96	3.91E+09
Terephthalic acid, di(but-3-enyl) ester	21.978	2.97E+09
Sebacic acid, di(but-3-enyl) ester	22.867	3.25E+08

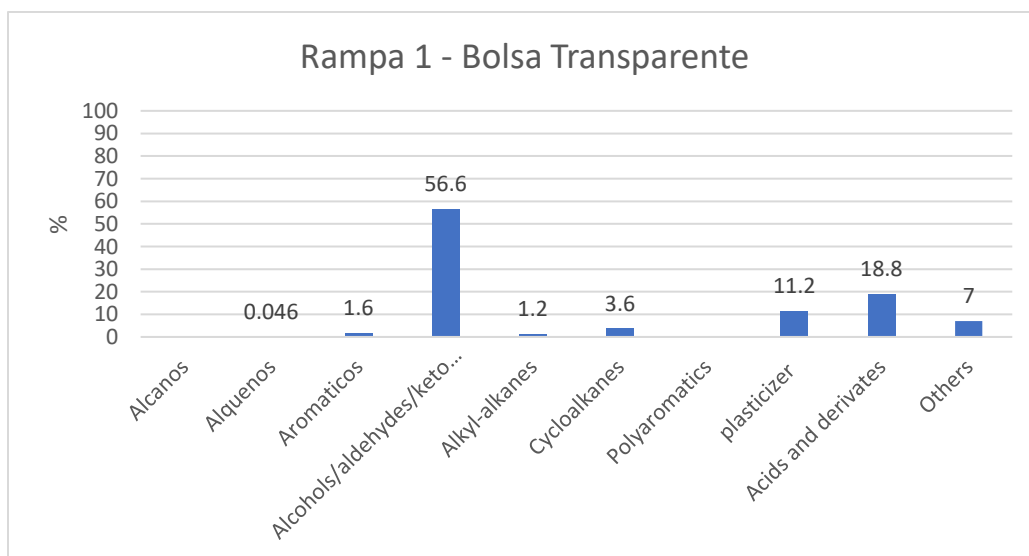


Figura 36. Grafica de grupos funcionales Muestra Transparente-R1

Porcentajes de los compuestos detectados y clasificados en sus grupos funcionales, en la espectrometría de masas de la muestra transparente en condiciones de la rampa 1.

5.4.2. Rampa 2.

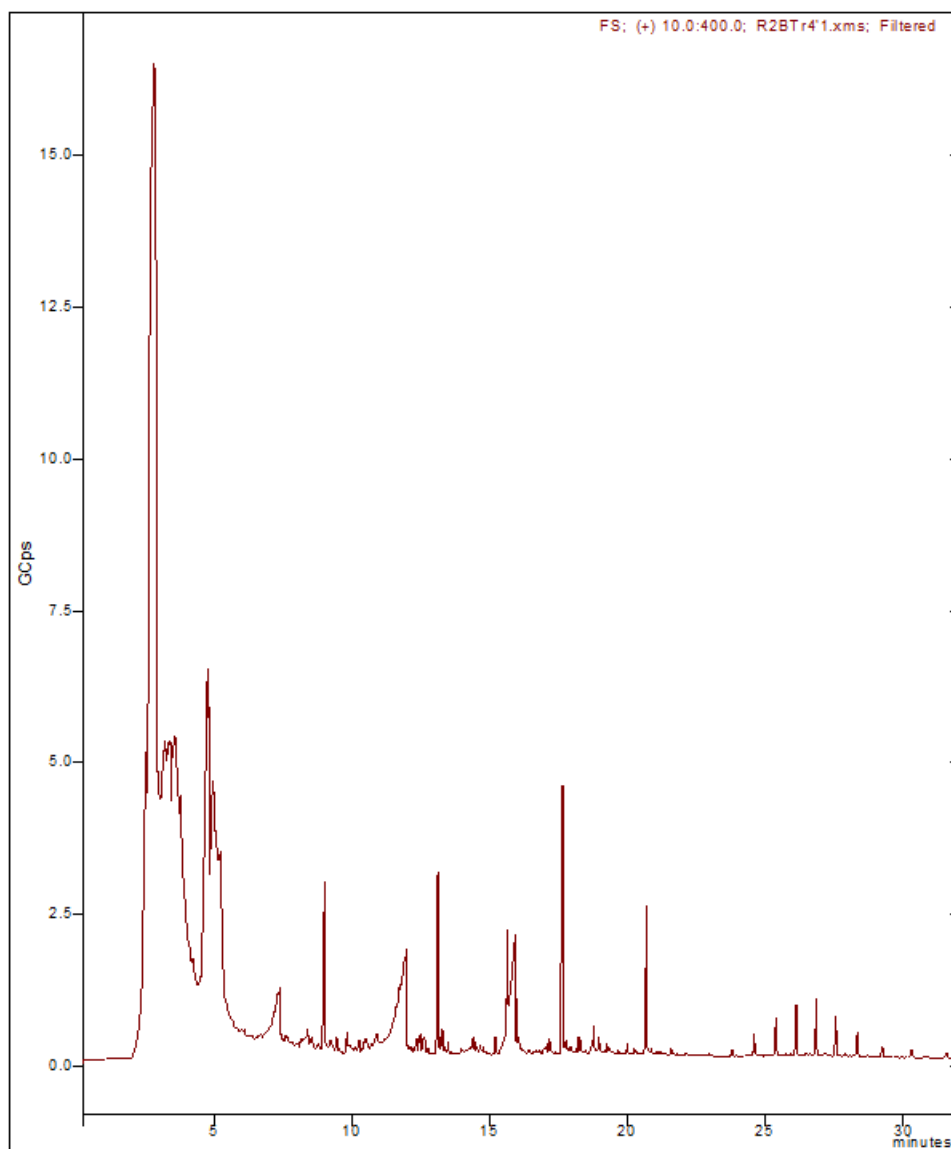


Figura 37. Espectro Muestra Transparente-R2

Espectrometría de masa de la muestra de bolsa transparente en condiciones de la rampa 2 al pirolizar.

Tabla 18. Compuestos orgánicos detectados en la espectrometría de masa de la muestra de bolsa transparente en la rampa 2.

Nombre del compuesto	Tiempo de retención	Área
Hydrogen cyanide	2.511	1.90E+10
Methylenecyclopropane	2.808	1.73E+11
Methylenecyclopropane-Dup1	2.857	3.50E+10
Tetrahydrofuran	3.189	4.88E+09
1,3-Butadiene	3.454	1.07E+09
Acetic acid, [(aminocarbonyl)amino]oxo-	3.561	2.89E+10
Acetamide, N,N'-ethylenebis(N-nitro-	4.48	2.81E+08
Cyclopentanone	4.739	3.88E+10
Pentanoic acid	7.371	5.56E+09
4-Pentenoic acid	7.45	6.54E+07
Succinic anhydride	8.374	4.94E+08
Pentanoic acid, 3-butenyl ester	8.995	1.03E+10
BENZOIC ACID	11.714	1.96E+08
Ethanone, 2-(formyloxy)-1-phenyl-	13.105	1.02E+10
Octanethioic acid, S-methyl ester	13.205	4.50E+08
Pentanoic acid, propyl ester	13.268	7.88E+08
Orthoformic acid, tri-2-butenyl ester	14.479	2.19E+08
Succinic acid, di(but-3-en-1-yl) ester	15.19	6.67E+08
Butanimidamide, N-(1-chloro-2-methyl-1-butenyl)-2-methyl-	15.632	3.11E+09
3-Butenyl adipate	15.907	7.59E+09
Diethyl Phthalate	15.961	1.70E+09
5-Octadecene, (E)-	17.115	3.69E+08
bis(Butenyl) adipate	17.627	1.46E+10
2-Amino-4-(2-cyclohexyl-ethyl)-7-methyl-5-oxo-4H,5H-pyrano[4,3-b]pyran-3-carbonitrile	20.666	4.43E+09
Terephthalic acid, di(but-3-enyl) ester	20.687	3.34E+09
1-Docosene	24.586	4.26E+08
Hexacosane	24.62	2.38E+08
1-Hexacosene	25.361	7.34E+08
Hentriacontane	25.394	5.73E+08
17-Pentatriacontene	26.824	1.30E+09
Tetratetracontane	27.553	6.29E+08
Tetratriacontyl heptafluorobutyrate	28.326	1.23E+09

