



**Propuesta de Trabajo Fin de Máster**  
Año académico 2024-2025  
**MÁSTER EN MÉTODOS COMPUTACIONALES EN CIENCIAS**

<b>Project Nº 11</b>
<b>Título:</b> Desarrollo de materiales poliméricos sostenibles mediante fotoentrecruzamiento
<b>Departamento/ Laboratorio:</b> Química, Grupo SUMBET, Facultad de Ciencias
<b>Director:</b> José Ramón Isasi Allica <b>Correo electrónico:</b> jrisasi@unav.es <b>Codirector:</b> <b>Correo electrónico:</b>
<b>Resumen</b> <p>Los hidrocoloides son polímeros hidrófilos de origen vegetal, animal, microbiano o sintético, que generalmente contienen múltiples grupos hidroxilo y pueden comportarse como polielectrolitos. En este proyecto se funcionalizarán geles y se generarán redes poliméricas a partir de estos componentes por 'rutas verdes' con objeto de obtener nuevos materiales con interesantes capacidades de sorción y/o liberación de colorantes, fármacos,... En particular, se buscarán formulaciones 'verdes' para producir <b>resinas fotorreticulables</b> aptas para usarse en impresoras 3D. El desarrollo de <b>materiales adsorbentes</b> que presenten una buena selectividad hacia determinados contaminantes específicos presentes en las aguas superficiales y subterráneas así como para la valorización de residuos agroalimentarios son también campos de investigación prometedores.</p> <p>Los <b>objetivos</b> del trabajo son: (1) la preparación y caracterización de sólidos adsorbentes basados en polisacáridos de origen natural mediante fotorreticulación; (2) su aplicación a la sorción de diversos compuestos diana; (3) la modelización y optimización del proceso de eliminación.</p> <p>La <b>metodología</b> a seguir se organiza atendiendo a las siguientes tareas:</p> <ol style="list-style-type: none"><li>1) Síntesis (a partir de bioproductos y según procesos basados en la Química Sostenible) y caracterización de los materiales obtenidos (tamaño de partícula, FTIR, análisis térmico, microscopía, etc.).</li><li>2) Validación de estos materiales en la adsorción (selectiva) de compuestos de referencia (moléculas modelo).</li><li>3) Aplicación de un diseño experimental clásico, del diseño de mezclas y de los análisis de componentes principales y/o clasificatorios para analizar las variables que afectan al proceso de fotorreticulación, así como a sus propiedades finales.</li></ol>

**OPTATIVAS RECOMENDADAS**

1. Machine Learning I
2. Análisis de datos en química
3. Procesamiento de imágenes
- 4.