

UNIVERSIDAD DEL VALLE DE GUATEMALA

Facultad de Ingeniería



Evaluación de la síntesis de ácido tereftálico (TPA) por hidrólisis alcalina a partir de tereftalato de polietileno (PET) para el reciclaje químico de material residual

Trabajo de graduación presentado por
Andrés Paz Molina para optar al grado académico de
Licenciado en Ingeniería Química Industrial

Guatemala,
2025

UNIVERSIDAD DEL VALLE DE GUATEMALA

Facultad de Ingeniería



Evaluación de la síntesis de ácido tereftálico (TPA) por hidrólisis alcalina a partir de tereftalato de polietileno (PET) para el reciclaje químico de material residual

Trabajo de graduación presentado por
Andrés Paz Molina para optar al grado académico de
Licenciado en Ingeniería Química Industrial

Guatemala,
2025

Vo.Bo.:

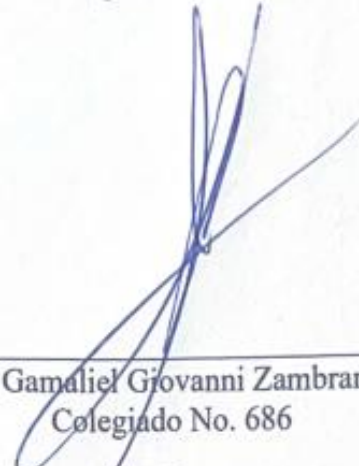
(f)


MSc. Ing. Luis Ernesto Núñez González

Asesor
Colegiado No. 1191

Tribunal Examinador:

(f)


MSc. Ing. Gamaliel Giovanni Zambrano Ruano

Colegiado No. 686

(f)


M.A., Ing. Carmen Alicia Ortiz Pineda

Colegiado No. 693

(f)


MSc. Ing. Luis Ernesto Núñez González

Colegiado No. 1191

Fecha de aprobación: Guatemala, 9 de diciembre del 2025

PREFACIO

Si estás leyendo esto, estoy agradecido por ti.

Agradezco el gesto de que vayas a leer algunas partes de mi trabajo de graduación, hecho con bastante esfuerzo y tiempo, y que se hayan cruzado, de alguna forma u otra, nuestros caminos.

Ahora, quisiera agradecer la influencia que ha tenido sobre mí ciertas personas específicas. Primero, mi familia. Es evidente que no estaría aquí sin mi mamá y papá, pero creo que tampoco estaría aquí si no hubieran sido los grandes padres que han sido. Desde su apoyo incondicional en mis metas propuestas, hasta su presencia en mis partidos y entrenos de baloncesto. De la mano va el amor que me ha impartido mi hermana Lulu y mi hermano Edgar, a quienes siempre he visto como otra madre y padre por el cuidado que me han dado, beneficio de nuestra diferencia de edades, aunque como consecuencia me haya quedado extrañándolos en la casa. De igual forma, Nico me acompañó mis seis años de carrera; los momentos de pandemia cuando recibía clases con él en mis piernas (también se merece un título), hasta las desveladas que pasé para escribir esto. Solo quiero recalcar el amor que tengo por todos ustedes y que nunca lo he dado por sentado.

Quiero dar las gracias a mis amigos de la universidad, especialmente a Astrid, Tais, Mary, Gaby, Ale, Diego y Santiago. Por hacerme sentir apreciado y por dejarme formar lazos con cada uno de ustedes que yo sé siempre estarán.

Gracias a Jose, César, Mario, Marco y JP por compartir tantas horas conmigo mientras la pasábamos bien en línea y por demostrar lo que son los verdaderos amigos. Y a Lemus y Fer, que a pesar de que estemos tan lejos, sé que siempre están para mí. Y a Marie, que a pesar de que no hablemos todos los días, nunca me he sentido menos cercano.

También gracias a todos mis amigos del colegio, con quienes he compartido un *exceso* de recuerdos. Los quiero a todos.

Aunque pueda ser algo abstracto, agradezco al baloncesto por darme un sentido de identidad que me ha permitido forjar tantas conexiones con tantas personas a lo largo de mi vida que siempre tienen un lugar especial en mi corazón.

Gracias Ethan, Hila, Dan, Zach, Ian, AB, Olivia, Cam, Sam, Lena, Nate y Tom por ayudarme a pasar los cientos de horas que me tomó hacer este trabajo.

Finalmente, quiero agradecer a todas las personas que tuvieron un impacto directo en que pudiera realizar este trabajo. Especialmente a mi asesor, el Ing. Luis Núñez por su gran apoyo y perspectiva durante todo el proceso. También al Ing. Gamaliel Zambrano, Ing. Carmen Ortiz e Ing. José Lam por todos los aprendizajes que me dejaron que durarán una vida. Y al personal del departamento: Héctor, José, Cristián, Verónica y Regina quienes hicieron posible completar la experimentación de este trabajo.

ÍNDICE

LISTA DE CUADROS	v
LISTA DE FIGURAS	vii
LISTA DE GRÁFICAS.....	ix
LISTA DE ECUACIONES	x
LISTA DE CÁLCULOS	xi
Resumen	xii
Abstract.....	xiii
I. Introducción.....	1
II. Justificación	3
III. Objetivos.....	5
A. Objetivo general	5
B. Objetivos específicos.....	5
IV. Marco teórico.....	6
A. Polímeros.....	6
1. Definición de polímero.....	6
2. Definición de oligómeros	8
3. Uso de oligómeros y polímeros.....	8
4. Depolimerización.....	9
B. Tereftalato de Polietileno (PET).....	10
1. Propiedades químicas y físicas	10
2. Usos y aplicaciones	10
3. Producción mundial de PET	11
4. Uso nacional de PET	13
5. Problemas ambientales asociados a PET residual	14
C. Métodos de reciclaje.....	16
1. Mecánica.....	16
2. Química	17
D. Métodos de solvólisis	18
1. Glicólisis.....	18
2. Metanólisis	19
3. Aminólisis.....	20

4.	Hidrólisis	21
a.	Neutra	22
b.	Ácida.....	22
c.	Alcalina.....	22
E.	Ácido Tereftálico (TPA).....	23
1.	Estructura química.....	23
2.	Usos industriales del TPA	24
3.	TPA en la producción de nuevos materiales	25
4.	Titulación ácido-base y FTIR del TPA.....	25
F.	Factores económicos y ambientales	29
1.	Costos asociados al proceso	29
2.	Beneficios ambientales del proceso.....	29
G.	Análisis costo-beneficio	30
H.	Balance de masa y energía.....	30
V.	Antecedentes.....	32
VI.	Metodología.....	34
VII.	Resultados.....	42
VIII.	Discusión	64
IX.	Conclusiones.....	72
X.	Recomendaciones	73
XI.	Bibliografía.....	74
XII.	Anexos.....	80
A.	Datos originales	80
B.	Cálculos de muestra.....	85
C.	Análisis de error	91
D.	Balance de masa y energía.....	95
E.	Datos calculados	96
F.	Espectros infrarrojo	111
G.	Datos de equipo y material	119
H.	Código utilizado para análisis de datos	123
I.	Evidencia fotográfica.....	144
XIII.	Glosario	151

LISTA DE CUADROS

Cuadro 1. Condiciones de reacción a evaluar.....	37
Cuadro 2. Matriz del diseño factorial aplicado para el estudio de la hidrólisis alcalina de PET en función de temperatura y relación NaOH:PET.....	42
Cuadro 3. Picos observados por FTIR de productos obtenidos de la hidrólisis alcalina de PET bajo distintas condiciones de temperatura y relación NaOH:PET	43
Cuadro 4. Prueba de normalidad de Shapiro-Wilk para los residuos del modelo ANOVA de los rendimientos de recuperación de sólidos tras la hidrólisis alcalina de PET y de este corregido por contenido de TPA	46
Cuadro 5. Resultados del análisis de varianza para los rendimientos de recuperación de sólidos tras la hidrólisis alcalina de PET	46
Cuadro 6. Comparaciones múltiples de Tukey HSD entre niveles de temperatura y relación NaOH:PET para los rendimientos de recuperación de sólidos tras la hidrólisis alcalina de PET	47
Cuadro 7. Resultados del análisis de varianza para los rendimientos corregidos por contenido de TPA en los sólidos obtenidos.....	51
Cuadro 8. Comparaciones múltiples de Tukey HSD entre niveles de temperatura y relación NaOH:PET para los rendimientos corregidos por contenido de TPA en los sólidos obtenidos.....	52
Cuadro 9. Picos observados por FTIR de productos obtenidos de la hidrólisis alcalina de PET a diferentes tiempos de reacción.....	54
Cuadro 10. Análisis costo-beneficio de la hidrólisis alcalina de PET según la combinación de temperatura y relación NaOH:PET	62
Cuadro 11. Análisis costo-beneficio de la hidrólisis alcalina de PET según el tiempo de reacción.....	63
Cuadro 12. Datos originales para todas las corridas de las distintas combinaciones de temperatura y relación base-polímero realizadas	80
Cuadro 13. Datos originales para todas las corridas realizadas a distintos tiempos de reacción a 80 °C y una relación NaOH:PET de 1.0 g/g	81
Cuadro 14. Mediciones para la elaboración de solución de NaOH 0.1 M para la titulación del TPA.....	82
Cuadro 15. Mediciones realizadas durante la titulación de las muestras de sólidos recuperados para determinar su pureza	83
Cuadro 16. Retención de PET en cada plato utilizado en el tamizado	85
Cuadro 17. Datos calculados para la comparación de combinaciones de temperatura y relación base-polímero	96
Cuadro 18. Datos calculados para la comparación de tiempos de reacción para la condición seleccionada que brindó el mayor rendimiento	97
Cuadro 19. Datos calculados para los grados de polimerización de las distintas combinaciones de temperatura y relación base-polímero.....	99
Cuadro 20. Datos calculados para los grados de polimerización según los tiempos de reacción para la condición seleccionada que brindó el mayor rendimiento	100
Cuadro 21. Promedio, desviación estándar y coeficiente de variación para el rendimiento de recuperación de sólidos de las distintas combinaciones de temperatura y relación base-polímero estudiadas	102

Cuadro 22. Promedio, desviación estándar y coeficiente de variación para el rendimiento corregido por TPA de las combinaciones de temperatura y relación base-polímero estudiadas	102
Cuadro 23. Promedio, desviación estándar y coeficiente de variación para el grado de polimerización de las combinaciones de temperatura y relación base-polímero estudiadas	103
Cuadro 24. Promedio, desviación estándar y coeficiente de variación para la conversión del PET de los distintos tiempos de reacción para la condición seleccionada que brindó el mayor rendimiento.....	104
Cuadro 25. Promedio, desviación estándar y coeficiente de variación para el rendimiento de recuperación de sólidos de los distintos tiempos de reacción para la condición seleccionada que brindó el mayor rendimiento	105
Cuadro 26. Promedio, desviación estándar y coeficiente de variación para el rendimiento corregido por TPA de los distintos tiempos de reacción para la condición seleccionada que brindó el mayor rendimiento	105
Cuadro 27. Promedio, desviación estándar y coeficiente de variación para el grado de polimerización a distintos tiempos de reacción para la condición seleccionada que brindó el mayor rendimiento.....	106
Cuadro 28. Efecto estandarizado de cada factor para completar el Pareto de los rendimientos de recuperación de sólidos.....	106
Cuadro 29. Efecto estandarizado de cada factor para completar el Pareto de los rendimientos corregidos por TPA.....	107
Cuadro 30. Datos calculados de la tasa de cambio del rendimiento de recuperación de sólidos en función del tiempo	107
Cuadro 31. Datos calculados de la tasa de cambio del rendimiento corregido por TPA en función del tiempo	108
Cuadro 32. Datos calculados de la tasa de cambio de la conversión de PET en función del tiempo	108
Cuadro 33. Datos calculados para completar el análisis costo-beneficio de las distintas combinaciones de temperatura y relación base-polímero.....	109
Cuadro 34. Datos calculados para completar el análisis costo-beneficio de la reacción en función del tiempo para la condición seleccionada que brindó el mayor rendimiento	110
Cuadro 35. Datos de la estufa eléctrica utilizada para el calentamiento de la reacción	119
Cuadro 36. Datos de la centrífuga utilizada para separa el TPA sólido del medio	120
Cuadro 37. Datos del secador utilizado para secar las muestras de TPA.....	121
Cuadro 38. Datos del espectrofotómetro FTIR utilizado para analizar las muestras sólidas	121
Cuadro 39. Datos del UATR utilizado con el espectrofotómetro FTIR.....	122

LISTA DE FIGURAS

Figura 1. Tipos de esqueletos para los polímeros.....	7
Figura 2. Reacción de glicólisis de PET.....	19
Figura 3. Reacción de metanólisis de PET.....	20
Figura 4. Reacción de aminólisis de PET.....	21
Figura 5. Reacción de la hidrólisis alcalina de PET.....	23
Figura 6. Espectro FTIR de TPA estándar y reciclado.....	33
Figura 7. Sistema utilizado para la hidrólisis alcalina de PET.....	36
Figura 8. Sistema para la titulación del TPA resultante.....	40
Figura 9. Resumen de metodología experimental completa.....	41
Figura 10. Parte 1 del balance de masa y energía del proceso.....	95
Figura 11. Parte 2 del balance de masa y energía del proceso.....	95
Figura 12. Espectro FTIR de la muestra de sólidos recuperados a las condiciones de 70 °C, relación NaOH:PET de 0.70 g/g y 60 minutos de reacción.....	111
Figura 13. Espectro FTIR de la muestra de sólidos recuperados a las condiciones de 70 °C, relación NaOH:PET de 0.85 g/g y 60 minutos de reacción.....	112
Figura 14. Espectro FTIR de la muestra de sólidos recuperados a las condiciones de 70 °C, relación NaOH:PET de 1.0 g/g y 60 minutos de reacción.....	112
Figura 15. Espectro FTIR de la muestra de sólidos recuperados a las condiciones de 75 °C, relación NaOH:PET de 0.70 g/g y 60 minutos de reacción.....	113
Figura 16. Espectro FTIR de la muestra de sólidos recuperados a las condiciones de 75 °C, relación NaOH:PET de 0.85 g/g y 60 minutos de reacción.....	114
Figura 17. Espectro FTIR de la muestra de sólidos recuperados a las condiciones de 75 °C, relación NaOH:PET de 1.0 g/g y 60 minutos de reacción.....	114
Figura 18. Espectro FTIR de la muestra de sólidos recuperados a las condiciones de 80 °C, relación NaOH:PET de 0.70 g/g y 60 minutos de reacción.....	115
Figura 19. Espectro FTIR de la muestra de sólidos recuperados a las condiciones de 80 °C, relación NaOH:PET de 0.85 g/g y 60 minutos de reacción.....	116
Figura 20. Espectro FTIR de la muestra de sólidos recuperados a las condiciones de 80 °C, relación NaOH:PET de 1.0 g/g y 60 minutos de reacción.....	116
Figura 21. Espectro FTIR de la muestra de sólidos recuperados a las condiciones de 80 °C, relación NaOH:PET de 1.0 g/g y 30 minutos de reacción.....	117
Figura 22. Espectro FTIR de la muestra de sólidos recuperados a las condiciones de 80 °C, relación NaOH:PET de 1.0 g/g y 120 minutos de reacción.....	118
Figura 23. Espectro FTIR de la muestra de sólidos recuperados a las condiciones de 80 °C, relación NaOH:PET de 1.0 g/g y 180 minutos de reacción.....	118
Figura 24. Espectro FTIR de la muestra de sólidos recuperados a las condiciones de 80 °C, relación NaOH:PET de 1.0 g/g y 240 minutos de reacción.....	119
Figura 25. Hoja de datos de producto de resina de PET usada para la producción de botellas de agua.....	123
Figura 26. PET previo para triturar.....	144
Figura 27. PET luego de la trituración.....	144
Figura 28. Sistema empleado para llevar a cabo al reacción a tiempos prolongados.....	145
Figura 29. Fase líquida después de la hidrólisis alcalina de PET.....	145
Figura 30. TPA precipitado después de la hidrólisis alcalina de PET.....	146

Figura 31. Resultado de la reacción de la hidrólisis alcalina de PET sin sedimentar	146
Figura 32. Resultado de la reacción de la hidrólisis alcalina de PET sedimentada.....	147
Figura 33. Preparación de prueba a centrifugar en tubo Eppendorf.....	147
Figura 34. Resultado de la centrifugación del TPA para remover la fase líquida ácida	148
Figura 35. Secado de muestras de TPA y PET sólido sin reaccionar.....	148
Figura 36. TPA obtenido luego del secado.....	149
Figura 37. TPA seco triturado para la titulación	149
Figura 38. Titulación del TPA previo a llegar al punto de viraje.....	150
Figura 39. Titulación del TPA pasado el punto de viraje.....	150