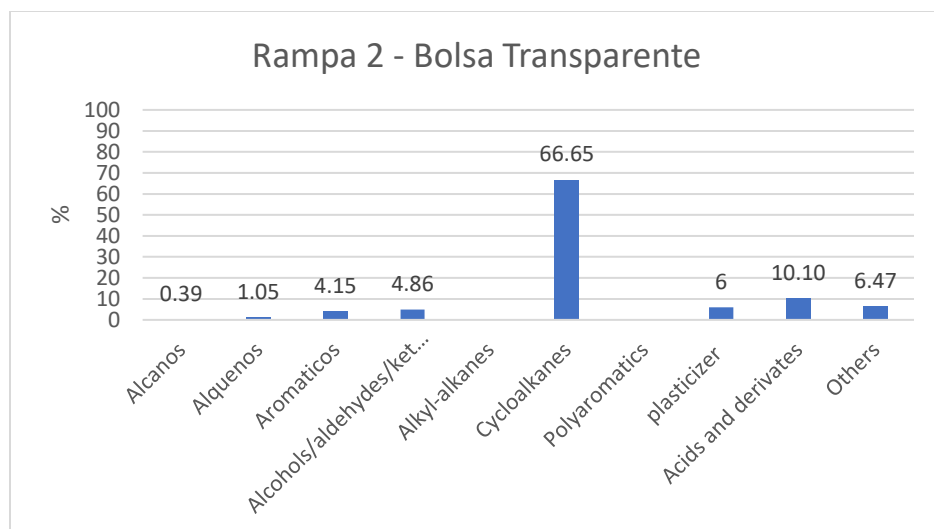


Figura 38. Grafica de grupos funcionales Muestra Transparente-R2
Porcentajes de los compuestos detectados y clasificados en sus grupos funcionales, en la espectrometría de masas de la muestra transparente en condiciones de la rampa 2.

5.4.3. Rampa 3

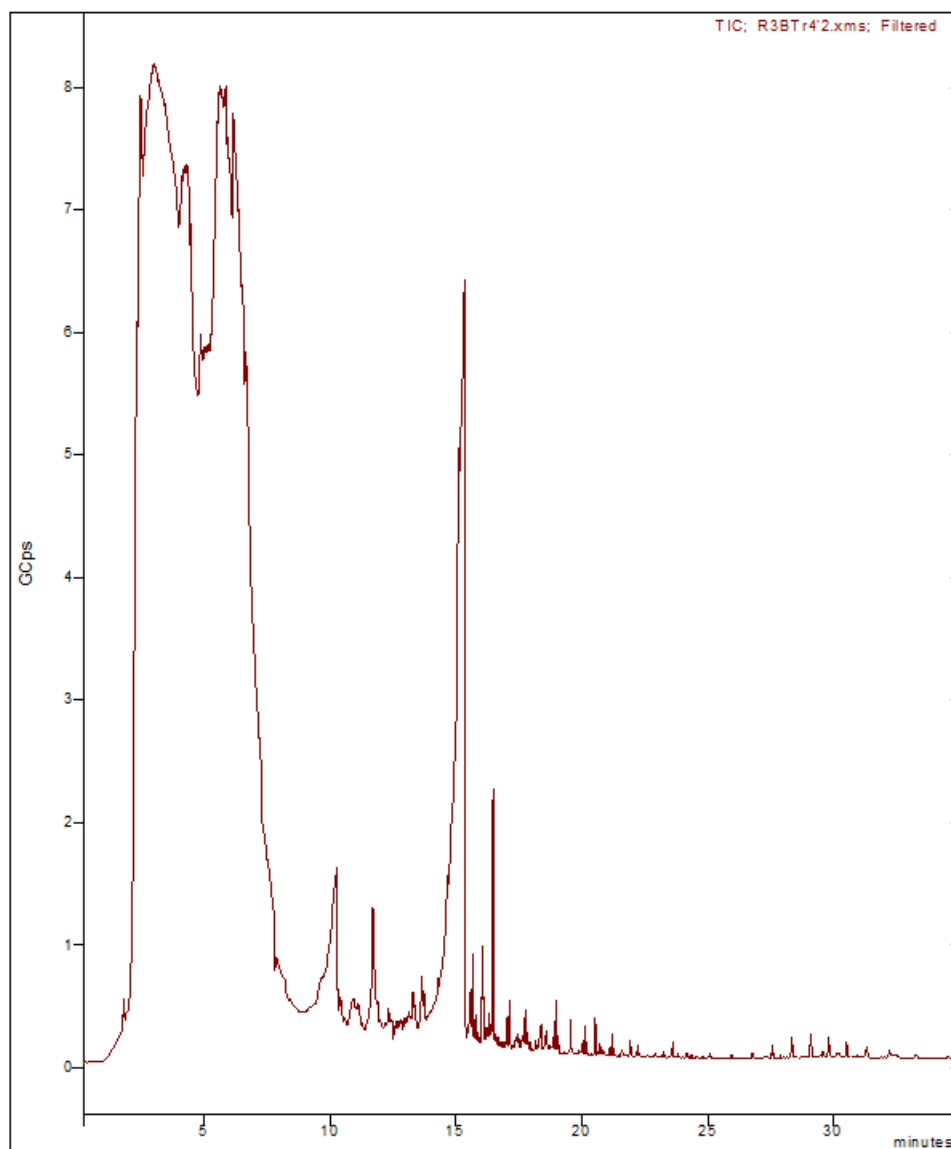


Figura 39. Espectro Muestra Transparente-R3

Espectrometría de masa de la muestra de bolsa transparente en condiciones de la rampa 3 al pirolizar.

Tabla 19. Compuestos orgánicos detectados en la espectrometría de masa de la muestra de bolsa transparente en la rampa 3.

Nombre del compuesto	Tiempo de retención	Area
Cyclobutene	2.713	2.82E+10
1,3-Butadiene	2.76	1.73E+08
Acetonitrile, hydroxy-	2.944	4.90E+07
1-Propene, 3-azido-	3.092	2.37E+07
Biphenyl	16.452	2.39E+09
Diphenylmethane	17.099	4.24E+08
5-Octadecene, (E)-	17.748	1.04E+09
Diethyl Phthalate	18.948	3.14E+09
Eicosane	20.178	3.40E+08
bis(Butenyl) adipate	20.523	5.43E+08
11-Hexadecen-1-ol, (Z)-	21.118	3.13E+08
5-Eicosene, (E)-	21.196	8.44E+08
Heneicosane	21.263	3.30E+08
1,2-Benzenedicarboxylic acid, bis(2-methylpropyl) ester	21.929	4.75E+08
1-Nonadecene	22.234	5.29E+08
Terephthalic acid, di(but-3-enyl) ester	23.604	2.75E+08
3-Eicosene, (E)-	24.168	3.80E+08
1-Docosene	25.075	3.89E+08
1-Hexacosene	25.943	4.38E+08
Hentriacontane	26.816	1.75E+08
1,19-Eicosadiene	27.54	2.42E+08
1-Tricosene	27.581	6.12E+08
Tetratetracontane	27.616	2.64E+08
1-Hexyl-2-nitrocyclohexane	28.314	2.69E+08

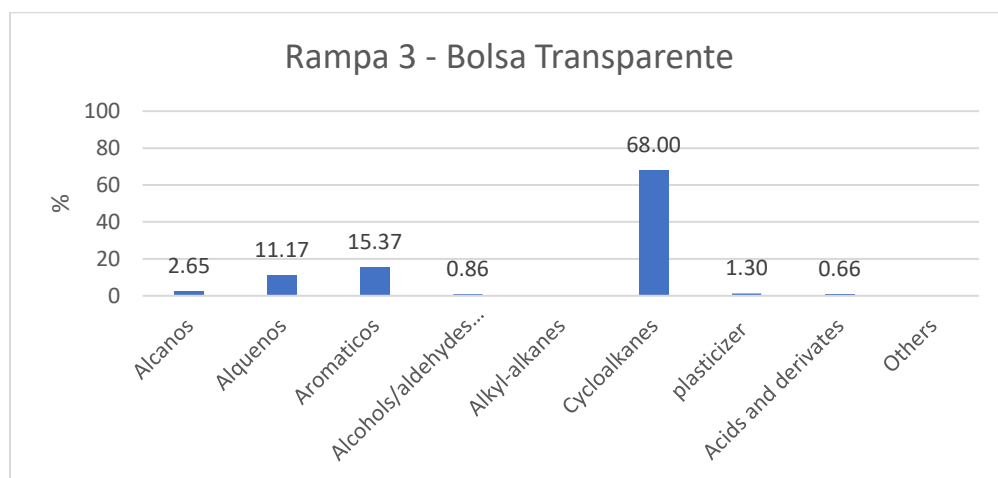


Figura 40. Grafica de grupos funcionales Muestra Transparente-R3

Porcentajes de los compuestos detectados y clasificados en sus grupos funcionales, en la espectrometría de masas de la muestra transparente en condiciones de la rampa 3.

5.4.4. Rampa 4.

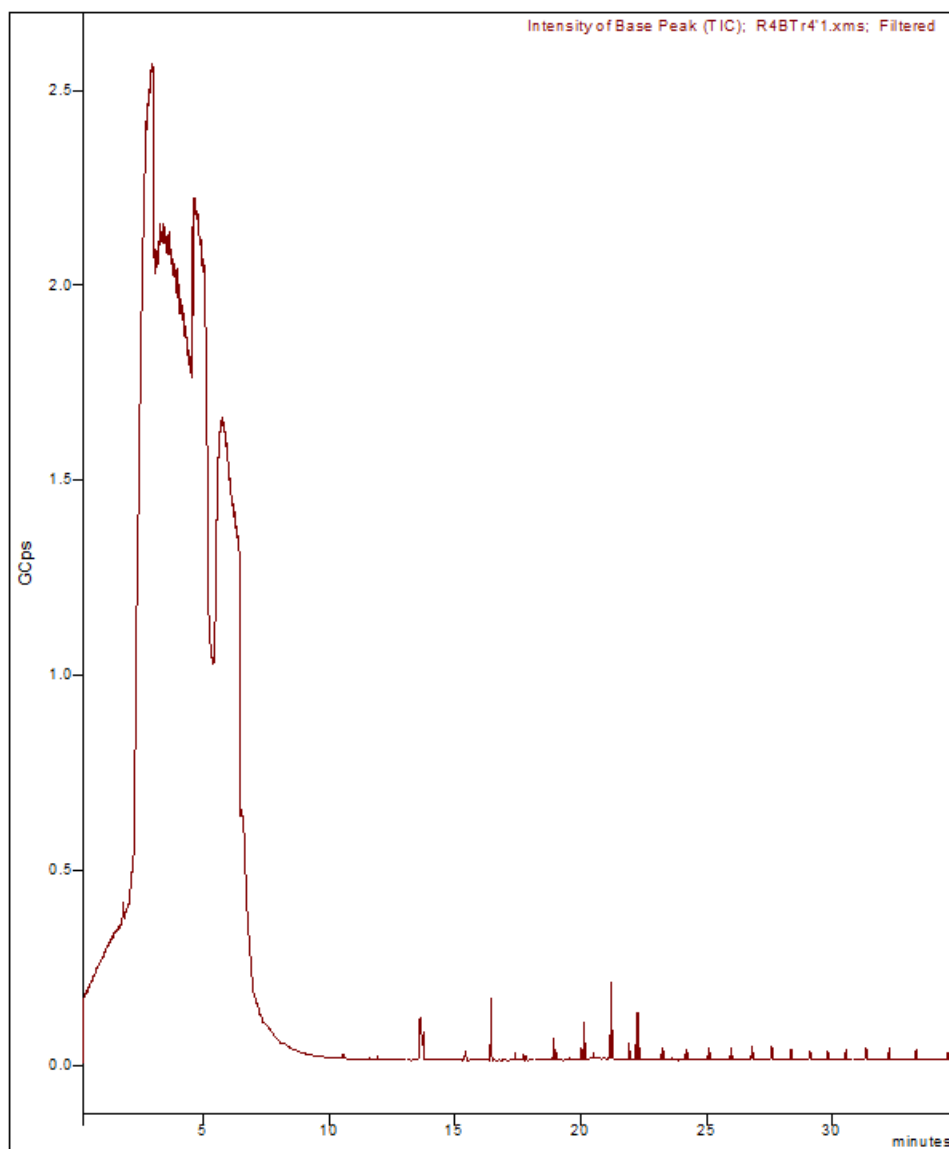


Figura 41. Espectro Muestra Transparente-R4

Espectrometría de masa de la muestra de bolsa transparente en condiciones de la rampa 4 al pirolizar.

Tabla 20. Compuestos orgánicos detectados en la espectrometría de masa de la muestra de bolsa transparente en la rampa 4.

Nombre del compuesto	Tiempo de retención	Área
1,2-Propanediamine	2.634	5.57E+10
Hydroxyurea	3.073	5.23E+09
2,3-Hexanedione	3.108	4.13E+09
Benzene	3.163	8.94E+09
L-Alanine ethylamide, (S)-	4.575	2.92E+09
Bromoacetone	5.266	3.62E+08
4-(2-Acetoxyphenyl)-1-ethyl-3-methyl-5-(4-nitrophenyl)pyrazole	5.295	1.38E+08
Biphenyl	16.441	1.07E+09
5-Octadecene, (E)-	17.739	4.94E+08
Nonadecane	17.835	1.40E+08
1,12-Tridecadiene	18.869	2.59E+08
Cetene	18.955	9.31E+08
Eicosane	19.041	3.21E+08
11-Hexadecen-1-ol, (Z)-	20.03	4.81E+08
3-Butenyl adipate	20.515	1.81E+08
1,14-Tetradecanediol	21.136	9.25E+08
E-14-Hexadecenal	21.221	3.21E+09
Di-n-octylphthalate	21.929	2.24E+08
18-Nonadecen-1-ol	22.18	6.44E+08
1-Nonadecene	22.255	1.91E+09
Heneicosane	22.311	5.64E+08
1,19-Eicosadiene	23.17	3.56E+08
Terephthalic acid, di(but-3-enyl) ester	23.607	1.36E+08
1-Docosene	24.181	6.47E+08
Octacosane	24.231	2.96E+08
Tetracosane	25.133	3.21E+08
Hentriacontane	25.995	3.72E+08
1-Hexyl-2-nitrocyclohexane	26.743	3.43E+08
1-Hexacosene	27.589	6.82E+08
Tetratetracontane	29.124	2.25E+08
Octacosyl trifluoroacetate	30.525	1.17E+09
17-Pentatriacontene	31.324	1.43E+09
Octatriacontyl pentafluoropropionate	32.244	1.57E+09

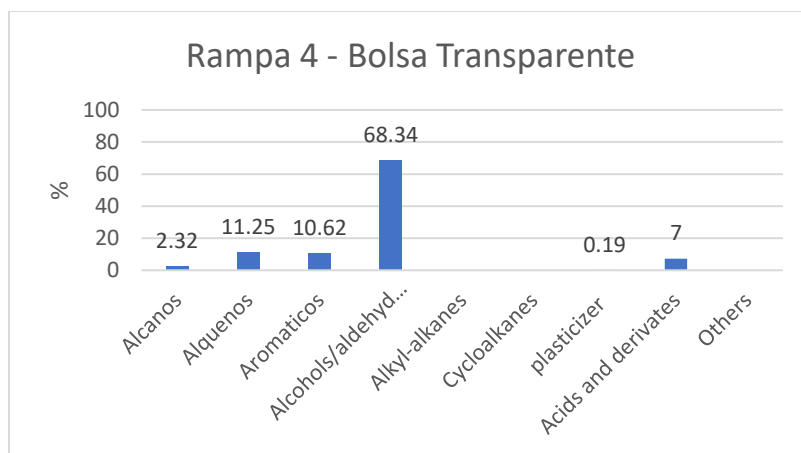


Figura 42. Grafica de grupos funcionales Muestra Transparente-R4
 Porcentajes de los compuestos detectados y clasificados en sus grupos funcionales, en la espectrometría de masas de la muestra transparente en condiciones de la rampa 4.