LISTA DE GRÁFICAS

Gráfica 1. Porcentaje de manufactura de PET mundial por región, 2017-2018.....	12
Gráfica 2. Tamaño del mercado de PET mundial por año, 2024-2032	13
Gráfica 3. Rendimiento de recuperación de sólidos tras la hidrólisis alcalina de PET en función de temperatura y relación NaOH:PET.....	44
Gráfica 4. Tendencia del rendimiento de recuperación de sólidos tras la hidrólisis alcalina de PET en función de la temperatura para cada relación NaOH:PET	45
Gráfica 5. Diagrama de Pareto de efectos estandarizados para los rendimientos de recuperación de sólidos tras la hidrólisis alcalina de PET.....	48
Gráfica 6. Rendimiento corregido por contenido de TPA en los sólidos obtenidos en función de temperatura y relación NaOH:PET.....	49
Gráfica 7. Tendencia del rendimiento corregido por contenido de TPA en los sólidos obtenidos en función de la temperatura para cada relación NaOH:PET	50
Gráfica 8. Grado de polimerización del producto en función de la temperatura de reacción y relación NaOH:PET.....	51
Gráfica 9. Diagrama de Pareto de efectos estandarizados para los rendimientos corregidos por contenido de TPA en los sólidos obtenidos	53
Gráfica 10. Rendimientos de recuperación de sólidos tras la hidrólisis alcalina de PET en función del tiempo	55
Gráfica 11. Tasa de cambio del rendimiento de recuperación de sólidos tras la hidrólisis alcalina de PET en función del tiempo	56
Gráfica 12. Rendimiento corregido por contenido de TPA en los sólidos obtenidos en función del tiempo	57
Gráfica 13. Tasa de cambio del rendimiento corregido por contenido de TPA en los sólidos obtenidos en función del tiempo.....	58
Gráfica 14. Conversión del PET en función del tiempo.....	59
Gráfica 15. Tasa de cambio de la conversión del PET en función del tiempo	60
Gráfica 16. Grado de polimerización del producto en función del tiempo	61

LISTA DE ECUACIONES

Ecuación 1. Pureza de muestra de TPA.....	26
Ecuación 2. Rendimiento de sólidos recuperados	26
Ecuación 3. Rendimiento corregido por TPA	26
Ecuación 4. Conversión del PET.....	27
Ecuación 5. Valor ácido (AV) de muestra de TPA	27
Ecuación 6. Peso equivalente ácido (EW) de la muestra de TPA	28
Ecuación 7. Masa molar promedio de la muestra de sólidos.....	28
Ecuación 8. Grado de polimerización de la muestra de sólidos	28
Ecuación 9. Balance de masa para sistema sin acumulación	31
Ecuación 10. Balance de energía de un sistema.	31
Ecuación 11. Promedio de valores	92
Ecuación 12. Desviación estándar para un conjunto de datos.....	92
Ecuación 13. Propagación de errores por multiplicación y división	93
Ecuación 14. Fórmula del estadístico F.....	93
Ecuación 15. Prueba Q de Dixon.....	94

LISTA DE CÁLCULOS

Cálculo 1. Conversión de PET	85
Cálculo 2. Determinación de pureza de muestra de sólidos de TPA.....	86
Cálculo 3. Rendimiento de sólidos recuperados con TPA	86
Cálculo 4. Rendimiento corregido por TPA haciendo uso de la pureza.....	87
Cálculo 5. Grado de polimerización promedio de la muestra de sólidos con TPA.....	87
Cálculo 6. Tasa de cambio de la conversión del PET a un tiempo determinado.....	88
Cálculo 7. Determinación del Beneficio/Costo de una combinación de condiciones de reacción.....	88
Cálculo 8. Balance de masa y energía	90
Cálculo 9. Media aritmética utilizada.....	91
Cálculo 10. Desviación estándar de valores	92
Cálculo 11. Incertidumbre de cálculos que involucran multiplicaciones y divisiones.....	93
Cálculo 12. Análisis de varianza (ANOVA)	93
Cálculo 13. Prueba Q.....	93

Resumen

Se evaluó la hidrólisis alcalina de tereftalato de polietileno (PET) para sintetizar ácido tereftálico (TPA) a escala laboratorio, con el objetivo de identificar condiciones operativas, una ventana de tiempo donde la conversión y rendimiento se estabilicen y el desempeño económico del proceso a escala laboratorio. Primero se estudió el efecto de la temperatura (70, 75, 80 °C) y la relación NaOH:PET (0.70, 0.85, 1.00 g/g). El análisis estadístico mostró a la temperatura como el factor más significativo sobre los rendimientos, mientras que la relación base/polímero presentó un efecto significativo pero menor; la interacción entre ambos factores no fue significativa en el rango evaluado. Con base en ello se seleccionó 80 °C y NaOH:PET = 1.00 g/g para el estudio de tiempo. El seguimiento de la reacción en función del tiempo demostró una fase inicial entre 0 y 60 minutos donde la tasa de cambio fue mayor, seguido de una parte con ganancias marginales decrecientes, hasta que se aproximan a una meseta. Esto sugiere que el costo incremental de operación por prolongar la reacción más allá de cierto umbral puede llegar a aportar mejoras pequeñas frente a los costos asociados. Esto fue confirmado por el análisis costo-beneficio, que identificó como punto de operación favorable en torno a los 180 minutos. De igual forma, al comparar el efecto de las temperaturas y relación base-polímero sobre el Beneficio/Costo, se reconoció que a 80 °C y 1.00 g/g de NaOH:PET se obtuvo el mejor resultado. Se concluye que dicha condición y un tiempo de referencia de 180 minutos constituye un compromiso entre la obtención de TPA y sus beneficios económicos. Como recomendación, se propone validar esta ventana de operación en lotes de mayor escala, a fin de evaluar su influencia sobre el Beneficio/Costo.

Abstract

The alkaline hydrolysis of polyethylene terephthalate (PET) was evaluated to synthesize terephthalic acid (TPA) at laboratory scale, with the objective of identifying operating conditions, a time window where conversion and yield stabilize, and the economic performance of the process at laboratory scale. First, the effect of temperature (70, 75, 80 °C) and the NaOH:PET ratio (0.70, 0.85, 1.00 g/g) was studied. The statistical analysis showed temperature as the most significant factor regarding yields, while the base/polymer ratio showed a significant but smaller effect; the interaction between both factors was not significant within the evaluated range. Based on this, 80 °C and NaOH:PET = 1.00 g/g were selected for the time study. Monitoring the reaction as a function of time showed an initial phase between 0 and 60 minutes where the rate of change was higher, followed by a section with decreasing marginal gains, until approaching a plateau. This suggests that the incremental operating cost of prolonging the reaction beyond a certain threshold may provide only small improvements compared to the associated costs. This was confirmed by the cost-benefit analysis, which identified a favorable operating point around 180 minutes. Likewise, when comparing the effect of temperatures and the base-to-polymer ratio on the Benefit/Cost indicator, it was recognized that at 80 °C and 1.00 g/g NaOH:PET the best result was obtained. It is concluded that this condition and a reference time of 180 minutes constitute a compromise between obtaining TPA and its economic benefits. As a recommendation, it is proposed to validate this operating window in larger-scale batches to evaluate its influence on the Benefit/Cost.

I. Introducción

Los polímeros, materiales formados por cadenas muy largas de unidades repetidas (monómeros), se han vuelto esenciales para la vida cotidiana moderna por su ligereza, alta resistencia y bajo costo. Estas ventajas son las responsables de que se usen masivamente, en varias ocasiones, en un solo uso antes de ser desechados. En 2019 el mundo produjo alrededor de 460 millones de toneladas de plásticos y solo el 9% de los residuos plásticos se recicló efectivamente; la mitad terminó en rellenos sanitarios y el resto fue incinerado o tirado en vertederos no controlados (OECD, 2022).

Dentro de esta familia, el tereftalato de polietileno (PET) destaca por su transparencia, barrera al oxígeno y estabilidad térmica; estas propiedades lo han convertido en el estándar mundial para envases de bebidas e incluso para la producción de fibras textiles (Abedsoltan, 2023). En Europa, la recolección de PET alcanzó hasta un 60% del total en 2022 (75% de las botellas fueron recolectadas), un incremento del 45% de dos años anteriores. De igual forma, se evidenció un incremento en el PET reciclado siendo utilizado en botellas, pues en promedio una botella contendría 24% de material reciclado (7% más que dos años atrás). Estas cifras ilustran tanto el progreso que se ha realizado en otras partes del mundo, como la brecha por cerrar para una economía circular del PET (UNESDA, 2024).

En la actualidad, el reciclaje del PET ha sido en su mayoría por métodos mecánicos que incluyen triturar, lavar y extruir. Aunque este proceso ha demostrado ser de utilidad, el método tiene la desventaja de degradar el material, lo cual limita la calidad del producto y las aplicaciones en las que se podría utilizar (Bezeraj et al., 2025). El reciclaje químico ofrece otras rutas que compensa por lo que no se puede cumplir con el mecánico. Después de todo, este proceso puede reciclar material contaminado o residuos degradados de PET mientras se reducen las emisiones en hasta un 50% de la producción de PET virgen. Esto lo logra regresando las cadenas poliméricas a sus monómeros, los cuales pueden ser purificados y reusados en resinas de grado botella (Babaei et al., 2024). Entre las posibles rutas se encuentra la glicólisis, aminólisis, metanólisis y la hidrólisis.

La hidrólisis se puede operar en medio ácido, alcalino o neutro. Cada una de estas tienen sus propias ventajas, por ejemplo, la neutra evita sales inorgánicas no deseadas en subproductos, pero las otras variantes facilitan la purificación de los monómeros obtenidos.

En este trabajo se propone evaluar la depolimerización del PET por el método de hidrólisis alcalina para la obtención de ácido tereftálico (TPA); uno de los monómeros del PET. Se eligió esta ruta pues brinda producto de mayor pureza que el método neutro, mientras que las condiciones ácidas requeridas para esa ruta resultan en la corrosión del equipo de reacción (Babaei et al., 2024).

II. Justificación

El reciclaje químico de Tereftalato de Polietileno (PET) por medio de la hidrólisis alcalina es una de las soluciones propuestas para mitigar los efectos de la creciente cantidad de desechos plásticos. Principalmente tomando en cuenta que bastante del manejo de estos alrededor del mundo se basa en su incineración o su envío a vertederos que crean problemas ambientales (Chen & Hu, 2023). En Guatemala en el 2019, el INE calculó que entre los 89 municipios del país que reportaron la cantidad de residuos sólidos domiciliarios producidos y sus tipos, en promedio, el 17% eran polímeros; esto equivaldría a más de 22,000 toneladas en un solo trimestre (INE, 2021). El impacto de estos se evidencia en estudios que describen la contaminación del Lago de Amatitlán, Lago de Atitlán, Lago Petén Itzá, en ríos y playas donde se han encontrado microplásticos tanto en los cuerpos acuáticos como en la fauna marina que se comercializa (Arrecis, 2021). A pesar de lo previamente mencionado, tan solo el 4.5% de este es reciclado o convertido en compost en el país (González, 2019).

El proceso de la hidrólisis alcalina, por otra parte, consiste en la descomposición del PET para conseguir su monómero original: ácido tereftálico (TPA). De esta forma se puede reincorporar al proceso de producción para hacer nuevos plásticos o productos químicos y así reducir la dependencia de fuentes vírgenes del polímero y la cantidad de desechos. Varios de los métodos de reciclaje químico cuentan con preocupaciones ambientales por el uso de solventes orgánicos o catalizadores metálicos; la técnica no hace uso de estos por lo que se ha considerado una posible solución a la problemática (Abedsoltan, 2023). Asimismo, cabe recalcar que en la actualidad no existen plantas industriales que lleven a cabo este proceso (Barredo et al., 2023).

Existen 3 métodos para la hidrólisis: neutra, ácida y alcalina. La primera con solo agua termina en mayores impurezas en el producto, aparte de los altos costos asociados a los parámetros en la que se lleva a cabo; por otra parte, a pH bajos puede haber considerable corrosión en reactores y los altos volúmenes de ácido y etilenglicol deben pasar por una destilación costosa (Abedsoltan, 2023). Se busca analizar la última opción por su mayor velocidad de reacción a condiciones menos drásticas de presión y temperatura. Asimismo, termina en resultados de alta pureza que son de interés para las empresas fabricantes de PET, demostrando su potencial significativo en el entorno del reciclaje (Bertolotti et al., 2005).

Cabe resaltar que este trabajo se enfoca únicamente en la etapa de obtención del TPA, sin abordar procesos posteriores como su reutilización en la síntesis de nuevos polímeros. Asimismo, debido a la limitada disponibilidad de información local sobre reciclaje químico de PET en Guatemala, esta propuesta también busca aportar datos experimentales que puedan servir como base para futuras investigaciones y facilitar el potencial desarrollo de soluciones sostenibles en el país. Con este trabajo se pretende dejar un antecedente técnico sobre los rendimientos obtenidos bajo diferentes condiciones de reacción (temperatura y proporción base-polímero), contribuyendo así al análisis de su viabilidad y posibles rutas de mejora.

III. Objetivos

A. Objetivo general

Evaluar la síntesis de Ácido Tereftálico (TPA) por hidrólisis alcalina a partir de Tereftalato de Polietileno (PET) para determinar los rendimientos generados en la reacción y analizarlos económicamente a nivel laboratorio

B. Objetivos específicos

1. Realizar la hidrólisis alcalina de PET variando la temperatura y proporción base-polímero para determinar la condición que maximice la síntesis de TPA según las condiciones elegidas.
2. Analizar la conversión de TPA en función del tiempo bajo las condiciones que generaron el mayor rendimiento para determinar los intervalos en los que la conversión presenta menor variación.
3. Realizar un análisis costo beneficio de la obtención de TPA para determinar la combinación temperatura y proporción base-polímero que ofrece mayores ventajas económicas a escala laboratorio.

IV. Marco teórico

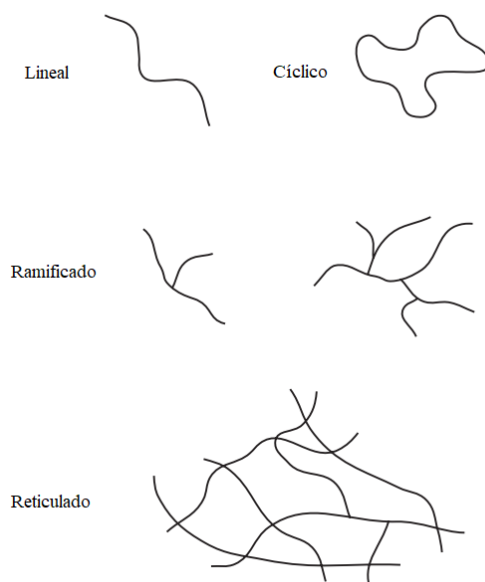
A. Polímeros

1. Definición de polímero

Un polímero es una sustancia constituida por moléculas con largas secuencias de átomos unidas principalmente por enlaces covalentes; dichas cadenas pueden contener desde centenares hasta decenas de miles de unidades repetitivas (meros). La longitud de la cadena, o grado de polimerización, confiere al material propiedades únicas (viscoelasticidad, transición vítrea, cristalinidad) que lo distinguen de los compuestos de baja masa molar y explican su importancia tecnológica. (Young & Lovell, 2011).

La arquitectura de la cadena (lineal, ramificada, reticulada o cíclica) gobierna su procesabilidad y desempeño mecánico. Por ejemplo, la linealidad eleva el punto de fusión en fibras en comparación a los ramificados. Los polímeros reticulados, no suelen derretirse al ser sometidos a calor ni se disuelven, pero se pueden hinchar al ser sometidos a solventes compatibles. Los cíclicos no cuentan con extremos, lo cual puede resultar en una viscosidad más baja al evitar el enredamiento entre las cadenas y mayor estabilidad química. Así la combinación de masa molar elevada y estructura tridimensional explica la importancia de los polímeros en aplicaciones cotidianas e industriales. Finalmente, la clasificación en homopolímeros o copolímeros se basa en la identidad química de los meros. Los primeros se refieren a aquellas cadenas que se pueden representar por una única unidad repetitiva. Los copolímeros derivan de más de una especie de monómero, los cuales pueden estar arreglados en distintas combinaciones (aleatorias, alternantes, por bloques, etc.) (Young & Lovell, 2011).