5.5. Resultados de la cromatografía de la muestra de mix de bolsas.

5.5.1. Rampa 1.

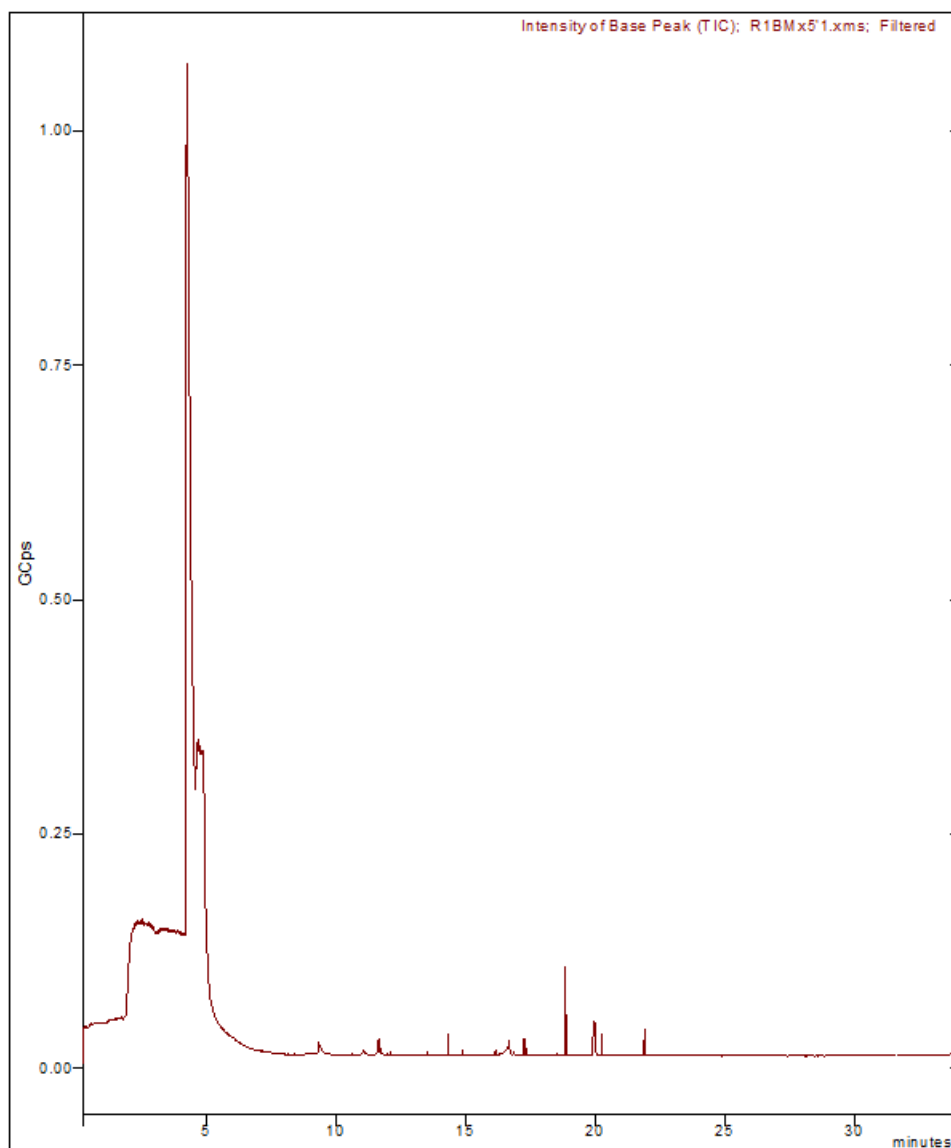


Figura 43. Espectro del Mix de muestras-R1

Espectrometría de masa de la muestra de mix de bolsas en condiciones de la rampa 1 al pirolizar.

Tabla 21. Compuestos orgánicos detectados en la espectrometría de masa de la muestra de mix de bolsas en la rampa 1.

Nombre del compuesto	Tiempo de Retencion	Area
2,4,6,8-Tetramethyl-1-undecene	8.856	1.40E+08
Octane	9.088	1.05E+08
Succinic anhydride	9.315	1.18E+08
1-Undecene	10.484	2.81E+08
Tridecane	10.612	2.51E+08
2,6-Dimethylphenyl isocyanate	11.714	1.21E+09
BENZOIC ACID	11.875	3.08E+08
1-Tetradecene	11.976	3.33E+08
1-Tridecene	13.402	1.70E+08
Pentadecane	13.515	1.72E+08
Pentanediamide, N,N'-di-benzoyloxy-	14.313	1.20E+08
Cetene	14.757	2.53E+08
7-Hexadecene, (Z)-	16.039	1.63E+08
Hexadecane	16.133	1.25E+08
1,6-Dioxacyclododecane-7,12-dione	16.848	1.97E+08
Diethyl Phthalate	17.249	2.66E+08
Heptadecane	17.338	1.48E+08
9-Eicosene, (E)-	18.402	1.41E+08
Eicosane	18.479	1.12E+08
bis(Butenyl) adipate	18.832	7.54E+08
1-Nonadecene	19.493	1.47E+08
Di-n-octylphthalate	20.231	7.99E+07
1-Tricosene	21.523	6.13E+07
Butenyl Butanediol Adipate	21.838	3.33E+08
Terephthalic acid, di(but-3-enyl) ester	21.916	4.33E+08
Oxazole, 4,5-dihydro-2-methyl-	25.194	7.60E+07
1-Hexacosene	26.645	1.36E+08
Tritetracontane	27.417	1.06E+08
Octacosanol	28.104	2.35E+08
17-Pentatriacontene	28.812	2.75E+08

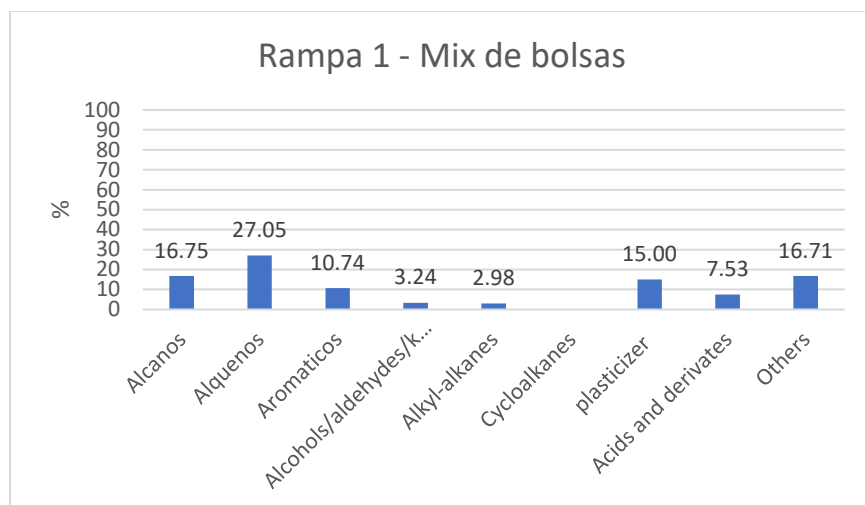


Figura 44. Grafica de grupos funcionales del Mix de muestras-R1

Porcentajes de los compuestos detectados y clasificados en sus grupos funcionales, en la espectrometría de masas de la muestra de mix de bolsas en condiciones de la rampa 1.

5.5.2. Rampa 2.

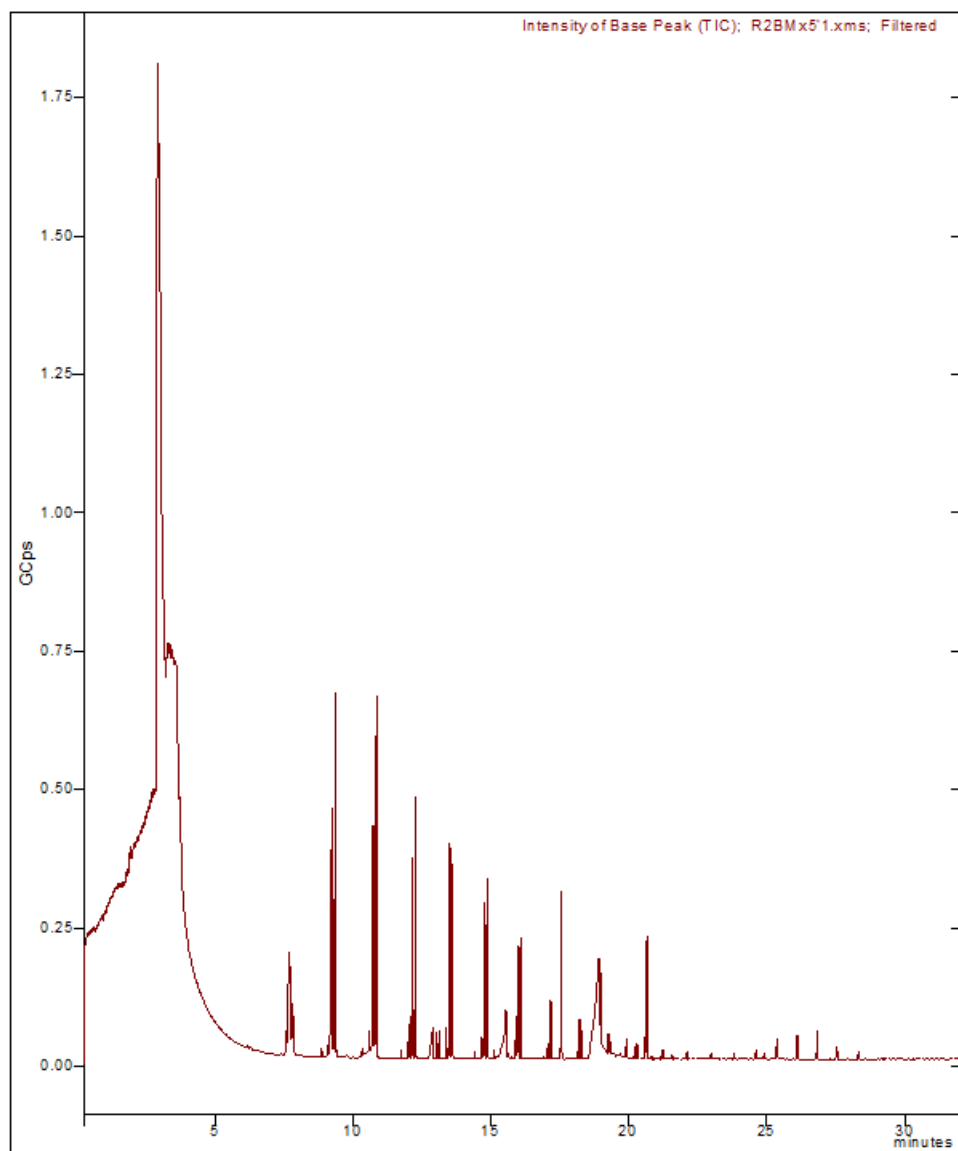


Figura 45. Espectro del Mix de muestras-R2

Espectrometría de masa de la muestra de mix de bolsas en condiciones de la rampa 2 al pirolizar.

Tabla 22. Compuestos orgánicos detectados en la espectrometría de masa de la muestra de mix de bolsas en la rampa 2.

Nombre del compuesto	Tiempo de Retencion	Area
Propyl pyruvate	2.905	7.45E+09
1-Decene	7.661	5.93E+09
Nonane, 5-methylene-	8.834	2.55E+08
Cyclopropane, 1-heptyl-2-methyl-	9.219	1.18E+10
Decane	9.346	7.95E+09
Bicyclo[7.1.0]decane	10.572	9.04E+08
1-Tetradecene	10.715	9.50E+09
Tridecane	10.835	7.08E+09
1,13-Tetradecadiene	12.007	9.51E+08
1-Tridecene	12.141	6.28E+09
Pentadecane	12.251	3.79E+09
2-Butyl-1-decene	13.108	4.39E+08
1,12-Tridecadiene	13.371	7.97E+08
3-Heptanol, 2,6-dimethyl-	15.531	1.96E+09
1-Heptadecene	15.977	5.14E+09
Eicosane	16.062	1.85E+09
E-14-Hexadecenal	17.121	1.57E+09
bis(Butenyl) adipate	17.549	1.87E+09
5-Eicosene, (E)-	18.207	1.01E+09
Di-n-octylphthalate	18.96	2.81E+08
1-Nonadecene	19.249	6.68E+08
Terephthalic acid, di(but-3-enyl) ester	20.65	1.78E+09
1-Hexacosene	25.358	6.96E+08
Hentriacontane	26.131	2.78E+08
Heptacosane	26.841	3.19E+08
Octacosyl trifluoroacetate	27.524	7.14E+08

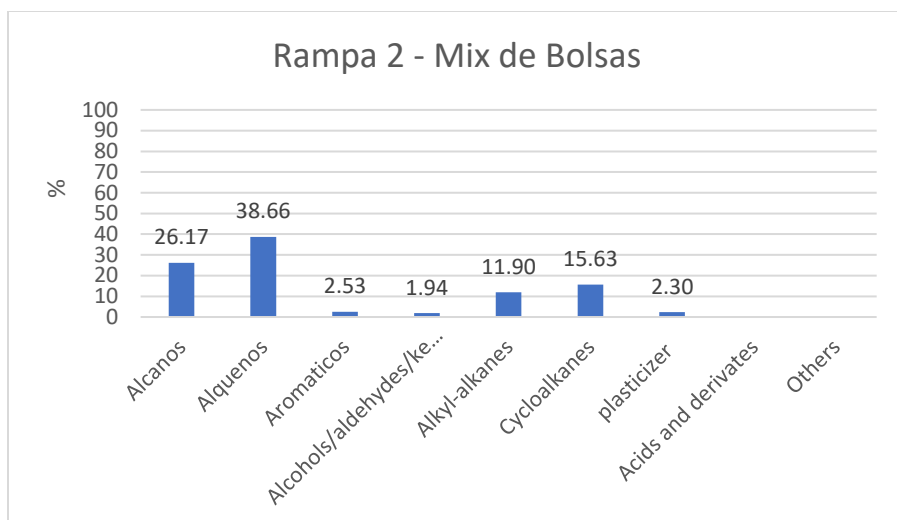


Figura 46. Grafica de grupos funcionales del Mix de muestras-R2

Porcentajes de los compuestos detectados y clasificados en sus grupos funcionales, en la espectrometría de masas de la muestra de mix de bolsas en condiciones de la rampa 2.

5.5.3. Rampa 3.

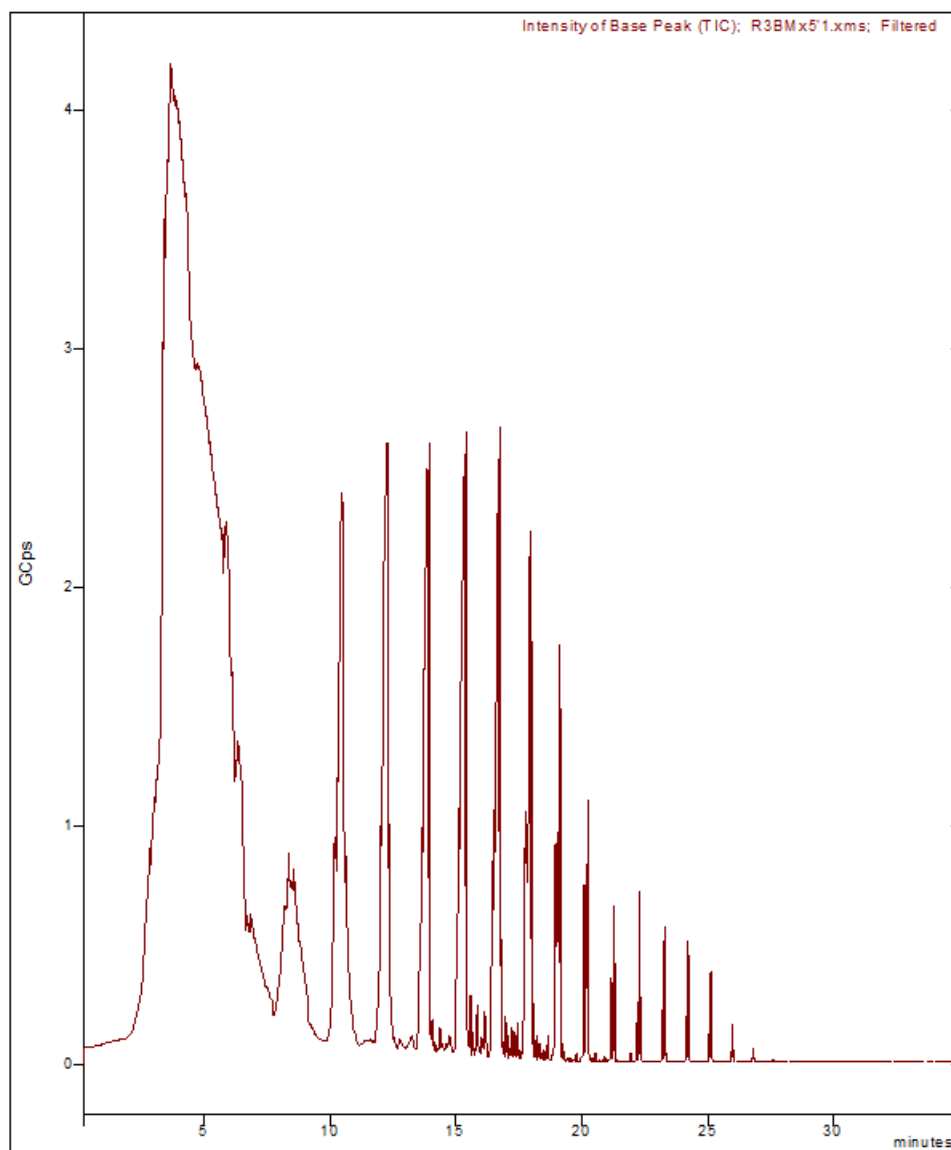


Figura 47. Espectro del Mix de muestras-R3

Espectrometría de masa de la muestra de mix de bolsas en condiciones de la rampa 3 al pirolizar.

Tabla 23. Compuestos orgánicos detectados en la espectrometría de masa de la muestra de mix de bolsas en la rampa 3.