Figura 1. Tipos de esqueletos para los polímeros



Nota. Young & Lovell, 2011.

Finalmente, está la forma más común de separar los tipos de polímeros: termoplásticos, elastómeros y termoestables. Los primeros se ablandan al calentarse y pueden moldearse repetidamente sin sufrir cambios químicos significativos; entre ellos destacan el polietileno, el polipropileno y el policarbonato, ampliamente usados en envases, tuberías y componentes automotrices. Las subdivisiones de estos son los amorfos, con estructura más desordenadas, y los cristalinos, con una estructura ordenada de cadenas molecular y mayor rigidez y resistencia a la deformación; el PET se considera lineal semicristalino. Por otro lado, los termoestables forman redes tridimensionales irreversibles al curarse por calor o agentes químicos, lo que les brinda gran rigidez, estabilidad térmica y resistencia química; algunos ejemplos incluyen la baquelita y resinas epóxicas, utilizados en recubrimientos, adhesivos estructurales y laminados eléctricos. Los elastómeros son polímeros parcialmente reticulados que presentan alta elasticidad y capacidad de recuperación después de una deformación, como ocurre con el caucho natural, el SBR (caucho estireno-butadieno) y la silicona; estos son ideales para sellos, neumáticos y dispositivos médicos. La estructura molecular, el grado de entrecruzamiento y las interacciones intermoleculares determinan las

diferencias clave en comportamiento mecánico y térmico entre estos tres grupos (Young & Lovell, 2011).

2. Definición de oligómeros

Un oligómero es una macromolécula de tamaño intermedio, usualmente 2 a 30 unidades repetitivas, cuya masa molar típicamente oscila entre los 500 y 3,000 g/mol. Se obtiene deteniendo la reacción de polimerización en una “etapa oligomérica” mediante reactivos monofuncionales que bloquean los extremos de cadena, lo que permite aislar productos de baja viscosidad, pero aún con características de cadena larga. A diferencia de los polímeros de alto peso molecular, los oligómeros exhiben menor entrelazamiento, procesan como líquidos o ceras y conservan grupos terminales reactivos; por ello se emplean como prepolímeros en recubrimientos, adhesivos y sistemas de curado térmico. Además, su funcionalidad terminal permite diseñar propiedades específicas, como hidrofobicidad, capacidad de entrecruzamiento o compatibilización, que facilitan su integración en formulaciones multicomponente (O dian, 2004).

3. Uso de oligómeros y polímeros

Los polímeros dominan mercados de gran volumen gracias a su balance entre costo y propiedad: envases flexibles en polietileno de baja densidad, botellas de PET, aislantes eléctricos en PTFE y tuberías de PVC para edificación son de los ejemplos más conocidos (Billmeyer, 1984). En el sector construcción, el PVC aporta rigidez y resistencia ambiental a marcos de ventana y recubrimientos de paredes, mientras que en la industria del transporte se emplean elastómeros sintéticos para neumáticos y sellos. Los elastómeros, al estar estirados, presentan propiedades parecidas a aquellos polímeros cristalinos como su alta fuerza de tensión. Por otro lado, las fibras de poliéster y poliamida ofrecen alta tenacidad y estabilidad térmica a textiles técnicos; estas sí requieren de una estructura típicamente cristalina (generalmente, ramificaciones son perjudiciales para fibras). Estos usos se sostienen en la capacidad de moldear, extruir o hilar polímeros a gran escala con ciclos energéticos relativamente bajos. Asimismo, la posibilidad de reciclar ciertos termoplásticos refuerza su competitividad frente a materiales tradicionales.

En aplicaciones de ingeniería, los termoplásticos semicristalinos como el polibutileno exhiben resistencia al estrés ambiental y al desgaste, lo que justificaba su empleo en tuberías

de agua caliente y componentes expuestos a abrasión (ahora han sido sustituidas por el CPVC en cuanto a la opción polimérica para tuberías). Copolímeros de etileno con acrilato o vinilacetato reducen la cristalinidad, incrementan la tenacidad y permiten la fabricación de películas flexibles con excelente sellado térmico. Las fibras cloradas tipo vinyon, derivadas de copolímeros de cloruro de vinilo, aportan resistencia química y comportamiento ignífugo a textiles especiales. En electrónica y óptica, polímeros fluorados y poliimidas estabilizadas (PTFE y FEP) ofrecen constantes dieléctricas bajas y altas temperaturas de operación, habilitando cables de datos y circuitos flexibles de alto rendimiento. El diseño molecular de los polímeros permite adaptar las propiedades mecánicas, barrera y térmicas a los requisitos de cada sector (Billmeyer, 1984).

4. Depolimerización

La depolimerización cuenta con dos rutas principales: degradación aleatoria, donde se da una ruptura de cadena en sitios distribuidos estadísticamente generando un amplio espectro de fragmentos, y la depolimerización en cadena, proceso radicalario que libera unidades monoméricas sucesivamente a partir de un extremo o enlace débil (esencialmente, el opuesto a la polimerización en cadena). En la primera, el peso molecular promedio cae drásticamente con el tiempo, mientras que en la segunda puede permanecer casi constante. Los productos de las degradaciones aleatorias suelen constar de una mezcla dispersa de fragmentos de variables pesos moleculares, mientras que la depolimerización en cadena resulta en grandes cantidades de monómeros (Billmeyer, 1984).

En la industria, la depolimerización puede brindar beneficios, así como desventajas. Por ejemplo, hace posible el reciclaje químico de plásticos, pero también limita su estabilidad térmica. En el contexto de sostenibilidad, los estudios cinéticos y termodinámicos de la depolimerización dan lugar a que se realicen diseños de rutas de desmonomerización selectiva, generando materias primas circulares sin comprometer el desempeño de estos. Por esta razón, la comprensión detallada de los mecanismos se ha convertido en un punto de importancia tanto para la economía circular de plásticos como para la ingeniería de polímeros (Odian, 2004). De igual forma, se reconoce el impacto de variables como la temperatura en el rompimiento de enlaces éster para la depolimerización del PET, al promover la deterioración, por el modelo de Arrhenius, lo cual suele resultar en especies más cortas (Plota & Masek, 2020).

B. Tereftalato de Polietileno (PET)

1. Propiedades químicas y físicas

El polietileno tereftalato (PET) es un poliéster termoplástico semicristalino compuesto por unidades repetitivas de etilenglicol y ácido tereftálico unidas mediante enlaces éster (el monómero se puede representar por: $C_{10}H_8O_4$). Esta estructura le da al material una alta resistencia mecánica, estabilidad dimensional y propiedades de barrera contra gases como oxígeno y dióxido de carbono, lo que lo convierte en uno de los polímeros más utilizados para envases de bebidas y alimentos a nivel (Billmeyer, 1984).

Su temperatura de transición vítrea (T_g) se sitúa entre 65–80 °C (es decir, la temperatura a la que un polímero pasa de ser duro y similar al vidrio a un estado blando y gomoso) dependiendo de su grado de cristalinidad, y su temperatura de fusión (T_m) varía entre 240–270 °C dependiendo de la cristalinidad, nuevamente. Al tratarse específicamente de PET amorfo, usado para botellas plásticas, la T_g es de 65°C. El peso molecular del PET, así como las propiedades previamente mencionadas, también se presenta en rangos pues dependerá del grado de polimerización del polímero en cuestión; este puede encontrarse entre 10 – 50 kg/mol donde valores cercanos a 10 – 25 kg/mol pertenece al PET para aplicaciones textiles mientras que 25 – 31 kg/mol para botellas. Es prácticamente insoluble en agua y es resistente a la mayoría de solventes orgánicos a temperatura ambiente, aunque puede sufrir degradación hidrolítica en medios ácidos o básicos concentrados y a alta temperatura, esto se suele aprovechar en procesos de reciclaje químico (SpecialChem, 2025).

2. Usos y aplicaciones

El PET destaca por su versatilidad, lo que le ha permitido destacar en múltiples sectores económicos aparte del de los envases de bebidas. Su flexibilidad, ligereza, resistencia química y térmica, así como su resistencia a la abrasión y a la rotura, lo hacen ideal para recipientes de alimentos y bebidas, ya que no solo permiten conservar el producto en condiciones de frío o hermeticidad, sino también ofrece transparencia, una característica importante que influye en la decisión de compra de consumidores (Young & Lovell, 2011). En la industria alimentaria, el PET se utiliza masivamente en bandejas, frascos, tupperes, vasos y botellas, pues protege los alimentos de contaminantes externos y facilita el transporte

debido a su bajo peso, reduciendo además costos de producción y consumo energético frente a otros materiales.

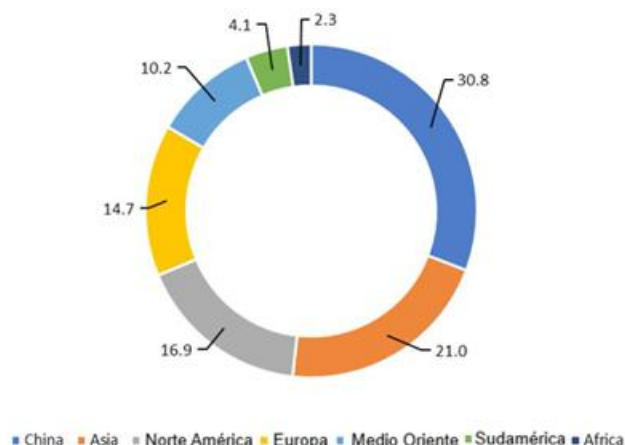
Más allá de la industria alimentario, el PET se ha posicionado en el sector de cosméticos y farmacéutica, donde se requieren envases que garanticen la estabilidad de productos sensibles como aceites medicinales, jarabes, soluciones líquidas o polvos finos. Su resistencia a condiciones extremas, incluyendo pH bajos o temperaturas menores a la ambiente, lo convierte en un material capaz de preservar la calidad y seguridad de los productos (RepetCo, 2022).

Finalmente, en la industria automotriz, el PET ha reemplazado progresivamente materiales tradicionales como el acero en ciertos componentes, después de todo, proporcionan reducción de peso, mejorando la aerodinámica y contribuyendo a una mayor eficiencia energética. Asimismo, se utiliza en ciertos acabados interiores por sus cualidades de aislamiento acústico y durabilidad. Estos ejemplos demuestran cómo la adaptabilidad del PET lo ha convertido en un polímero de suma importancia para sectores tan diversos como la alimentación, la salud, la moda y el transporte, fortaleciendo su papel tanto como material de empaque, así como insumo industrial que aporta al valor final de los productos donde se utiliza (RepetCo, 2022).

3. Producción mundial de PET

La producción y demanda global de PET mantienen un crecimiento constante, impulsado por la producción de bebidas y alimentos, láminas/films técnicos y por el enorme volumen de fibras de poliéster (químicamente PET y poliamidas) en textil. El mercado de resina PET para envases/films, presenta estimaciones que sitúan la producción mundial cerca de 28 millones de toneladas en 2024, con China como principal productor (aproximadamente 31% de la producción total) y Asia-Pacífico como la región dominante tanto en capacidad como consumo de estos productos; de igual forma, Norte América y Europa cuentan con posiciones relevantes en cuanto a botellas de grado alimenticio y films siendo los segundos y terceros productores regionales respectivamente (Jovanović, 2025). Asimismo, si se observa el conjunto de fibras (poliéster textil), Textile Exchange reporta que el poliéster representó 57% de la producción global de fibras y creció de 63 Mt en el 2022 a un rango de 71–75 Mt el siguiente año; esto demuestra el peso que tiene el poliéster en cuanto a la producción y venta de PET mundialmente (Textile Exchange, 2024).

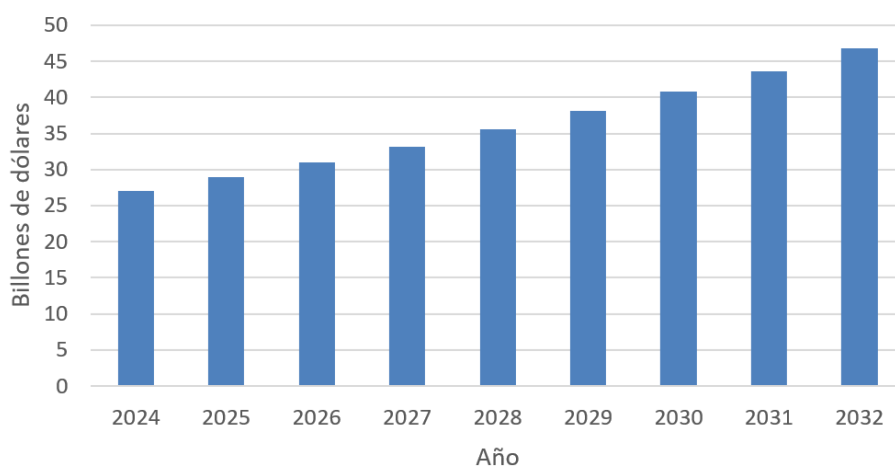
Gráfica 1. Porcentaje de manufactura de PET mundial por región, 2017-2018



Nota. Adroit Market Research, 2022.

Otras estimaciones de mercado colocan el tamaño del mercado de PET en USD 26.99 mil millones para el 2024 con distintas previsiones de USD 46.79 mil millones para 2032; se estima un crecimiento anual compuesto del 7.12% (Data Bridge Market Research, 2025). Este mismo estudio también destaca el liderazgo de Asia-Pacífico, el empuje que hay en el mercado del *packaging* sostenible y una lista de empresas globales como Indorama Ventures, Alpek, LOTTE, Far Eastern New Century, Reliance, SABIC, entre otros. Estas cifras de valor son coherentes con la propulsión observada en el crecimiento del mercado de bebidas embotelladas, bienes de consumo y textiles, así como la expansión de plantas de r-PET (PET reciclado) y proyectos bio-PET (Data Bridge Market Research, 2025).

Gráfica 2. Tamaño del mercado de PET mundial por año, 2024-2032



Nota. Data Bridge Market Research, 2025.

En Noroeste de Europa, S&P Global evaluó el precio del PET virgen en €980/tonelada para junio de 2025; un incremento de 10 euros por tonelada en tan solo un mes. Es importante notar la diferencia en precios entre el PET virgen y el r-PET. De junio del 2024 a abril de 2025, el precio de la tonelada de PET virgen se mantuvo sobre los €1000; por otra parte, en ese mismo período, el r-PET se ha mantenido sobre los €1500 por tonelada (S&P Global, 2025).

A corto y medio plazo, el mercado de PET se ve condicionado por la estacionalidad de las bebidas que impulsan los picos en los precios. La volatilidad de la cadena de valor del poliéster es otra tendencia que afecta enormemente el mercado, así como normativas según cada país que fomenta el reciclado. Ligado a esta última se encuentra la competencia con el r-PET y la madurez de las tecnologías de reciclaje químico (Data Bridge Market Research, 2025; S&P Global, 2025).

4. Uso nacional de PET

En Guatemala, el PET es el polímero más utilizado en envases para bebidas, alimentos y productos de consumo masivo. De acuerdo con la Cámara de Industria de Guatemala, el país consume aproximadamente 32,000 toneladas de envases de PET al año, principalmente en la industria de bebidas carbonatadas, agua y jugos. A nivel doméstico, se estima que más del 65% de las botellas de bebidas producidas en el país están hechas de PET.

En el sector textil, el PET reciclado (R-PET) ha incrementado su impacto ya que empresas locales transforman cerca de 5,000 toneladas anuales de PET usado en fibras para ropas y alfombras, siguiendo la tendencia de la moda sostenible (CIG, 2023).

El reciclaje de PET en Guatemala representa una importante oportunidad económica. AGEXPORT reporta que el país logra recuperar entre 12,000 y 15,000 toneladas de PET al año, gran parte de las cuales se exportan como hojuelas o pellets hacia Estados Unidos y Asia, debido a la limitada capacidad de reconversión local (AGEXPORT, 2023). De hecho, el PET reciclado se encuentra entre los 10 productos más exportados del sector de reciclaje, con ingresos que superan los USD 50 millones anuales, dinamizando economías locales y generando miles de empleos indirectos en la cadena de recolección y procesamiento.