Nombre del compuesto	Tiempo de retención	Area
2-Butene	3.448	2.39E+10
1-Dodecene	12.279	1.52E+11
1-Tetradecene	13.868	1.47E+11
Dodecane	13.934	1.56E+10
Pentadecane	15.398	1.13E+10
1,12-Tridecadiene	16.463	2.43E+08
1-Heptadecene	17.953	6.87E+10
Nonadecane	18.01	1.44E+10
5-Octadecene, (E)-	20.199	2.17E+10

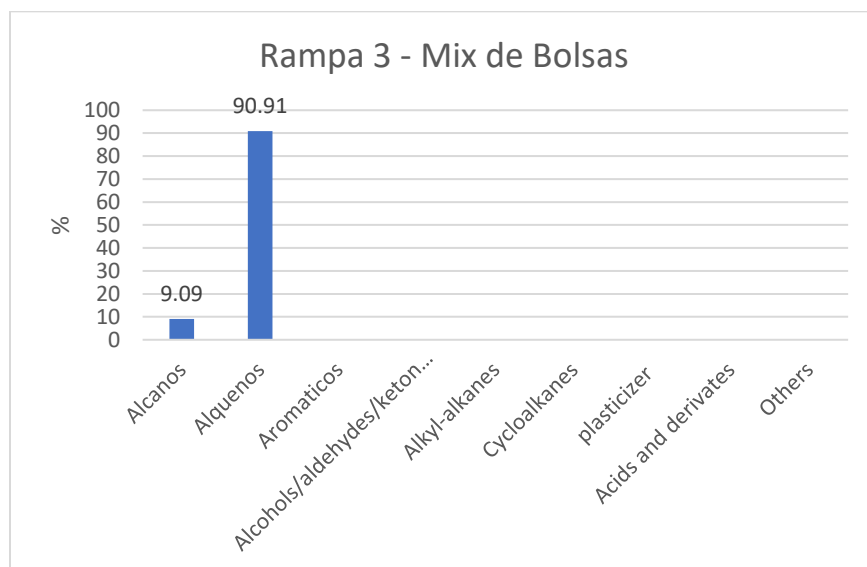


Figura 48. Grafica de grupos funcionales del Mix de muestras-R3

Porcentajes de los compuestos detectados y clasificados en sus grupos funcionales, en la espectrometría de masas de la muestra de mix de bolsas en condiciones de la rampa 3.

5.5.4. Rampa 4.

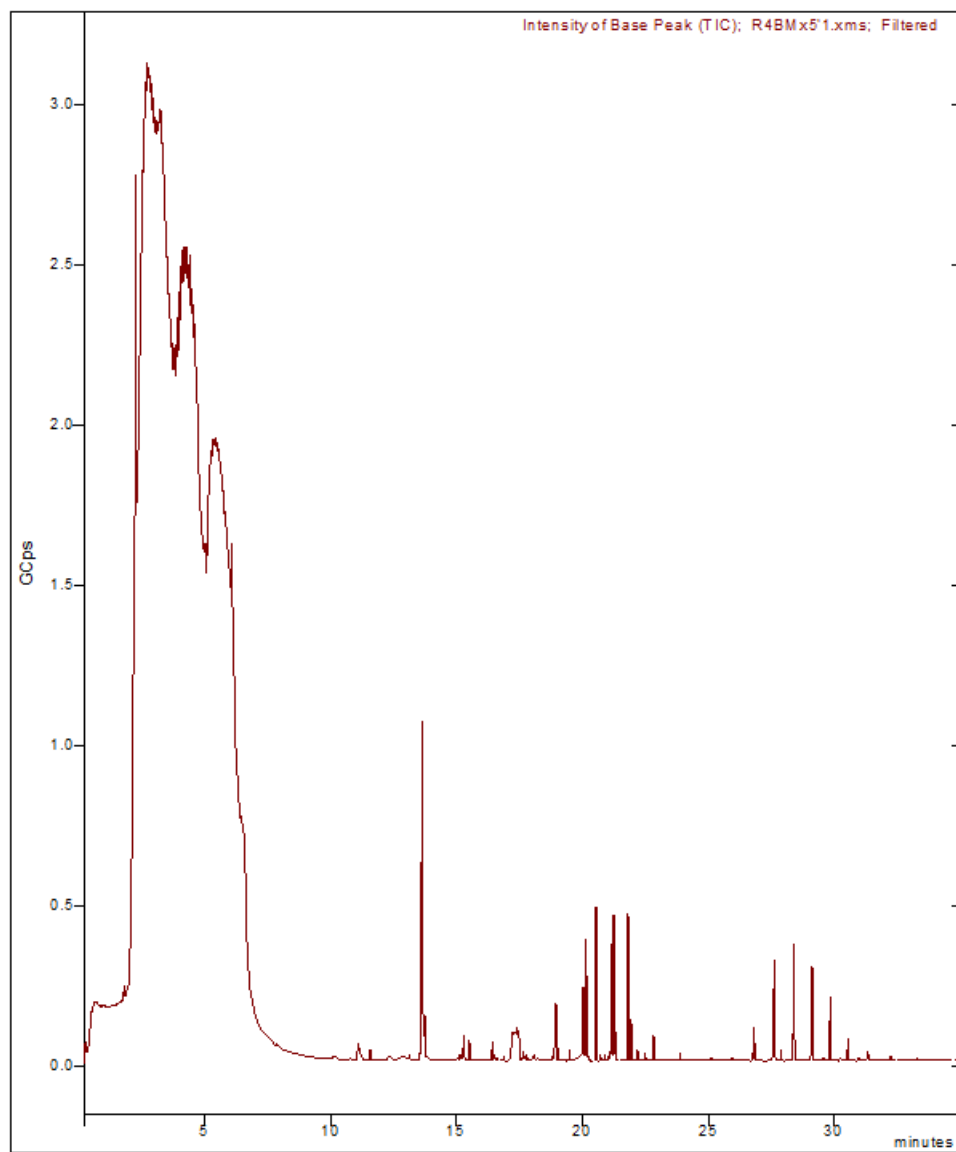


Figura 49. Espectro del Mix de muestras-R4

Espectrometría de masa de la muestra de mix de bolsas en condiciones de la rampa 4 al pirolizar.

Tabla 24. Compuestos orgánicos detectados en la espectrometría de masa de la muestra de mix de bolsas en la rampa 4.

Nombre del compuesto	Tiempo de Retencion	Área
3-Methyl-1,2-diazirine	2.277	1.99E+10
Propene	2.598	1.86E+10
Azulene	13.634	6.94E+09
2-((3-Methylbutan-2-yloxy)carbonyl)benzoic acid	17.409	1.19E+09
1-Heptadecene	18.936	4.39E+09
18-Nonadecen-1-ol	20.032	3.38E+09
5-Octadecene, (E)-	20.127	7.19E+09
Heneicosane	20.193	1.80E+09
bis(Butenyl) adipate	20.537	3.27E+09
1,14-Tetradecanediol	21.15	4.72E+09
E-14-Hexadecenal	21.238	9.01E+09
Eicosane	21.292	1.65E+09
1,2-Benzenedicarboxylic acid, bis(2-methylpropyl) ester	21.81	2.51E+09
Di-n-octylphthalate	21.933	5.08E+08
3-Eicosene, (E)-	22.238	5.42E+08
1,19-Eicosadiene	26.744	5.28E+08
1-Hexacosene	26.793	1.63E+09
Hentriacontane	26.829	5.71E+08
1-Hexyl-2-nitrocyclohexane	27.558	1.18E+09
Tetratetracontane	28.407	2.14E+09
Tritetracontane	29.138	1.20E+09
17-Pentatriacontene	29.827	3.43E+09

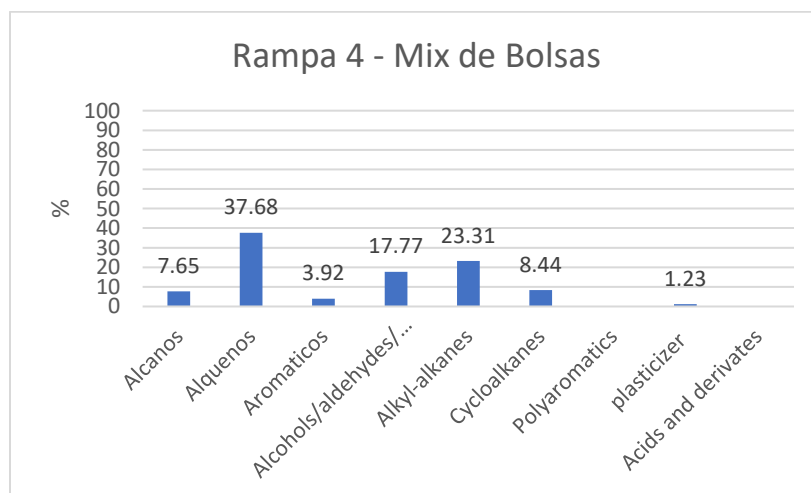


Figura 50. Grafica de grupos funcionales del Mix de muestras-R4

Porcentajes de los compuestos detectados y clasificados en sus grupos funcionales, en la espectrometría de masas de la muestra de mix de bolsas en condiciones de la rampa 4.

6. DISCUSIÓN DE RESULTADOS

En el apartado anterior, recopilamos los resultados obtenidos al aplicar el proceso de pirolisis a cuatro muestras de bolsas diferentes y una muestra que era la mezcla de una porción de cada una, dando en total cinco muestras para nuestros procedimientos experimentales que se desarrollaron en diferentes rampas, por lo que obtuvimos distintos porcentajes de compuestos a diferentes temperaturas. La cromatografía de gases empleada junto al proceso permitió identificar y cuantificar los compuestos orgánicos presentes en el gas producto de la pirolisis.

La cromatografía nos permitió detectar una amplia población de cadenas carbonadas, los que nos llevó a simplificar el análisis clasificándolas por sus grupos funcionales, manteniendo su naturaleza y por lo tanto el posible daño a la salud y al medio ambiente.

En la tabla 22, resaltamos los tres grupos con mayor presencia en cada muestra, para cada rampa utilizada, de igual forma se puede observar todos los grupos detectados por la cromatografía.

En la tabla 23, resumimos el análisis para el grupo más dominante de cada muestra en cada rampa de la pirolisis

La tabla 24, solo tiene la última muestra que es la mezcla de las bolsas utilizadas para el estudio. Esta nos sirve para observar y simular experimentalmente los compuestos orgánicos que se obtendrían a gran escala, al degradar una mezcla de bolsas por medio de un proceso de pirolisis no catalizada.

Tabla 22. Selección de los 3 grupos de compuestos orgánicos detectado en mayor proporción por cada rampa.

	Alcanos (%)	Alquenos (%)	Aromáticos (%)	Alc, Ald, Ceto (%)	Alquil-Alcanos (%)	Cicloalcanos (%)	Plastificantes (%)	Ácidos y derivados (%)	Otros (%)
Bolsa Azul									
R1	43,15	38,72	18,13	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00
R2	19,62	31,64	0,00	16,81	0,00	3,80	12,16	5,02	10,95
R3	17,26	65,75	0,00	0,00	0,00	16,99	0,00	0,00	0,00
R4	0,35	4,07	45,04	5,81	0,00	32,49	0,00	0,00	12,25
Bolsa Lila									
R1	13,73	16,46	0,00	0,00	0,00	2,61	58,68	21,29	0,00
R2	27,97	46,33	0,00	5,16	7,97	0,82	0,00	0,00	12,00
R3	16,49	74,22	0,00	9,28	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00
R4	0,00	69,05	3,91	6,55	18	2,56	0,00	0,00	0,00
Bolsa Amarilla									
R1	0,00	31,02	3,72	24,56	0,00	0,00	13,00	0,00	0,17
R2	24,00	51,68	0,00	1,86	7,32	5,07	0,00	0,00	6,90
R3	8,27	74,04	0,00	5,19	0,00	12,49	0,00	0,00	0,00
R4	6,50	42,40	39,00	8,00	0,00	0,00	1,00	3,00	0,00
Bolsa Transparente									
R1	0,00	0,05	1,60	56,6	1,20	3,60	11,20	18,80	7,00
R2	0,39	1,05	4,15	4,86	0,00	66,65	6,00	10,10	6,47
R3	2,65	11,17	15,37	0,86	0,00	68,00	1,30	0,66	0,00
R4	2,32	11,25	10,62	68,34	0,00	0,00	0,19	7,00	0,00
Mix de Bolsas									
R1	16,75	27,05	10,74	3,24	2,98	0,00	15,00	7,53	16,71
R2	26,17	38,66	2,53	1,94	11,90	15,63	2,30	0,00	0,00
R3	9,09	90,91	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00
R4	7,65	37,68	3,92	17,77	23,31	8,44	1,23	0,00	0,00

Tabla 23. Selección de los grupos orgánicos con mayor presencia, obtenidos en el gas de la pirolisis por cada rampa.

Bolsa Azul	%	Grupo
R1	43,15	Alcanos
R2	31,64	Alquenos
R3	65,75	Alquenos
R4	45,04	Aromáticos
Bolsa Lila		
R1	58,68	Plastificantes
R2	46,33	Alquenos
R3	74,22	Alquenos
R4	69,05	Alquenos
Bolsa Amarilla		
R1	31,02	Alquenos
R2	51,68	Alquenos
R3	74,04	Alquenos
R4	42,40	Alquenos
Bolsa Transparente		
R1	56,60	Alc,Ald,Ceto
R2	66,65	Cicloalcanos
R3	68,00	Cicloalcanos
R4	68,34	Alc,Ald,Ceto
Mix de Bolsas		
R1	27,05	Alquenos
R2	38,66	Alquenos
R3	90,91	Alquenos
R4	37,68	Alquenos

En la tabla 23, se observa que las cadenas predominantes son de grupos alquenos, seguido de aromáticos y los ciclos alcanos, por últimos otros.

Tabla 24. Grupos dominantes obtenidos en cada rampa en la pirolisis aplicada a la muestra de mix de bolsas.

Mix de Bolsas	%	Grupo
R1	27,05	Alquenos
R2	38,66	Alquenos
R3	90,91	Alquenos
R4	37,68	Alquenos

En la tabla 24, se detecta que, en una mezcla de bolsas, al ser pirolizadas a diferentes temperaturas, el gas obtenido del proceso se caracterizara por la presencia masiva de cadenas de grupos **alquenos**, hidrocarburos insaturados altamente tóxicos.

7. CONCLUSIONES

1. La descomposición térmica por pirolisis del LDPE, componente mayoritario de bolsas comerciales, genera un gas efluente cuyo perfil volátil está compuesto mayoritariamente por alquenos, alcanos, cicloalcanos, alcoholes y aldehídos de cadena larga, compuestos aromáticos y plastificantes ftalatos.
2. El perfil volátil de las distintas matrices de polietileno estudiadas, en cualquiera de los rangos de temperatura, muestra una elevada dependencia de los aditivos que contiene el polímero que les confiere distinto color y aroma.
3. Los compuestos mayoritarios en el gas efluente de la pirolisis son hidrocarburos monoinsaturados (alquenos) o saturados (alcanos) de cadena media-larga.
4. El tiempo de residencia y el rango de temperaturas del pirolizador, condiciona la composición cuali-cuantitativa de los efluentes gaseosos.
5. Los alquenos son los componentes mayoritarios en el efluente gaseoso procedente de la pirolisis de una mezcla de todas las matrices de LDPE utilizadas en el estudio.
6. La rampa de calentamiento más elevada (700°C a 900 °C) es la que genera un espectro más amplio de compuestos oxigenados y composición no hidrocarbonada.
7. Con independencia de la matriz utilizada, las rampas de calentamiento del pirolizador comprendidas entre 450°C a 500 °C y 500 a 700°C son las óptimas para no generar compuestos aromáticos con un elevado potencial carcinógeno.

8. BIBLIOGRAFÍA

- (1) Al-Haj Ibrahim, H. Introductory Chapter: Pyrolysis. In *Recent Advances in Pyrolysis*; IntechOpen, 2020. <https://doi.org/10.5772/intechopen.90366>.
- (2) Alka Grover, Akanksha Gupta, Shivani Chandra, A. K. and S. P. K. Polietileno y Medio Ambiente. *Int. J. Environ. Sci.* 2015, 6.
- (3) Hahladakis, J. N.; Velis, C. A.; Weber, R.; Iacovidou, E.; Purnell, P. An Overview of Chemical Additives Present in Plastics: Migration, Release, Fate and Environmental Impact during Their Use, Disposal and Recycling. *Journal of Hazardous Materials*. Elsevier February 15, 2018, pp 179–199. <https://doi.org/10.1016/j.jhazmat.2017.10.014>.
- (4) Diaz, F.; Caleño. Obtención de Combustibles a Partir de Residuos Plásticos_unlocked.Pdf - EVALUACIÓN DE LA PIRÓLISIS COMO UN MÉTODO PARA LA OBTENCIÓN DE COMBUSTIBLES | Héroe Del Curso, Universidad Autonoma de Occidente, 2020.
- (5) Kumar, S.; Panda, A. K.; Singh, R. K. A Review on Tertiary Recycling of High-Density Polyethylene to Fuel. *Resources, Conservation and Recycling*. Elsevier September 1, 2011, pp 893–910. <https://doi.org/10.1016/j.resconrec.2011.05.005>.
- (6) Meier, D.; Van De Beld, B.; Bridgwater, A. V.; Elliott, D. C.; Oasmaa, A.; Preto, F. State-of-the-Art of Fast Pyrolysis in IEA Bioenergy Member Countries. *Renewable and Sustainable Energy Reviews*. Pergamon April 1, 2013, pp 619–641. <https://doi.org/10.1016/j.rser.2012.11.061>.
- (7) Pirólisis de biomasa - Ingeniería química y de procesos. <https://www.arhse.com/biomass-pyrolysis/> (accessed 2022-08-28).
- (8) Chowdhury, R.; Sarkar, A. Reaction Kinetics and Product Distribution of Slow Pyrolysis of Indian Textile Wastes. *Int. J. Chem. React. Eng.* 2012, 10 (1). <https://doi.org/10.1515/1542-6580.2662>.
- (9) Antonio, J.; Ferrer, C. Estudio de La Pirólisis de Residuos Plásticos de Polietileno y Neumáticos Usados. 1996.
- (10) Hu, S. -R; Kyu, T.; Stein, R. S. Characterization and Properties of Polyethylene Blends I. Linear Low-density Polyethylene with High-density Polyethylene. *J. Polym. Sci. Part B Polym. Phys.* 1987, 25 (1), 71–87. <https://doi.org/10.1002/polb.1987.090250106>.
- (11) Ojeda, T. Polymers and the Environment. *Polym. Sci.* 2013. <https://doi.org/10.5772/51057>.