A pesar de estos avances, la gestión de residuos de PET sigue siendo un desafío crítico en Guatemala. El Ministerio de Ambiente y Recursos Naturales (MARN) estima que el país genera 4,800 toneladas de residuos plásticos cada mes, de las cuales apenas un 6 % se recicla de forma efectiva (MARN, 2023). Estudios internacionales han identificado al río Las Vacas como uno de los mayores aportadores de plásticos al océano, descargando hasta 20,000 toneladas de residuos al año, gran parte compuesta por botellas y empaques de PET (El País, 2025). Esto ha motivado la implementación de proyectos como el Interceptor 006 de The Ocean Cleanup, que desde 2022 ha extraído cientos de toneladas de PET antes de que lleguen al mar Caribe, y ha impulsado a municipios como San Pedro La Laguna a prohibir los plásticos de un solo uso, reduciendo drásticamente el consumo de PET de un solo uso en la región

5. Problemas ambientales asociados a PET residual

El PET, como se ha mencionado, se caracteriza por su gran estabilidad química, lo cual, naturalmente, prolonga su estadía en el medio ambiente y puede mantenerse en este hasta por varios siglos. Durante su vida posconsumo, los envases de este polímero rara vez se degradan por completo, sino que se fragmentan en partículas más pequeñas denominadas como microplásticos. Estas partículas se dispersan ampliamente por su pequeño tamaño y han sido detectadas en agua potable, océanos, suelos agrícolas e incluso alimentos, lo que plantea riesgos tanto para la biodiversidad de los ecosistemas como para la salud humana (UNEP, 2022; NEMS, 2023). La acumulación de microplásticos provenientes de envases de

bebidas es particularmente relevante ya que representa una de las fuentes más visibles y persistentes de contaminación ambiental (Gleick, 2009).

Reforzando lo mencionado sobre los microplásticos, el informe de la Organización Mundial de la Salud (OMS) señala que se han detectado en una amplia gama de muestras de agua dulce y embotellada, con tamaños que varían desde menos de 1 μm hasta más de 5 mm. Estas partículas pueden liberar aditivos químicos que son contaminantes ambientales, lo que incrementa el impacto por sus posibles efectos tóxicos y genotóxicos en organismos vivos; después de todo, aparte de la presencia del polímero es importante notar los otros químicos que se pueden esparcir a través de estos. Aunque la evidencia sobre riesgos directos para la salud humana aún es limitada, la OMS advierte que la exposición crónica a microplásticos puede tener consecuencias a largo plazo, incluyendo inflamación, estrés oxidativo y alteraciones en el sistema inmunológico. En el caso de botellas de PET, estudios recientes han demostrado que su proceso de embotellado y de almacenamiento también pueden contribuir a la liberación de microplásticos en el agua, aparte del desecho de los mismos. Esto convierte al PET en una de las principales fuentes de exposición dietaria a estas partículas (World Health Organization, 2019).

Los análisis de ciclo de vida del PET han demostrado que, además de los residuos sólidos, este polímero genera impactos significativos en su producción y disposición final. En estudios se ha concluido que las botellas de PET conllevan altas demandas energéticas y emisiones de gases de efecto invernadero, particularmente en las etapas de producción de resina virgen y de incineración al final de su vida útil (Gironi & Piemonte, 2011). Cabe mencionar, que el utilizar material reciclado podría disminuir estas estadísticas. Benavides et al. (2018) encontraron que el uso de rPET puede reducir en más del 60 % las emisiones de CO₂ equivalente frente al PET virgen, además de disminuir la dependencia del petróleo como materia prima. Sin embargo, la tasa de reciclaje efectiva sigue siendo baja en muchos países, lo que limita estos beneficios y mantiene elevados los impactos ambientales del PET convencional.

En Guatemala, la gestión inadecuada de residuos y del PET ha empeorado los problemas de contaminación plástica. El río Motagua, que desemboca en el mar Caribe, se considera uno de los principales transportadores de residuos plásticos del mundo, con descargas estimadas en decenas de miles de toneladas por año al océano, gran parte

compuesta por materiales hechos de PET. Estas corrientes plásticas afectan ecosistemas marinos y costeros, donde la vida marina ingiere fragmentos de PET o se queda en los cuerpos acuáticos como residuos flotantes. Además, la incineración informal de plásticos en los vertederos no controlados del país produce emisiones tóxicas que contribuyen a la contaminación atmosférica y a problemas de salud pública en las comunidades cercanas. Todo lo mencionado resalta la urgencia de ampliar la infraestructura de recolección y la utilidad que puede brindar hacer lo mismo para el reciclaje, incentivando el uso de rPET como medida de mitigación de los efectos negativos ambientales y sociales que brinda esta problemática (Jaramillo, 2025; River Impact, 2024).

C. Métodos de reciclaje

1. Mecánica

El reciclaje mecánico es el método más empleado en la industria del reciclaje debido a su simplicidad. Este método consiste en recuperar los desechos plásticos sin modificar la estructura química del polímero, a través de procesos físicos. Estos incluyen: la clasificación, trituración, lavado, secado, extrusión y granulación. En el caso del PET, las botellas y empaques recolectados son primero separados por tipo de resina y color, asimismo, se eliminan cualquier tipo de metales y contaminantes que estén mezclados con estos. Seguidamente, el material residual se muele en hojuelas, las cuales se funden y pasan por un reproceso (como en una extrusora) y se convierte en lo conocido como rPET. Estos pellets resultantes, pueden pasar por las operaciones correspondientes según el uso que se le busca dar, por ejemplo, fibras textiles, láminas o incluso nuevos envases (Abedsoltan, 2023).

Aunque es el método más usado, sí cuenta con limitaciones que surgen de la degradación que presenta el material proporcionalmente a la cantidad de ciclos de fundido y enfriamiento por el que pasa. Dicho deterioro se observa gracias a la pérdida de propiedades mecánicas y la reducción del peso molecular. Además, la contaminación con otros polímeros, aditivos o restos orgánicos compromete la calidad final del rPET. Por esta razón, los productos de reciclaje mecánico se suelen utilizar para aplicaciones que brinden menor valor como para fibras de alfombras o materiales de construcción, en lugar de volverlo un envase de grado alimenticio (Abedsoltan, 2023).

2. Química

El reciclaje químico se considera por muchos como una alternativa prometedora para superar las limitaciones que el reciclaje mecánico presenta. A diferencia de este último, el polímero no se reprocesa numerosas veces, sino que se lleva a cabo una depolimerización de este hasta sus monómeros u oligómeros para producir material que tenga una calidad similar a la del material virgen. En este proceso, las cadenas del PET son rompen selectivamente a través de reacciones químicas, lo que permite sintetizar ácido tereftálico (TPA) y etilenglicol (EG), las materias primas originales para sintetizar PET nuevo (Bertolotti et al., 2005; Abedsoltan, 2023).

Existen dos grandes vías por las que se puede dar: pirólisis y solvólisis. La pirólisis consiste en calentar el PET en ausencia de oxígeno, a temperaturas en el rango de 370–700°C, lo cual resulta en mezclas de gases y aceites ricos en compuestos aromáticos. Este método se considera de gran utilidad para residuos muy contaminados. Es importante mencionar que esta ruta implica una degradación térmica severa de los compuestos, por lo que la mayoría del tiempo será un proceso de *downcycling* y no de recuperación de monómeros. Por otra parte, el solvólisis permite descomponer selectivamente el PET haciendo uso de un disolvente y, normalmente, un catalizador (Abedsoltan, 2023).

Dentro de la solvólisis, los procesos más estudiados incluyen glicólisis, metanólisis, aminólisis e hidrólisis, entre otros. Cada técnica emplea un agente reactivo diferente para romper los enlaces éster y se profundizará al respecto más adelante. Estas rutas ofrecen la ventaja de procesar flujo de PET mixto o que está degradado, aunque haya presencia de aditivos y copolímeros, lo cual aumenta su posible aplicabilidad industrial (Abedsoltan, 2023).

El reciclaje químico además permite el *upcycling* del PET, es decir, la obtención de productos con mayor valor agregado que el material original. Por ejemplo, ciertos procesos de alcoholólisis y aminólisis permiten obtener como resultado polímeros especiales o resinas con aplicaciones para la elaboración de recubrimientos y adhesivos. Esta flexibilidad de los métodos demuestra el porqué se da el creciente interés en la investigación y escalamiento de plantas piloto que hacen uso de las tecnologías; particularmente en Europa, Japón y Estados Unidos (Abedsoltan, 2023).

A pesar de todas las ventajas mencionadas, el reciclaje químico aún enfrenta desafíos relacionados con los costos de operación asociados, el consumo energético y los costos de los catalizadores. Asimismo, los procesos de separación y purificación de los monómeros resultantes hacen la operación considerablemente más costosa, sin embargo, se ha considerado que la integración a procesos de producción de PET virgen podría mejorar su viabilidad. Por esta razón, el reciclaje químico se considera un complemento al reciclaje mecánico, pero sí presenta potencial para convertirse en la estrategia principal de reciclaje en el mediano plazo (Bertolotti et al., 2005).

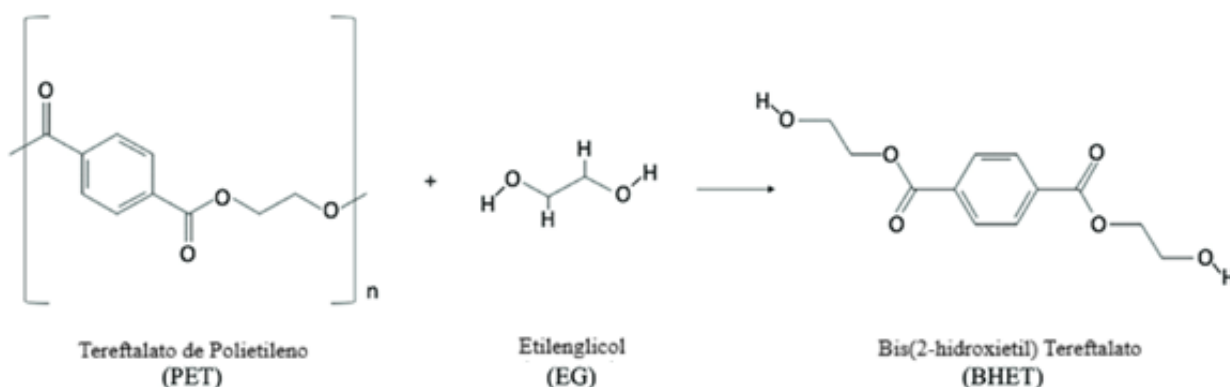
Finalmente, cabe destacar que la hidrólisis (ácida, neutra o alcalina) ha cobrado relevancia últimamente, al permitir recuperar TPA con alta pureza sin necesidad de solventes orgánicos. Esta ruta se considera especialmente atractiva ya que genera un monómero crítico para la economía circular del PET (Abedsoltan, 2023). De igual forma, se hace mención de que los productos de depolimerizaciones, como oligómeros, pueden servir como materia prima para procesos de repolimerización. Sin embargo, la calidad de estos productos dependerá directamente de la composición y pureza de los compuestos. También cabe mencionar que los oligómeros, a pesar de sus posibles utilidades en estos procesos, suelen ser descartados (Watson-Sanders & Dadmun, 2024; Wei et al., 2024).

D. Métodos de solvólisis

1. Glicólisis

La glicólisis es uno de los métodos de solvólisis más estudiados y aplicados en el reciclaje químico de PET. Este consiste en la reacción del polímero con etilenglicol (EG) en exceso, a temperaturas en un rango de 180 a 250°C y presión atmosférica, generalmente acompañado de catalizadores como el acetato de zinc, acetato de manganeso o compuestos de titanio (Bertolotti et al., 2005). Cabe mencionar que en algunos casos se ha reportado que emplear presiones de 2 a 5 bar puede mejorar la solubilidad de ciertos catalizadores y aditivos. La reacción consiste en el rompimiento de los enlaces éster del PET lo cual produce principalmente bis(2-hidroxietil) tereftalato (BHET) y oligómeros de bajo peso molecular. El BHET obtenido se puede usar directamente en la reacción de polimerización para obtener PET de calidad comparable a la de la virgen. Asimismo, puede servir como materia prima para otros polímeros o resinas de composición similar (Abedsoltan, 2023).

Figura 2. Reacción de glicólisis de PET



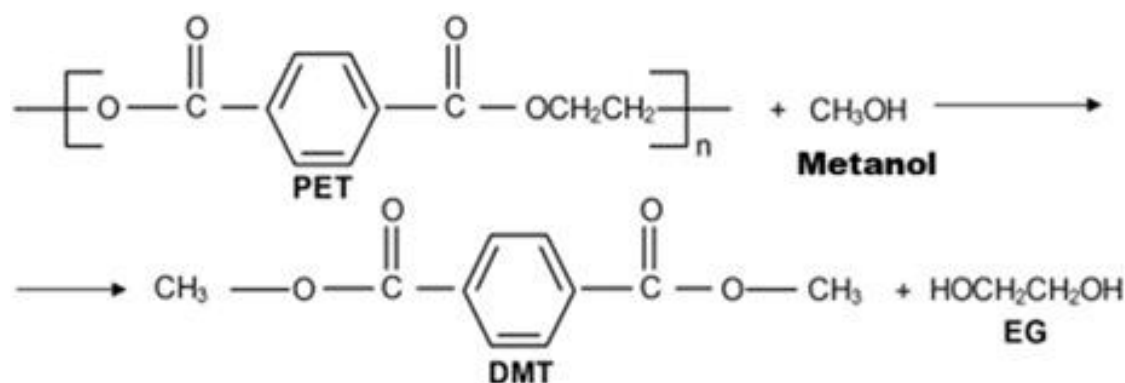
Nota. Bertolotti et al., 2005.

Una razón por lo que la glicólisis resalta, es la tolerancia a corrientes de PET post-consumo, incluso cuando este contiene impurezas o aditivos. Sin embargo, la pureza del producto final dependerá de la eficacia de las etapas de separación y purificación de las operaciones que le siguen. En la industria, se han desarrollado reactores de glicólisis para operación continua o semicontinua, por lo que se ha logrado elaborar el método a nivel planta piloto en distintas regiones. No obstante, el consumo energético y el costo de los catalizadores sigue siendo de los principales factores limitantes para continuar con su escalamiento (Bertolotti et al., 2005; Abedsoltan, 2023).

2. Metanólisis

La metanólisis es otra técnica de solvólisis que consiste en que el PET se descomponga al reaccionar con metanol a unas condiciones de alta presión (20-40 bar) y temperaturas en el rango de 180 a 280°C, usualmente en presencia de catalizadores; por ejemplo, acetato de zinc, óxidos metálicos o sales de manganeso (Bertolotti et al., 2005). En estos procesos, el PET se convierte en dimetil tereftalato (DMT) y EG; estos pueden ser purificados y reutilizados para la síntesis de PET nuevo. El DMT resultante se considera tiene un alto valor pues se puede integrar directamente en operaciones de polimerización ya existentes, reduciendo la dependencia de las materias primas vírgenes (Abedsoltan, 2023).

Figura 3. Reacción de metanólisis de PET



Nota. Bertolotti et al., 2005.

Históricamente, la metanólisis ha sido explorada por empresas como Imperial Chemical Industries (ICI) y DuPont desde mediados del siglo XX como una posible alternativa a la incineración y vertido de residuos de PET. Aún se considera como una de las rutas más prometedoras para el reciclaje químico a mayor escala. Sin embargo, este tiene que operar a condiciones severas de presión y temperatura y hace uso de solventes volátiles, lo cual incrementa el costo de operación e incrementa los efectos ambientales adversos provenientes del manejo del metanol siendo utilizado. De igual forma, la capacidad de procesar flujos de PET mixtos y contaminados lo hace un proceso atractivo a ser investigado para alcanzar la economía circular del material (Abedsoltan, 2023).

3. Aminólisis

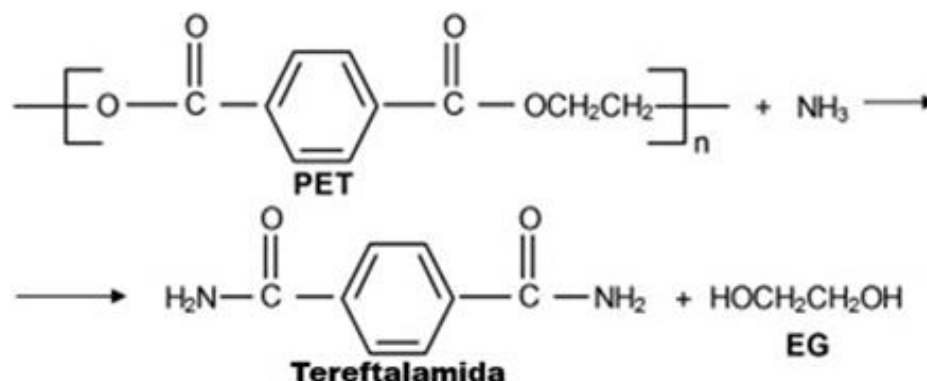
La aminólisis es un proceso de solvólisis en el que el PET se descompone mediante la reacción con aminas alifáticas o aromáticas, rompiendo los enlaces éster del polímero y generando principalmente tereftalamidas como productos finales. Estas amidas tienen aplicaciones como intermediarios en la síntesis de resinas epoxi, agentes de curado, recubrimientos y adhesivos, lo que convierte a la aminólisis en un método de upcycling más que de simple recuperación de monómeros (Bertolotti et al., 2005).

En condiciones típicas, la aminólisis se lleva a cabo a temperaturas moderadas (20–100 °C) y presiones atmosféricas o ligeramente elevadas, dependiendo del tipo de amina empleada (primarias, secundarias o poliaminas). Entre los catalizadores más estudiados se

encuentran las sales metálicas y compuestos básicos que aceleran la ruptura de los enlaces éster (Abedsoltan, 2023). A diferencia de la glicólisis o la metanólisis, esta técnica no busca regenerar directamente TPA o DMT, sino obtener derivados de valor agregado, lo que le otorga interés en sectores especializados de la industria química.

No obstante, la aminólisis presenta limitaciones. El costo de las aminas empleadas y los procesos de separación y purificación de los productos puede ser elevado, lo que restringe su aplicación a gran escala. Además, los productos de tereftalamidas no siempre tienen un mercado tan amplio como los monómeros tradicionales del PET, por lo que su implementación se ha enfocado en nichos industriales específicos, como en la producción de polímeros de ingeniería y recubrimientos de alto desempeño (Al-Sabagh et al., 2016; Abedsoltan, 2023).

Figura 4. Reacción de aminólisis de PET



Nota. Al-Sabagh et al., 2016.

4. Hidrólisis

La hidrólisis del PET es un proceso donde se rompen sus enlaces éster para obtener TPA y EG. La formación de este poliéster se suele dar por la policondensación de los monómeros mencionados, este rompimiento es la reacción inversa. Este se puede realizar en medio ácido, alcalino o neutro. Cada tipo difiere en sus condiciones de operación, pureza del TPA resultante y la dificultad de su separación final (Bertolotti et al., 2005).

a. Neutra

La hidrólisis neutra, consiste en la ruptura térmica del enlace éster haciendo uso de solamente agua (en forma líquida o vapor), sin catalizador. Se reporta llevarse a cabo a presiones en el rango de 1 a 4 MPa y temperaturas entre 200 y 300 °C. Durante la reacción surge un monoéster glicólico que es soluble en agua en el rango de temperaturas (95 – 100 °C), pero se da la precipitación del TPA que es insoluble a esas mismas temperaturas. Por lo tanto, en este método se da una separación más fácil de los productos al compararlo con las rutas de este método (Bertolotti et al., 2005).

b. Ácida

El principio de la versión ácida de este método de solvólisis consiste en la ruptura del enlace éster por ataque de agua, catalizado por un ácido fuerte (sustitución nucleofílica en medio ácido). En PET, esto libera EG y TPA como se ha mencionado, el último en forma protonada en este caso. Entre las condiciones típicamente reportadas para esta reacción, se observa a presión atmosférica y 100 °C, aunque se reconoce como un camino lento, y usa ácido sulfúrico a 7.5 M y se alcanza un rendimiento cercano al 80% luego de 5 días. Con mayor frecuencia, se utiliza ácido sulfúrico, fosfórico o nítrico concentrado. Como se evidencia, el medio implica la necesidad de equipos resistentes a la corrosión pues se trabaja con concentraciones altas; se generan corrientes que se deben neutralizar y las cuales aumentan la cantidad de sales inorgánicas a manejar (Bertolotti et al., 2005).

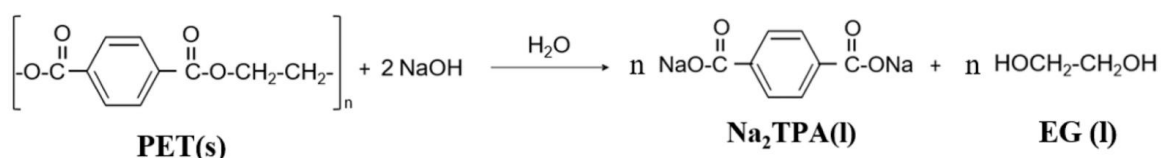
c. Alcalina

La hidrólisis alcalina del PET es una saponificación de enlaces éster en la cadena. El mecanismo de este consiste en que el ion hidróxido (OH^-) ataca nucleofílicamente al carbonilo del éster. El resultado es un intermediario tetraédrico que expulsa el alcóxido formado. En el medio básico, la reacción tiende a llegar a carboxilatos, después de todo, no se trata de una reacción reversible ya que la reesterificación necesitaría ácido para completarse. Asimismo, el carboxilato es un nucleófilo débil y no es un buen grupo saliente, por esta razón la reacción se detiene en este (McMurry, 2011).

Para una unidad repetitiva de PET, la hidrólisis alcalina produce tereftalato disódico (Na_2TPA) y EG. La recuperación del TPA se da por acidificación de esta sal a un pH cercano

a 2, ya sea con ácido sulfúrico o clorhídrico. Se precipita el ácido tereftálico sólido y se generan sales inorgánicas (sulfato de sodio o cloruro de sodio, según el ácido utilizado). Esta se considera la operación estándar del proceso.

Figura 5. Reacción de la hidrólisis alcalina de PET



Nota. Barredo et al., 2023.

La solubilidad del Na₂TPA en agua es relativamente alta, al contar con valores cercanos al 13% p/p y es poco dependiente de la temperatura, pues este valor se mantiene prácticamente constante entre 25 – 70 °C. Por esta razón, se necesario la acidificación, ya que esta acción resultaría en TPA como tal. El TPA cuenta con una solubilidad que sí crece con la temperatura y presión, pero a condiciones cercanas a atmosféricas es bastante baja (Rezazadeh et al., 2021; Su et al., 2025).

E. Ácido Tereftálico (TPA)

El ácido tereftálico es un diácido aromático simétrico, conocido sistemáticamente como benceno-1,4-dicarboxílico. Es conocido por ser el principal precursor aromático para la fabricación de poliésteres como el PET. En la industria, el TPA se suele obtener por la oxidación de p-xileno y, en la polimerización, se emplea como ácido libre o en la forma de su diéster (dimetil tereftalato, DMT) para facilitar la purificación y el control al realizar policondensaciones con dioles. Este es el camino clásico descrito para obtener poliésteres aromáticos de alto desempeño: un diácido convertirlo a diéster e intercambiar el éster con un glicol seguido de la policondensación (Billmeyer, 1984).

1. Estructura química

Estructuralmente, el TPA consiste en un anillo bencénico con dos grupos COOH en posiciones para. Las constantes de disociación reportadas a 25 °C son $\text{pK}_1 \approx 3.5$ y $\text{pK}_2 \approx 4.5$, valores coherentes con un diácido aromático moderadamente fuerte, cuya forma dianiónica

(tereftalato²⁻) es el ligando que con frecuencia se usa en síntesis de materiales poliméricos. Estos parámetros ácido-base son útiles para justificar la estrategia de acidificar soluciones de tereftalato (pH cercanos a 2) al recuperar TPA sólido tras la hidrólisis alcalina del PET (PubChem, s/f).

El carácter para-disustituido y la rigidez del núcleo aromático hacen del TPA un compuesto ideal para utilizar en policondensaciones. Esto se debe a que, al reaccionar con un diol, produce cadenas con enlaces éster y segmentos aromáticos rígidos que elevan la temperatura de fusión. Esto se demuestra en que distintos polímeros son formados con la misma unidad terftálica variando el diol usado durante su síntesis; por ejemplo, PBT y PET (Brazel et al., 2012).

2. Usos industriales del TPA

En la industria, existe un uso dominante del TPA para la síntesis de poliésteres, especialmente usándolos para la repolimerización don dioles. El TPA (o incluso oligómeros como DMT) reaccionan primero con el glicol para formar un oligómero donde los hidróxidos del diol han sido adheridos, luego a mayor temperatura y baja presión se puede llevar a cabo la policondensación que permite elevar rápidamente el peso molecular del polímero. Este permite producir tanto PET, como tereftalato de polibutileno (PBT) (haciendo uso de 1,4-butanodiol) el cual tiene usos electrónicos y automotrices, por lo que no es necesario un producto del grado de inocuidad como ciertas aplicaciones del PET. Como se ha mencionado, es posible modular las propiedades del poliéster aromático a producir a partir del TPA según el diol a utilizarse, la relación estequiométrica y las condiciones de presión y temperatura (Billmeyer, 1984).

Se indica que en el caso de que el TPA será usado específicamente para hacer fibras y películas sí requiere de pureza elevada, por lo tanto, se requieren rutas destinadas a la purificación previa a la polimerización para evitar defectos en el producto final que incluso pueden limitar el crecimiento de la cadena; defectos como, por ejemplo, color o terminaciones inertes. Al obtener las resinas, se debe llevar un control de cristalinidad y orientación que permite ajustar el desempeño en las fibras y películas obtenidas de acuerdo con su utilidad (Billmeyer, 1984).

3. TPA en la producción de nuevos materiales

Más allá de los poliésteres, TPA es un ligando común en síntesis con MOFs (metal-organic frameworks), donde coordina a nodos metálicos para formar redes cristalinas con alta superficie específica. Estos MOFs son materiales porosos emergentes con estructuras cristalinas y funcionalidad versátil. Cuentan con un tamaño de partícula a una nanoescala, con una geometría diseñable y con una composición química modificable; estos demuestran gran potencial para varias aplicaciones como almacenamiento de gases, separación de gases, catalizadores, entre otros. Incluso, se ha reportado la síntesis de estos a partir de TPA recuperado de PET por reciclaje químico, por lo cual el producto de la hidrólisis alcalina de PET no solo podría emplearse en procesos de repolimerización (Cao et al., 2023).

Por otra parte, en la misma línea de circularidad del TPA, se encuentran distintos trabajos que exploran, aparte de construir MOFs de residuos de PET, también la alimentación de estos en policondensaciones hacia el PBT o copoliésteres. Por lo que se relaciona la calidad del TPA recuperado con el desempeño del material final; esta relación se observa en revisiones de estudios de la producción del TPA por oxidación de p-xileno (Lapa & Martins, 2023).

4. Titulación ácido-base y FTIR del TPA

La titulación es un método volumétrico en el que una disolución de concentración conocida (titulante) se añade de forma controlada a un analito hasta que la reacción se completa en proporción estequiométrica. Con el volumen del titulante en el punto de equivalencia se calcula la cantidad de analito. El punto final se puede identificar por un salto en el pH, evidenciado por un cambio de color al usar indicadores (Lower, 2016).

El ácido tereftálico (TPA) es diprótico ($pK_1 \approx 3.5$, $pK_2 \approx 4.5$ a 25 °C), por lo que consume 2 moles de OH^- por mol de TPA en la neutralización. Para su valoración por indicador colorimétrico, se recomienda calentar en un medio acuoso o acuoso-alcohólico (para aumentar la solubilidad de este) y titular con NaOH usando fenolftaleína como indicador. Se reconocerá el punto de viraje cuando este torne de incoloro a rosado tenue, lo cual se da a valores de pH de alrededor de 8.3 – 10; suficiente para neutralizar ambos protones del diácido. La norma ASTM D8032 especifica la determinación del número ácido del TPA por titulación con indicador, y reporta valores típicos para TPA de alta pureza de 674–676

mg KOH/g (Alfa Chemistry, 2025; ASTM, 2020; PubChem, s/f). En el caso de esta experimentación, se utilizará un número de ácido con mg NaOH.

Para reportar el rendimiento del TPA de los sólidos recuperados, es necesario calcular la pureza a partir de la titulación completada. De igual forma, se determinará el rendimiento de los sólidos recuperados. A continuación, se presentarán las ecuaciones pertinentes al cálculo de la pureza de la muestra del TPA al titularse con NaOH, rendimiento de sólidos recuperados, el corregido por TPA y la conversión del PET.

Ecuación 1. Pureza de muestra de TPA

$$Pureza = \frac{\frac{1}{2} V_{sol} C_{sol} M_{TPA}}{m_{TPA}}$$

Donde:

V_{sol} es el volumen (L) de la solución utilizada de NaOH para titular

C_{sol} es la concentración (mol/L) de la solución utilizada de NaOH

M_{TPA} es el peso molar del TPA (166.13 g/mol)

m_{TPA} es la masa de la muestra de sólidos de TPA siendo titulada (g)

Cabe mencionar que el 1/2 proviene de la relación estequiométrica entre NaOH y TPA de la reacción de neutralización

Ecuación 2. Rendimiento de sólidos recuperados

$$Sólidos_{rendimiento}(\%) = \frac{m_{TPA}/M_{TPA}}{m_{PET}/M_{PET}} \cdot 100\%$$

Donde:

M_{TPA} es el peso molar del TPA (166.13 g/mol)

m_{TPA} es la masa de los sólidos recuperados totales (g)

M_{PET} es el peso molar de una unidad repetitiva de PET (192.2 g/mol)

m_{PET} es la masa inicial de PET del que partió la reacción (g)

Ecuación 3. Rendimiento corregido por TPA

$$TPA_{rendimiento}(\%) = \frac{m_{TPA}/M_{TPA}}{m_{PET}/M_{PET}} \cdot Pureza \cdot 100$$

Donde:

M_{TPA} es el peso molar del TPA (166.13 g/mol)

m_{TPA} es la masa de los sólidos recuperados totales (g)

M_{PET} es el peso molar de una unidad repetitiva de PET (192.2 g/mol)

m_{PET} es la masa inicial de PET del que partió la reacción (g)

$Pureza$ es el valor de pureza obtenido a partir de la Ecuación 1

Ecuación 4. Conversión del PET

$$PET_{conversión}(\%) = \frac{m_{PET}^0 - m_{PET}^f}{m_{PET}^0} \cdot 100\%$$

Donde:

m_{PET}^0 es la masa inicial de PET (g) previo a la reacción

m_{PET}^f es la masa final de PET (g) al completarse la reacción al tiempo estipulado

Como se mencionó, el valor ácido (AV) se refiere al valor típico requerido de mg de KOH para neutralizar los grupos ácidos de un gramo de muestra de TPA. Ya se describió cómo se lleva a cabo operativamente a partir de la titulación. Seguidamente, está el peso equivalente ácido (EW, g/eq) que es la masa de muestra que contiene un equivalente ácido. Ya que, en el caso del TPA, este cuenta con 2 ácidos por molécula, el peso molecular promedio de la muestra se puede obtener multiplicando el EW por 2; este valor se refiere a la funcionalidad de la molécula. Finalmente, para reportar el grado de polimerización de la muestra (el cual sirve para conocer el largo de cadena promedio puesto que se pudo haber formado oligómeros y no solo TPA puro) se toma en consideración una derivación del peso molar promedio de la muestra calculado a partir del grado de polimerización; por lo que al conocer el peso molecular del EW, se podría calcular el grado de polimerización. A continuación, se encuentran las ecuaciones de los fenómenos discutidos.