- (12) Nkwachukwu, O. I.; Chima, C. H.; Ikenna, A. O.; Albert, L. Focus on Potential Environmental Issues on Plastic World towards a Sustainable Plastic Recycling in Developing Countries. *Int. J. Ind. Chem.* 2013, 41 (1), 1–13. <https://doi.org/10.1186/2228-5547-4-34>.
- (13) Jan C. J. Bart. *Additives in Polymers: Industrial Analysis and Applications* - Jan C. J. Bart - Google Libros; John Wiley & Sons, Ltd, 2005.
- (14) Marturano, V.; Cerruti, P.; Ambrogio, V. Polymer Additives. In *Polymer Engineering*; De Gruyter, 2017; Vol. 2, pp 139–170. <https://doi.org/10.1515/9783110468281-005>.
- (15) Xiao, L.; Zheng, Z.; Irgum, K.; Andersson, P. L. Studies of Emission Processes of Polymer Additives into Water Using Quartz Crystal Microbalance-A Case Study on Organophosphate Esters. *Environ. Sci. Technol.* 2020, 54 (8), 4876–4885. <https://doi.org/10.1021/acs.est.9b07607>.
- (16) Éteres de Polibromodifenilos (Polybrominated Diphenyl Ethers) | ToxFAQ | ATSDR. https://www.atsdr.cdc.gov/es/toxfaqs/es_tfacts207.html (accessed 2022-08-28).
- (17) Sax, R. J. L. y N. I. Sax's Dangerous Properties of Industrial Materials; John Wiley & Sons, Inc., 2004; Vol. 4. <https://doi.org/10.1002/0471701343>.
- (18) Hahladakis, J. N.; Velis, C. A.; Weber, R.; Iacovidou, E.; Purnell, P. An Overview of Chemical Additives Present in Plastics: Migration, Release, Fate and Environmental Impact during Their Use, Disposal and Recycling. *J. Hazard. Mater.* 2018, 344, 179–199. <https://doi.org/10.1016/J.JHAZMAT.2017.10.014>.
- (19) McDonough, C. A.; De Silva, A. O.; Sun, C.; Cabrerizo, A.; Adelman, D.; Soltwedel, T.; Bauerfeind, E.; Muir, D. C. G.; Lohmann, R. Dissolved Organophosphate Esters and Polybrominated Diphenyl Ethers in Remote Marine Environments: Arctic Surface Water Distributions and Net Transport through Fram Strait. *Environ. Sci. Technol.* 2018, 52 (11), 6208–6216. <https://doi.org/10.1021/ACS.EST.8B01127>.
- (20) Tao, F.; Sellström, U.; De Wit, C. A. Organohalogenated Flame Retardants and Organophosphate Esters in Office Air and Dust from Sweden. *Environ. Sci. Technol.* 2019, 53 (4), 2124–2133. https://doi.org/10.1021/ACS.EST.8B05269/SUPPL_FILE/ES8B05269_SI_001.PDF.
- (21) McGown, S. R. Basic Gas Chromatography-Mass Spectrometry: Principles and Techniques. *J. Biochem. Biophys. Methods* 1990, 20 (3), 269–270. [https://doi.org/10.1016/0165-022x\(90\)90085-q](https://doi.org/10.1016/0165-022x(90)90085-q).

- (22) Akoueson, F.; Chbib, C.; Monchy, S.; Paul-Pont, I.; Doyen, P.; Dehaut, A.; Duflos, G. Identification and Quantification of Plastic Additives Using Pyrolysis-GC/MS: A Review. *Science of the Total Environment*. Elsevier June 15, 2021, p 145073. <https://doi.org/10.1016/j.scitotenv.2021.145073>.
- (23) Bart, J. C. J. Polymer/Additive Analysis by Flash Pyrolysis Techniques. *J. Anal. Appl. Pyrolysis* 2001, 58–59, 3–28. [https://doi.org/10.1016/S0165-2370\(00\)00160-1](https://doi.org/10.1016/S0165-2370(00)00160-1).
- (24) Neumann, C.; Mazzella, W. D. Forensic Sciences - Questioned Documents. In *Encyclopedia of Analytical Science: Second Edition*; Elsevier Inc., 2004; pp 465–471. <https://doi.org/10.1016/B0-12-369397-7/00206-5>.
- (25) Sam, K. D. Gas Chromatography | Pyrolysis. *Encycl. Anal. Sci.* 2019, 245–261. <https://doi.org/10.1016/B978-0-12-409547-2.11447-7>.
- (26) EGA/PY-3030D | Pirolizador de microhorno de disparos múltiples | Producto | Laboratorios de frontera. <https://www.frontier-lab.com/products/multi-functional-pyrolysis-system/17811/>.
- (27) Scion - SQ GC-MS - Detector de rango dinámico extendido (EDR) de ... <https://www.environmental-expert.com/products/scion-model-sq-gc-ms-extended-dynamic-range-detector-edr-562689>.
- (28) Siddiqui, M. S., & Redhwi, H. H. (2009). Pyrolysis of mixed plastics for the recovery of useful products. *Fuel Processing Technology*, 90(4), 545-552. <https://doi.org/10.1016/j.fuproc.2009.01.003>
- (29) Team Xometry. Polyethylene (PE): Structure, Properties, and Applications.| <https://www.xometry.com/resources/materials/polyethylene/>.
- (30) P.Sharpe. Making Plastics: From Monomer to Polymer, 2015. <https://www.aiche.org/resources/publications/cep/2015/september/making-plastics-monomer-polymer>
- (31) Science & Tech Spotlight: Biorecycling of Plastics. (s. f.). U.S. GAO. <https://www.gao.gov/products/gao-23-106261#:~:text=Biological%20recycling%2C%20or%20biorecycling%2C%20is,and%20re%2Dgranulates%20the%20plastic>
- (32) F. Faisal, M.G. Rasul, M.I. Jahirul, D. Schaller. Pyrolytic conversion of waste plastics to energy products: A review on yields, properties, and production costs, *Science of The Total Environment*, Volume 861, 2023, 160721, ISSN 0048-9697, <https://doi.org/10.1016/j.scitotenv.2022.160721>.

- (33) De La Torre, S. R. (2022). Pyrolysis-GC/MS, A Powerful Analytical Tool for Additives and Polymers Characterization. En IntechOpen eBooks. | <https://doi.org/10.5772/intechopen.101623>
- (34) EAG Laboratories. (2022, 15 diciembre). Pyrolysis-GC-MS | Pyrolysis Gas Chromatography | EAG Laboratories. [https://www.eag.com/techniques/mass-spec/pyrolysis-gc-ms/#:~:text=Pyrolysis%20Gas%20Chromatography%2FMass%20Spectrometry%20\(Pyrolysis%2DGC%2DMS,analyzed%20using%20traditional%20GC%2DMS](https://www.eag.com/techniques/mass-spec/pyrolysis-gc-ms/#:~:text=Pyrolysis%20Gas%20Chromatography%2FMass%20Spectrometry%20(Pyrolysis%2DGC%2DMS,analyzed%20using%20traditional%20GC%2DMS)
- (35) Meier, Dietrich & Beld, Bert & Bridgwater, Tony & Elliott, Douglas & Oasmaa, Anja & Preto, Fernando. (2013). State-of-the-Art of Fast Pyrolysis in IEA Bioenergy Member Countries. Renewable and Sustainable Energy Reviews. 20. 10.1016/j.rser.2012.11.061.
- (36) Guruge, A. R. (2023). Biomass Pyrolysis. Chemical and Process Engineering. <https://www.arhse.com/biomass-pyrolysis/>
- (37) McGown, S. R. Basic Gas Chromatography-Mass Spectrometry: Principles and Techniques. J. Biochem. Biophys. Methods 1990, 20 (3), 269–270. <https://doi.org>
- (38) Wikipedia contributors. (2023). Gas chromatography. Wikipedia. http://en.wikipedia.org/wiki/Gas_chromatography