Ecuación 5. Valor ácido (AV) de muestra de TPA

$$AV \left(\frac{mg \ NaOH}{g \ muestra} \right) = \frac{1000 \ V_{sol} C_{sol} M_{NaOH}}{m_{TPA}}$$

Donde:

V_{sol} es el volumen (L) de la solución utilizada de NaOH para titular

C_{sol} es la concentración (mol/L) de la solución utilizada de NaOH

M_{NaOH} es el peso molar del NaOH (40.0 g/mol)

m_{TPA} es la masa de la muestra de sólidos de TPA siendo titulada (g)

Cabe mencionar que el 1000 proviene de la conversión de g a mg

Ecuación 6. Peso equivalente ácido (EW) de la muestra de TPA

$$EW \left(\frac{g \text{ muestra}}{eq \text{ COOH}} \right) = \frac{1000 M_{NaOH}}{AV}$$

Donde:

M_{NaOH} es el peso molar del NaOH (40.0 g/mol)

AV es el valor ácido de la muestra de TPA (mg NaOH / g muestra)

Cabe mencionar que el 1000 proviene de la conversión de g a mg

Ecuación 7. Masa molar promedio de la muestra de sólidos

$$M_n \left(\frac{g}{mol} \right) = 2 EW$$

Donde:

EW es el peso equivalente ácido (g muestra / eq COOH)

Cabe mencionar que el 2 se da por la relación estequiométrica entre la cantidad de ácidos en las colas por cada molécula que se tituló

Primero, se debe notar que la Ecuación 8 se ve derivada del siguiente supuesto que cada unidad siendo titulada tiene dos ácidos en las colas. A partir de esto, se conocería que el peso molar promedio según el grado de polimerización depende del número n (grado de polimerización) de unidades repetidas de TPA más (n-1) unidades de EG menos 2(n-1) unidades de agua que no estarían en la molécula por la adición de EG. A continuación, se ve la derivación de la Ecuación 8 y en esta ecuación se ve despejada para el grado de polimerización en función del peso molar calculado del obtenido de EW.

$$M_n = 166n + 62(n - 1) - 18 \cdot 2(n - 1)$$

Ecuación 8. Grado de polimerización de la muestra de sólidos

$$n \text{ (unidades repetitivas)} = \frac{M_n + 26}{192}$$

Donde:

n es el grado de polimerización que indica el promedio de unidades repetitivas

M_n es la masa molar promedio de la muestra de sólidos a partir del EW

La espectroscopía infrarroja por transformada de Fourier (FTIR) registra la absorción infrarroja asociada a las vibraciones moleculares a distintas longitudes de onda. A partir de la región entre la longitud de onda de 3500 y 1600 cm^{-1} se pueden reconocer estiramientos sencillos que señalan a la presencia de ciertos grupos funcionales; esto en conjunto con la

región de la huella dactilar ($600 - 1400 \text{ cm}^{-1}$) permite identificar los picos característicos de distintos compuestos químicos. Para sólidos y polvos, el accesorio ATR (Attenuated Total Reflectance) facilita el análisis directo sin preparar pastillas de KBr; el procedimiento clásico para análisis FTIR (Wade, 2016).

En el caso del espectro FTIR del TPA, se debe tomar en consideración los siguientes picos esperados para este compuesto. La banda ancha O – H ($3300\text{--}2500 \text{ cm}^{-1}$), un pico para el carbonilo de ácido generalmente entre $1730 - 1700 \text{ cm}^{-1}$, el pico asociado al enlace C – O de ácido entre $1320 - 1210 \text{ cm}^{-1}$, otro pico asociado al enlace O – H característico de ácidos entre $1440 - 1400 \text{ cm}^{-1}$ y los picos presentes para compuestos aromáticos por los doble enlaces de este cercanos a $\sim 1600 \text{ cm}^{-1}$ (Universidad de Granada, 2002; University of Colorado, 2011).

F. Factores económicos y ambientales

1. Costos asociados al proceso

En el reciclaje químico por depolimerización a escalas planta piloto, el costo total se compone de tres bloques: pretratamiento del residuo (lavado, molienda, etc.), el proceso como tal (costo energético, de químicos, etc.) y el manejo de efluentes y subproductos (de las neutralizaciones y separaciones). Estudios de costos de procesos similares, indican que la electricidad, vapor y solventes suelen ser los principales propulsores de costos y huella en rutas químicas (Uekert et al., 2023).

Vale la pena mencionar que el marco regulatorio y la demanda obligatoria de contenido reciclado son puntos claves para el futuro económico del proceso. Después de todo, para el 2030 la Unión Europea exigirá un 30% de contenido reciclado en botellas PET. Asimismo, tiene metas propuestas de recolección del 90% de estas para el 2030. Esto afectaría el mercado para monómeros de calidad grado botella, que tendrían que obtenerse del reciclaje químico y, por lo tanto, afectará el costos asociados al proceso; puede que estos disminuyan por la creciente demanda y producción (European Commission, 2025).

2. Beneficios ambientales del proceso

Desde el punto de vista ambiental, el reciclaje químico aporta circularidad cuando logra sustituir materia prima virgen (p-xileno o EG fósil) por TPA o EG recuperados con calidad suficiente para cerrar el ciclo “botella-a-botella” u otras aplicaciones de alto

desempeño. Aunque el reciclaje mecánico suele mostrar los mejores indicadores ambientales globales, rutas químicas como glicólisis y algunos esquemas de depolimerización con recuperación eficiente de monómeros pueden acercarse o superar escenarios alternativos según la matriz eléctrica, el uso de vapor/solventes y la eficiencia en la etapa de recuperación. En particular, se ha evidenciado que electricidad y vapor son los mayores contribuyentes a huella, por lo que energía de baja emisión e integración térmica son determinantes para mejorar los resultados (Uekert et al., 2023).

Evaluaciones prospectivas muestran que, con avances tecnológicos y energía baja en carbono, el reciclaje químico podría reducir el consumo de energía y GEI (Gases de Efecto Invernadero) respecto a la producción virgen. En conjunto, el mensaje operativo es que la ventaja ambiental depende del diseño del proceso, de la fuente energética y de evitar pérdidas en durante la depolimerización y la recuperación (Singh et al., 2021). Finalmente, más allá de los GEI, existen co-impactos a gestionar como la generación de sales al precipitar el TPA obtenido o efluentes con carga iónica que exigen tratamiento.

G. Análisis costo-beneficio

Un análisis costo–beneficio (ACB) sirve para decidir si un proyecto “vale la pena” comparando, en dinero, lo que aporta frente a lo que cuesta. La herramienta central es la razón beneficio/costo (B/C), que se calcula como beneficios totales dividido por los costos totales. La interpretación es como sigue: $B/C > 1$ indica que los beneficios superan a los costos (proyecto atractivo), $B/C = 1$ marca el punto de equilibrio y $B/C < 1$ sugiere que no conviene porque cuesta más de lo que aporta. Esta razón es una forma estándar y simple de determinar el atractivo de una decisión e incluso para comparar entre distintas opciones (Hayes, 2025).

H. Balance de masa y energía

Un balance de masa establece que, para un sistema claramente definido, la acumulación de masa (o de un componente) es igual a lo que entra menos lo que sale, más/menos lo que se genera o consume por reacción. Se suele partir de un diagrama de proceso donde se identifican corrientes, sin embargo, la masa siempre se conserva estrictamente por la Primera Ley de la Termodinámica. Una formulación típica de estos balances para sistemas abiertos se encuentra en Perry’s (2008) y en textos introductorios

como Felder & Rousseau (2005) lo usan como punto de partida para plantear balances de planta, equipos y reactores.

El balance de energía también aplica la Primera Ley de la Termodinámica: la tasa de cambio de la energía total del sistema es igual al calor neto que entra menos el trabajo que realiza el sistema, más la energía asociada a las corrientes que ingresan y menos la que sale. Para corrientes como tal, se suele usar la entalpía específica, el término de energía cinética y potencial (si es significativa). En reactores, se suele expresar el efecto químico mediante la entalpía de reacción. Por otra parte, en estado estacionario, el balance se suele reducir a una igualdad entre los aportes de calor o trabajo al sistema y la diferencia de las entalpías de entrada y salida. Mientras que, si es un proceso adiabático, la suma de los flujos entálpicos es igual a cero. A continuación, se verán las ecuaciones típicas para realizar estos dos balances (Felder & Rousseau, 2005; Perry & Green, 2008).

Ecuación 9. Balance de masa para sistema sin acumulación

$$\sum_{entradas} \dot{m} = \sum_{salidas} \dot{m}$$

Ecuación 10. Balance de energía de un sistema.

$$\dot{Q} - \dot{W} = \sum_{salidas} \dot{m} \left(h + \frac{v^2}{2} + gz \right) - \sum_{entradas} \dot{m} \left(h + \frac{v^2}{2} + gz \right)$$

Donde:

$\dot{Q}$ es el calor hacia el sistema

$\dot{W}$ es el trabajo hecho por el sistema

$\dot{m}$ es el flujo másico de la corriente

h es la entalpía específica de los componentes

$v^2/2$ es el componente de energía cinética del sistema

gz es el componente de energía potencial del sistema

V. Antecedentes

El reciclaje químico del tereftalato de polietileno (PET) mediante hidrólisis alcalina se ha consolidado como una vía para recuperar ácido tereftálico (TPA) y etilenglicol (EG) con alta selectividad, en contraste con otras modalidades (como la hidrólisis neutra) que, aunque no hace uso de bases, suele exigir mayor severidad operativa y más etapas de purificación posteriores que resultan en mayor costos para alcanzar calidades comparables de TPA (Abedsoltan, 2023). En el método básico, el PET reacciona con hidróxidos en medio acuosa y forman los productos de interés, y requiere solamente de una acidificación (a pH igual a 2) para su precipitación y posterior separación. Esta estrategia ha mostrado robustez frente a aditivos y colorantes comunes en productos del polímero postconsumos (Abedsoltan, 2023).

Se han realizado estudios como el de López-Fonseca et al. (2009), donde se ha explorado el uso de catalizadores (en este caso, sales cuaternarias de amonio y fosfonio) con el objetivo de suavizar las temperaturas de operación y acelerar la cinética a condiciones prácticamente iguales a la atmosférica. Si bien es cierto que se ha observado aceleraciones significativas, se debe notar que estos catalizadores cuentan con crecientes preocupaciones ecológicas, como señalado por Arnold et al. (2023) e incrementan considerablemente el costo del proceso.

En aplicaciones de hidrólisis alcalina en bandejas monocapa de PET elaborado por Barredo et al. (2023), también se ha utilizado sales de fosfonio como catalizador y ha resultado en conversiones y rendimientos de TPA cercanos al 90% para distintas mezclas de estos luego de 4 horas de reacción. De igual forma, en este trabajo se evaluaron distintas velocidades de agitación, determinando que 700 rpm brinda la mayor conversión entre las evaluadas, por lo que en este trabajo de investigación se recurre a este valor.

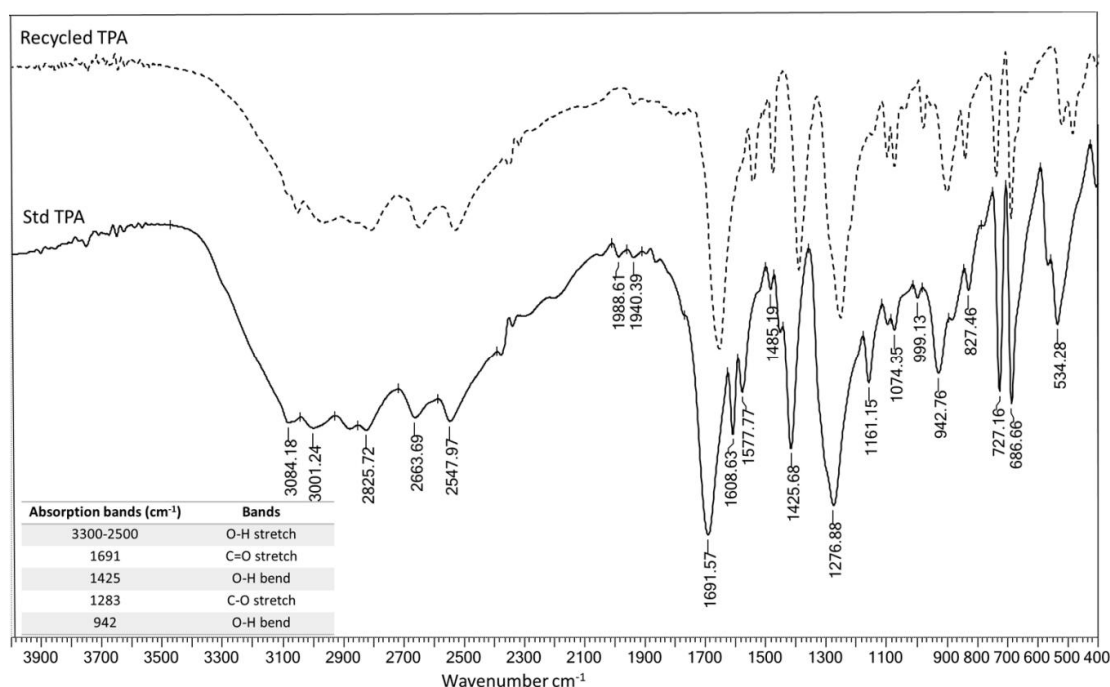
Paralelamente, se han estudiado cosolventes dipolares apróticos en combinación con EG para incrementar la reactividad del hidróxido y así reducir la severidad térmica requerida. Chen & Hu (2023) mostraron que el uso de DMSO, DMI o THF como cosolventes eleva drásticamente la velocidad de degradación, logrando conversiones entre el 20 al 98% según las proporciones de cada uno de estos y las temperaturas estudiadas entre 60 y 70 °C. Los autores indican que los cosolventes pueden mejorar la reactividad efectiva de los iones de

hidróxido, pero reducen la solubilidad del NaOH como tal. Prácticamente, este estudio evidenció temperaturas entre 60 – 70 °C sin uso de catalizadores, pero sí de cosolventes, por lo que, para este trabajo, donde se prescinde de ellos, se decidió aumentar la temperatura a los rangos no estudiados por ellos y aumentar el contenido efectivo de NaOH, el cual no se ve limitado por la solubilidad del medio.

En cuanto a la determinación analítica de productos, Barredo et al. (2023) hace uso de mediciones gravimétricas para la conversión de PET, la titulación con fenolftaleína para determinar la pureza del TPA obtenido y confirma la existencia de este compuesto a través de la espectroscopía FTIR. Estos métodos analíticos serán empleados en esta investigación también. Con el cambio de que para la titulación se sustituiría el KOH para titular por NaOH y en vez de DMSO como disolvente para la titulación, simplemente se utilizaría agua.

Para la verificación analítica de la obtención de TPA, se mencionó la utilidad del FTIR. Este es el método rutinario para confirmar la identidad del TPA mediante sus bandas características, como el enlace C=O del ácido carboxílico y otras señales características de ácidos. A continuación, se observa un espectro FTIR de TPA estándar y reciclado presentado por Čolnik et al. (2021) que servirá como referencia para los de esta experimentación.

Figura 6. Espectro FTIR de TPA estándar y reciclado



Nota. Čolnik et al., 2021.

VI. Metodología

A. Preparación del PET

Reactivos

- Tereftalato de Polietileno (PET)

Equipo y materiales

- Licuadora casera
 - Tijeras
 - Tamiz
 - Recipiente para guardar muestras
1. Lavar las botellas de PET usadas (sin tapas ni etiquetas) con agua tibia (aproximadamente 40°C) para eliminar residuos superficiales o contaminantes y residuos orgánicos. Asimismo, se cepillaron manualmente para quitar suciedad adherida. Se dejaron secar.
 2. Triturar las muestras haciendo uso de una licuadora casera para conseguir tamaños de partícula menores a 10 mm. Se puede adicionar un par de mililitros de agua a la licuadora durante la trituración para evitar sobrecalentamiento. De igual forma, dejar reposar por períodos de tiempo para permitir que se enfríe.
 3. Pesar la cantidad de PET a tamizar para conocer el total.
 4. Tamizar los resultados en meshes de los siguientes tamaños:
 1. 9.525 mm
 2. 6.350 mm
 3. 4.763 mm
 4. 3.175 mm
 5. 1.000 mm
 5. Pesar el PET recuperado en cada mesh para conocer la distribución de tamaños.
 6. Recuperar las partículas en un recipiente para su posterior uso.

B. Reacción de hidrólisis alcalina

Reactivos

- NaOH 99%

- HCl 37%
- PET triturado
- Agua destilada
- Vaselina

Equipo y materiales

- Agitador magnético
- Termómetro
- 1 tapón de hule para insertar termómetro
- Estufa eléctrica con agitación Thermo Scientific Cimarec
- Recipiente resistente a calor para baño maría, no magnético
- Papel filtro (1 mm)
- Balanza analítica Ohaus Pioneer
- 1 espátula analítica
- 2 mangueras para condensador de reflujo
- 1 bomba de reflujo
- 1 pipeteador
- 1 colador
- 1 recipiente para el PET sin reaccionar
- 1 frasco para el TPA obtenido
- 1 soporte universal
- 2 pinzas para el soporte universal
- 1 abrazadera

Cristalería

- Balón de 3 boquillas de 100 mL
 - 2 tapones de cristal
 - Condensador de reflujo
 - 3 beakers 100 mL
 - 1 beaker 500 mL
 - 1 pipeta graduada de 10 mL
 - 1 vidrio de reloj
 - 1 probeta de 50 mL
1. Montar el sistema para llevar a cabo la reacción. Este consta de un soporte universal, donde se utilizarán 2 pinzas para sostener el condensador de reflujo en su lugar. El balón de 3 boquillas se adjuntará a este haciendo uso de la abrazadera; recordar colocar vaselina a todas las uniones de vidrio. Insertar el termómetro en el tapón de hule y colocarlo en una de las boquillas del balón de tal forma que vaya a tener un mínimo contacto con la fase líquida. Asegurarse de colocar un tapón de vidrio de la salida del condensador de reflujo. Las mangueras deben ir conectadas a la entrada y salida del

condensador de reflujo; la manguera de entrada estará conectada a la bomba de agua. El balón se encontrará en un baño maría sobre la estufa eléctrica. Ver la Figura 7 para referencia de cómo se ve el sistema.

Figura 7. Sistema utilizado para la hidrólisis alcalina de PET



Nota. Foto del sistema utilizado para llevar a cabo la reacción, tomada en el Laboratorio de Operaciones Unitarias de la Universidad del Valle de Guatemala (Elaboración propia).

2. Pesar en una balanza analítica la cantidad de NaOH a utilizar y colocar en beaker de 100 mL, hacer lo mismo con el PET. En el Cuadro 1 se encuentran las cantidades de cada reactivo a utilizar según el diseño experimental propuesto ³² para evaluar la influencia de la temperatura y relación base-polímero sobre el rendimiento de la reacción.
3. Pesar en una probeta la cantidad de agua destilada a utilizar.
4. Diluir el NaOH pesado en el agua destilada pesada.
5. Ingresar al balón, a través de la boquilla libre, la solución de NaOH recién hecha y el agitador magnético. Asegurarse de tapar esta boquilla con un tapón de vidrio luego de esto.
6. Calentar el sistema a baño maría hasta la temperatura deseada según la combinación siendo completada (Cuadro 1).
7. Una vez la temperatura está estabilizada, quitar el tapón del balón, agregar la masa pesada de PET y volver a tapar. También se debe ajustar la agitación a 700 rpm.

8. Dejar correr la reacción durante 60 minutos.
9. Al terminar el tiempo, se quita el balón del baño maría y se deja enfriar.
10. Filtrar los sólidos residuales siendo arrastrados por el líquido haciendo uso del papel filtro. Se traslada el líquido a un beaker mientras que el PET sin reaccionar se coloca en el colador, en el cual se realizan lavados de estos para remover trazas de NaOH para posteriormente depositarlo en un recipiente.
11. Medir suficiente HCl para llevar la fase líquida a un pH igual a 2 (aproximadamente 5 mL) para que precipite el ácido tereftálico (TPA) en la solución. Esto se hace con la pipeta graduada y su respectivo pipeteador. Trasvasar la mezcla a su respectivo frasco.
12. Este procedimiento se lleva a cabo para todas las combinaciones de temperatura y relación base-polímero (ver Cuadro 1) en triplicado. De igual forma, al terminar estas corridas y determinar la condición que maximizó el rendimiento de TPA, se repetirá este procedimiento a la condición seleccionada en el siguiente rango de tiempos de reacción: 30, 60 (ya se habría completado), 120, 180 y 240 minutos. También en triplicado.

Cuadro 1. Condiciones de reacción a evaluar

Tratamiento	NaOH (g)	Agua (g)	PET (g)	Temperatura (°C)	Tiempo (min)
1	2.8	40.1	4	70	60
2	3.4	43.6	4	70	60
3	4	47.2	4	70	60
4	2.8	40.1	4	75	60
5	3.4	43.6	4	75	60
6	4	47.2	4	75	60
7	2.8	40.1	4	80	60
8	3.4	43.6	4	80	60
9	4	47.2	4	80	60

Nota. Condiciones a las que se deberá realizar cada reacción (tomar en cuenta que cada una se realiza en triplicado) para evaluar la combinación de factores de temperatura y relación NaOH:PET (Elaboración propia).

C. Separación y secado de TPA

Reactivos

- Bicarbonato de sodio
- Agua destilada
- Ácido Tereftálico (TPA)
- Tereftalato de Polietileno (PET) que no reaccionó

Equipo y materiales

- Centrífuga Fisher Scientific Centrif Model 228
 - Balanza analítica Ohaus Pioneer
 - Secador por convección VWR Symphony
 - Pipeta Pasteur
 - 6 tubos Eppendorf de 15 mL para la centrífuga
 - Pizeta de agua destilada
 - Frasco para secado de TPA
 - Recipiente para secado de PET
-
1. Trasvasar la mezcla ácida de TPA a los tubos Eppendorf asegurando no dejar rastros en este.
 2. Balancear las masas de los tubos que van a 180° del otro en la centrífuga a un rango de 0.1 g.
 3. Centrifugar por 15 minutos a los 3300 rpm que permite la centrífuga utilizada.
 4. Mientras se centrifuga, pesar en la balanza analítica el frasco en el cual se secará el TPA. Así se podrá conocer por pesado por diferencia la masa obtenida de TPA posterior al secado. Hacer lo mismo con el recipiente para el secado del PET que no reaccionó.
 5. Al terminar la centrifugación, con la pipeta Pasteur remover la mayor cantidad de sobrenadante disponible sin arrastrar TPA y neutralizarlo con bicarbonato de sodio.
 6. Lavar los tubos con una pizeta de agua destilada y trasvasar los lavados al frasco previamente pesado.
 7. Colocar el TPA con agua destilada y el PET sin reaccionar en el secador por 48 horas.
 8. Pasado el tiempo de secado, pesar en la balanza analítica para conocer la masa de los sólidos recuperados por la hidrólisis alcalina de PET.

D. Titulación del TPA

Reactivos

- TPA seco
- Agua destilada
- NaOH 99%
- Fenolftaleína 1% en alcohol

Equipo y materiales

- Estufa eléctrica con agitación Thermo Scientific Cimatec
- Balanza analítica Ohaus Pioneer
- Agitador magnético
- Soporte universal
- 2 pinzas para soporte universal
- 1 espátula analítica

Cristalería

- Probeta de 100 mL
 - 1 bureta de 25 mL
 - 1 balón de aforo de 500 mL
 - 3 beaker de 100 mL
 - 1 bureta de 50 mL
 - 1 Erlenmeyer de 125 mL
1. Preparar la solución para titular NaOH 0.1 M pesando 2.002 g de NaOH al 99%. Seguidamente se diluye en un beaker con agua destilada y se trasvasa a un balón de aforo de 500 mL. Realizar varios lavados del beaker.
 2. Aforar a la marca de aforo y homogenizar la solución en el balón.
 3. Preparar la muestra de TPA a ser titulada pesando aproximadamente 0.03 g de TPA.
 4. Verter aproximadamente 50 mL de agua destilada a aproximadamente 70 °C al sólido de TPA.
 5. Adicionar el agitador magnético al erlenmeyer y prender agitación a aproximadamente 200 rpm.
 6. Haciendo uso del soporte universal y las pinzas, montar la bureta a esta (ver Figura 8) y verter 25 mL de la solución de NaOH 0.1 M.
 7. Echar 3 gotas de la fenolftaleína en el medio a titular.
 8. Sin parar la agitación, adicionar gota a gota el NaOH al erlenmeyer hasta que se observe un rosado claro. Al ver este, parar goteo y esperar 2-3 minutos.
 9. Si el medio vuelve a ser transparente, adicionar gotas hasta que vuelve a aparecer el color rosado. Una vez este se mantiene luego de la espera, se anota el volumen de solución usada.

10. Este procedimiento se debe repetir para todas las reacciones completadas para determinar la pureza de TPA del producto.

Figura 8. Sistema para la titulación del TPA resultante



Nota. Foto del sistema utilizado para llevar a cabo la titulación, tomada en el Laboratorio de Operaciones Unitarias de la Universidad del Valle de Guatemala (Elaboración propia).

E. Análisis por FTIR

Reactivos

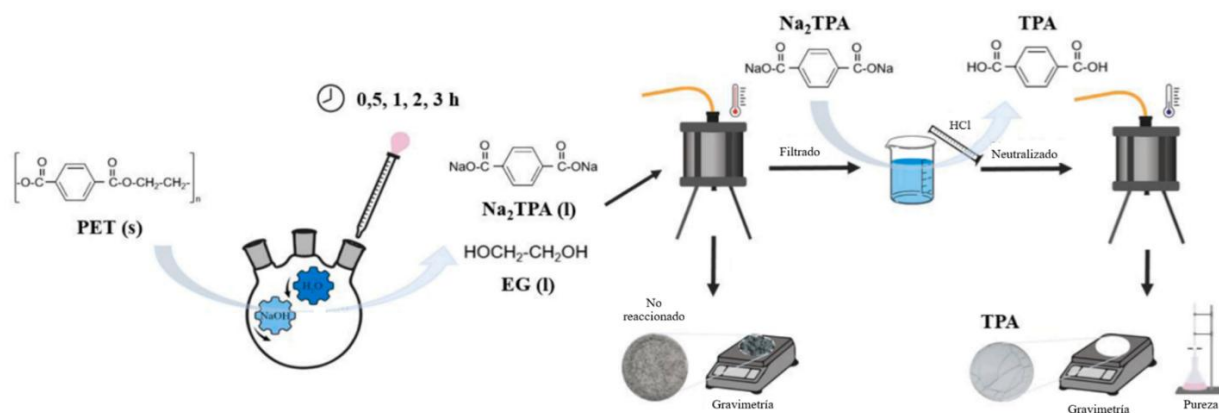
- TPA obtenido

Equipo y materiales

- Espectrofotómetro FTIR Perkin Elmer Frontier
 - Computadora con software Perkin Elmer Spectrum
 - Papel de lente
 - Espátula analítica
1. Encender el espectrofotómetro Perkin Elmer Frontier y la computadora con el software Perkin Elmer Spectrum.
 2. Realizar la limpieza del cristal del equipo con papel de lente.
 3. Abrir el software Spectrum y ejecutar una medida de fondo (background scan) en aire.

- Colocar aproximadamente de 5 – 10 mg de la muestra sólida de TPA obtenido y ejecutar el análisis.
- Guardar el espectro obtenido en el software con los picos señalados por este.

Figura 9. Resumen de metodología experimental completa



Nota. Barredo et al., 2023.

F. Análisis Costo-Beneficio

Software

- Microsoft Excel

- Registrar para cada condición experimental completada, la masa usada de PET, masa obtenida de TPA, la pureza calculada de TPA y el tiempo de reacción para la corrida.
- Investigar sobre los precios de mercado de TPA, NaOH, agua destilada y el precio de la energía en el sector.
- Calcular el beneficio por TPA de la masa obtenida de sólidos corregida por su pureza y del precio de este.
- Determinar los costos de reactivos según el consumo de cada uno y su precio unitario.
- Determinar el costo de energía identificando todos los equipos utilizados (estufa eléctrica, centrífuga y secador) y la energía que estos consumen para luego convertirlo a costo con el precio de la electricidad
- Sumar todos los costos para obtener el costo total por condición.
- Calcular el Beneficio/Costo al dividir el beneficio bruto dentro del costo total.

VII. Resultados

Cuadro 2. Matriz del diseño factorial aplicado para el estudio de la hidrólisis alcalina de PET en función de temperatura y relación NaOH:PET

Tratamiento	Temperatura (°C)	Relación NaOH:PET (g/g)	Muestras
1	70	0.7	3
2	70	0.85	3
3	70	1	3
4	75	0.7	3
5	75	0.85	3
6	75	1	3
7	80	0.7	3
8	80	0.85	3
9	80	1	3

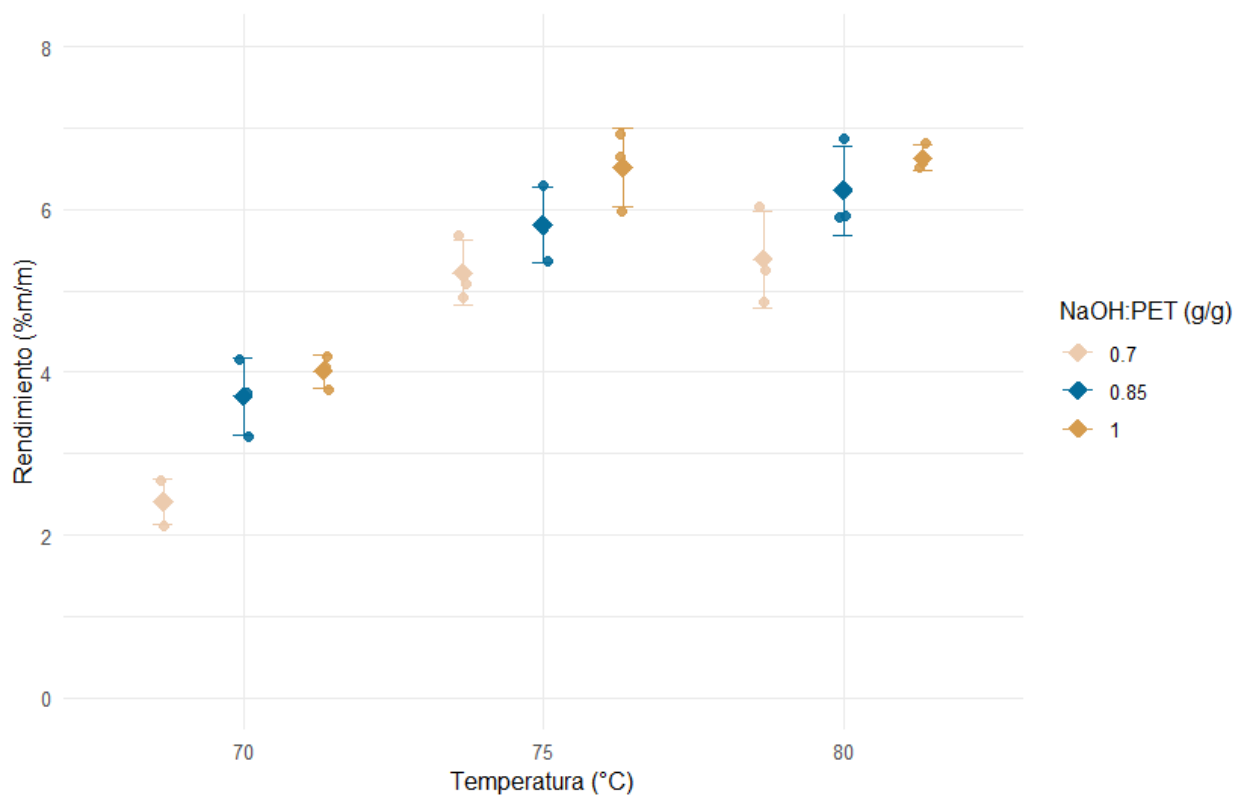
Nota. Este cuadro presenta el diseño experimental que se llevó a cabo para evaluar la influencia de la temperatura y relación base-polímero sobre el rendimiento de recuperación de sólidos totales y de estos corregidos por contenido de TPA. Se trata de un diseño 3^2 , 3 niveles (conformado por un valor bajo, medio y alto) para dos factores. (Elaboración propia).

Cuadro 3. Picos observados por FTIR de productos obtenidos de la hidrólisis alcalina de PET bajo distintas condiciones de temperatura y relación NaOH:PET

No.	Condición	O-H 3300–2500	C=O (ácido)	C–O (ácido)	O-H Ácido Carboxílico	C=C aromático (~1600/1580)	¿Éster? (~1730)
1	70 °C, 0.7	Sí	1677.5	1282.8	1424	Sí	No
2	70 °C, 0.85	Sí	1676.6	1281.5	1423.5	Sí	Sí
3	70 °C, 1.0	Sí	1678.7	1284.5	1424.3	Sí	No
4	75 °C, 0.7	Sí	1677.7	1285	1424	Sí	No
5	75 °C, 0.85	Sí	1677.8	1282.8	1424.5	Sí	No
6	75 °C, 1.0	Sí	1676.5	1281.6	1423.5	Sí	Sí
7	80 °C, 0.7	Sí	1677.4	1283.6	1424.3	Sí	No
8	80 °C, 0.85	Sí	1677.9	1282.7	1424.1	Sí	No
9	80 °C, 1.0	Sí	1677.7	1283	1424.3	Sí	No

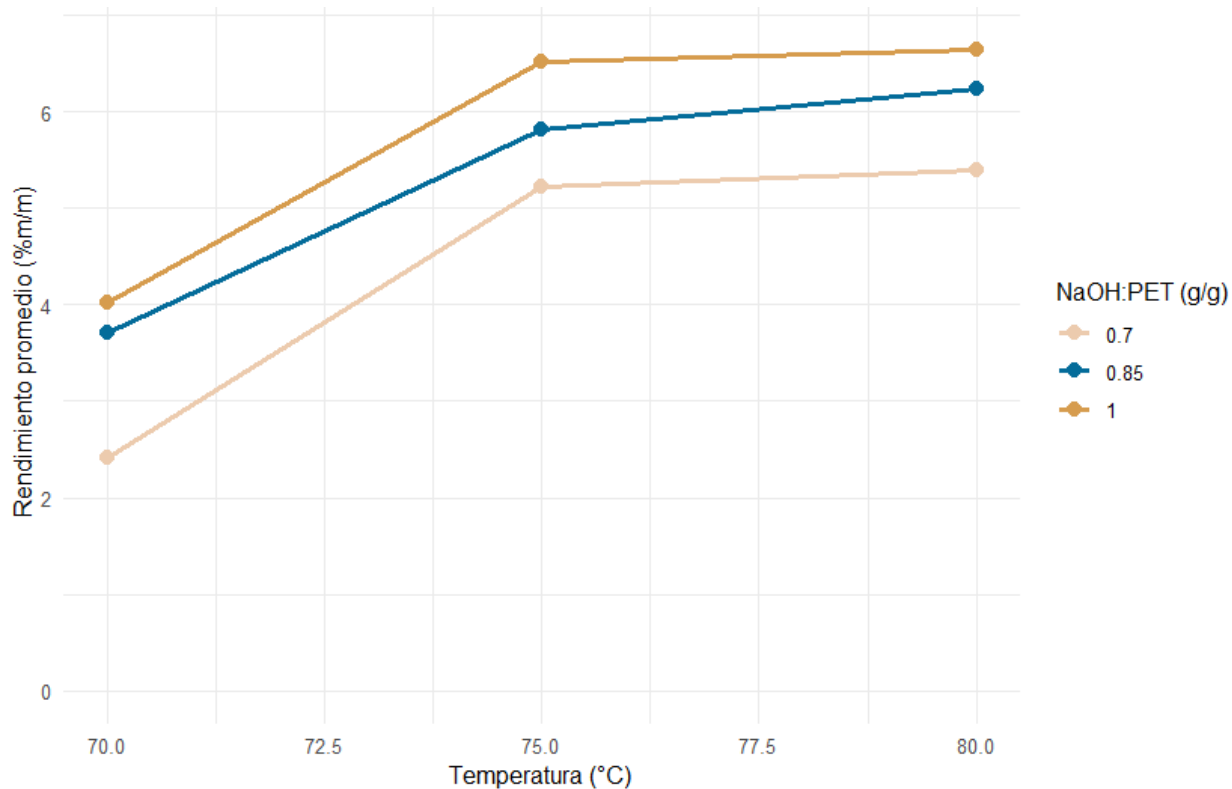
Nota. Este cuadro muestra los picos característicos identificados mediante espectroscopía FTIR para los productos obtenidos tras la hidrólisis alcalina de PET, en función de las nueve combinaciones de temperatura y relación base/polímero del diseño factorial. Se observaron las bandas correspondientes al grupo hidroxilo, carbonilo ácido, carboxilo y aromáticos. El análisis fue realizado sobre sólidos secos identificados como TPA. Se debe notar que en la misma la banda de OH se observaban otros picos que coinciden con lo observado en el estándar de TPA presentado en la sección de antecedentes; ver los espectros IR obtenidos en la sección de apéndice. También cabe mencionar que solo se tomó como resultado positivo la presencia del éster en aquellos espectros donde el software de análisis reconoció el pico respectivo, aunque en todas las muestras se llega a observar una deformación en esa longitud de onda. El análisis se llevó a cabo en un espectrofotómetro infrarrojo Frontier marca Perkin Elmer. (Elaboración propia).

Gráfica 3. Rendimiento de recuperación de sólidos tras la hidrólisis alcalina de PET en función de temperatura y relación NaOH:PET



Nota. El gráfico, elaborado en R, muestra la evolución del rendimiento total de sólidos recuperados tras la hidrólisis alcalina de PET, según las nueve condiciones experimentales del diseño factorial 3². Las mediciones corresponden al rendimiento en peso recuperado antes de aplicar corrección por contenido de TPA. Las condiciones experimentales fueron ejecutadas bajo temperatura ambiente de 24 °C y presión atmosférica de 0.99 bar. (Elaboración propia).

Gráfica 4. Tendencia del rendimiento de recuperación de sólidos tras la hidrólisis alcalina de PET en función de la temperatura para cada relación NaOH:PET



Nota. Se presenta la tendencia, elaborada en R, del rendimiento promedio de recuperación de sólidos en función de la temperatura de reacción, para cada nivel de relación base/polímero evaluada. Las condiciones experimentales fueron ejecutadas bajo temperatura ambiente de 24 °C y presión atmosférica de 0.99 bar. (Elaboración propia).

Cuadro 4. Prueba de normalidad de Shapiro-Wilk para los residuos del modelo ANOVA de los rendimientos de recuperación de sólidos tras la hidrólisis alcalina de PET y de este corregido por contenido de TPA

Variable estudiada	Estadístico W	Valor p
Rendimiento de recuperación de sólidos	0.956	0.292
Rendimiento corregido por contenido de TPA	0.965	0.470

Nota. Se presentan los resultados de la prueba de normalidad de Shapiro-Wilk, calculada con R, para ambas variables dependientes evaluadas: el rendimiento de recuperación de sólidos y el rendimiento corregido por contenido de TPA. En ambos casos, los valores de $p > 0.05$ indican que no se rechaza la hipótesis nula de normalidad, cumpliéndose así uno de los supuestos necesarios para la validez del análisis de varianza. (Elaboración propia).

Cuadro 5. Resultados del análisis de varianza para los rendimientos de recuperación de sólidos tras la hidrólisis alcalina de PET

Fuente de variación	Grados de libertad	Suma de cuadrados	Cuadrados medios	Valor F	Valor p
Temperatura	2	40.53	20.27	110.79	<0.001
Relación NaOH:PET	2	8.87	4.44	24.25	<0.001
Interacción	4	0.42	0.11	0.58	0.681
Residuales	18	3.29	0.18	---	---

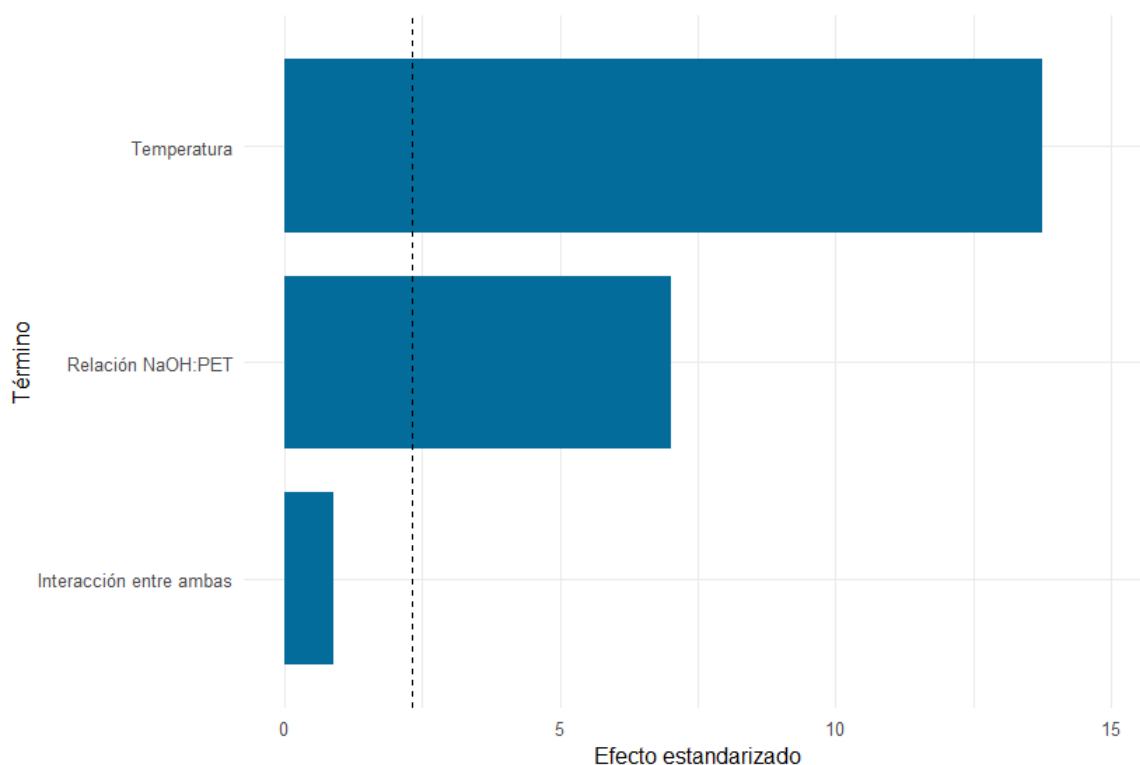
Nota. Se muestran los resultados del análisis de varianza (ANOVA) aplicado al rendimiento de recuperación de sólidos, considerando como factores la temperatura, la relación NaOH:PET y su interacción. Los valores de $p < 0.001$ tanto para temperatura como para la relación base/polímero indican efectos altamente significativos sobre el rendimiento. (Elaboración propia).

Cuadro 6. Comparaciones múltiples de Tukey HSD entre niveles de temperatura y relación NaOH:PET para los rendimientos de recuperación de sólidos tras la hidrólisis alcalina de PET

Comparación	Diferencia media	IC inferior	IC superior	Valor p
Temperatura				
75 – 70 °C	2.47	1.96	2.99	<0.001
80 – 70 °C	2.71	2.20	3.22	<0.001
80 – 75 °C	0.24	-0.28	0.75	0.480
Relación NaOH:PET				
0.85 – 0.70	0.91	0.39	1.42	<0.001
1.0 – 0.70	1.38	0.87	1.90	<0.001
1.0 – 0.85	0.47	-0.04	0.99	0.074

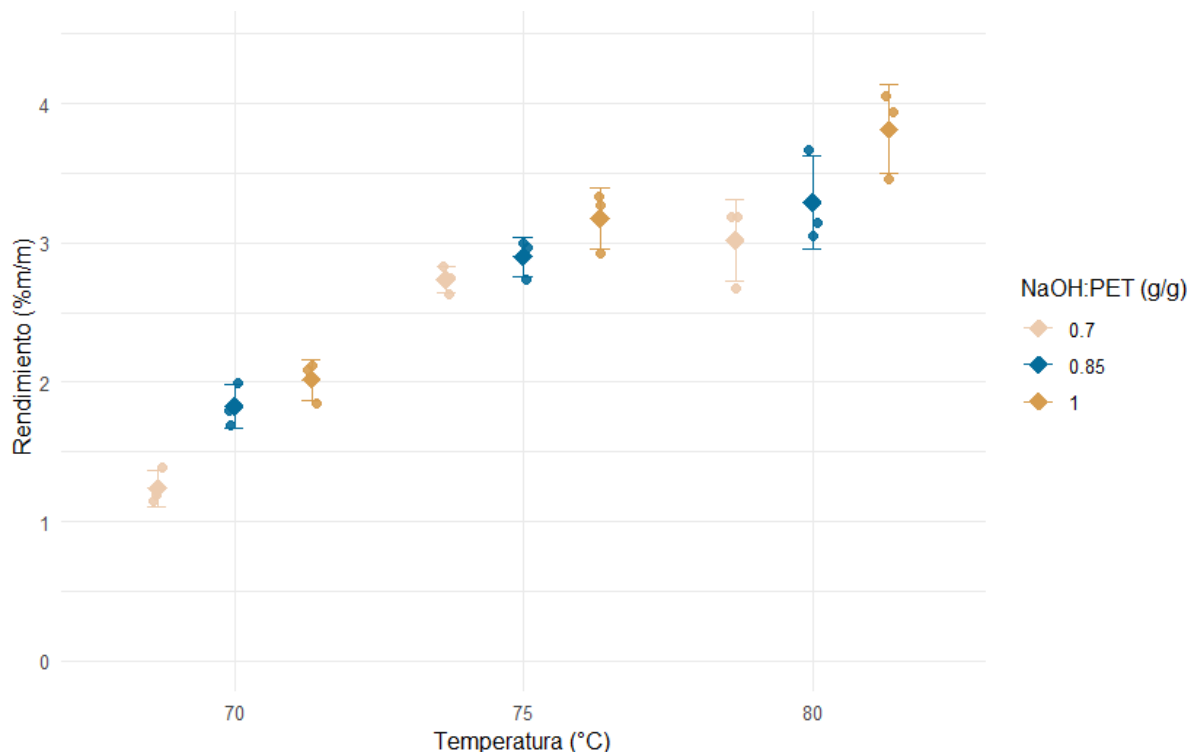
Nota. Se presentan las comparaciones pareadas mediante el método de Tukey HSD, aplicadas a los niveles de los factores temperatura y relación base/polímero (NaOH:PET). Los valores mostrados incluyen la diferencia de medias, los intervalos de confianza del 95% (IC inferior y superior) y el valor p correspondiente a cada comparación. (Elaboración propia).

Gráfica 5. Diagrama de Pareto de efectos estandarizados para los rendimientos de recuperación de sólidos tras la hidrólisis alcalina de PET



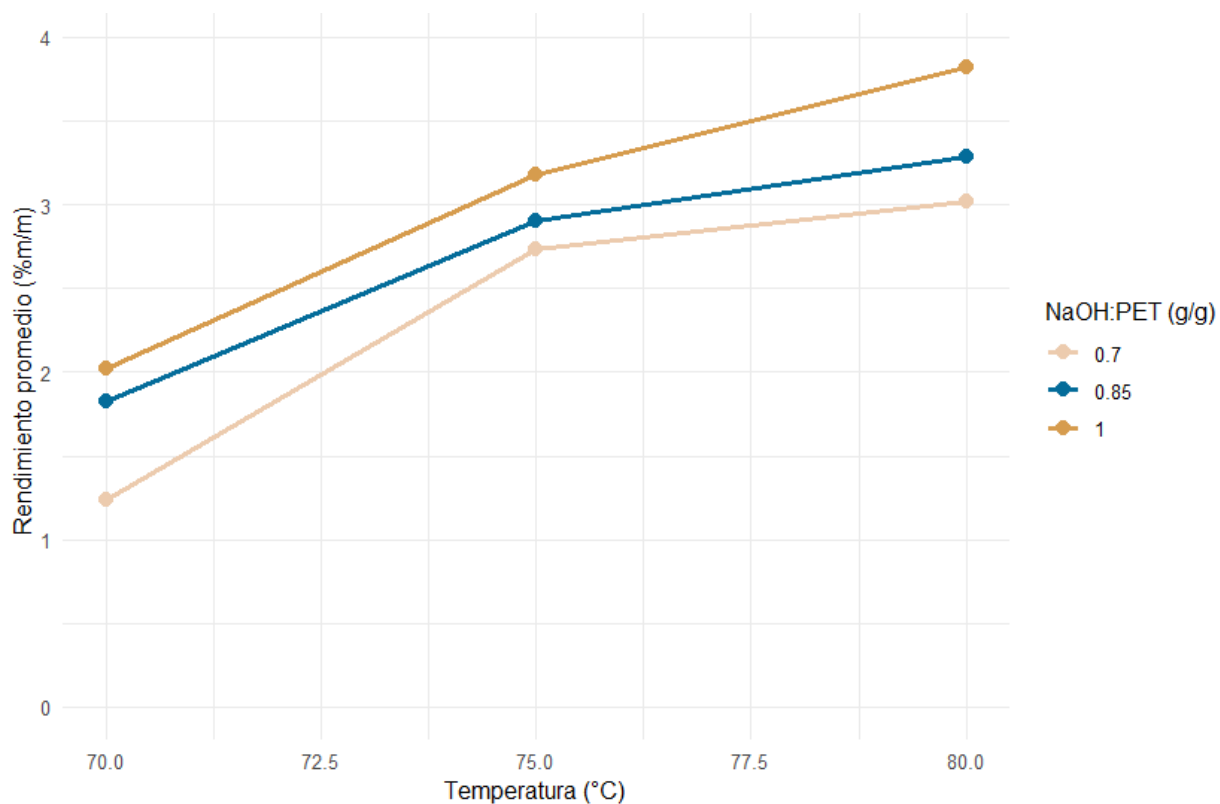
Nota. El diagrama de Pareto muestra la magnitud relativa de los efectos estandarizados de los factores temperatura, relación NaOH:PET y su interacción sobre el rendimiento de recuperación de sólidos. Se observa que la temperatura fue el factor más influyente, seguida por la relación base/polímero, mientras que la interacción entre ambos no tuvo un efecto significativo. (Elaboración propia).

Gráfica 6. Rendimiento corregido por contenido de TPA en los sólidos obtenidos en función de temperatura y relación NaOH:PET



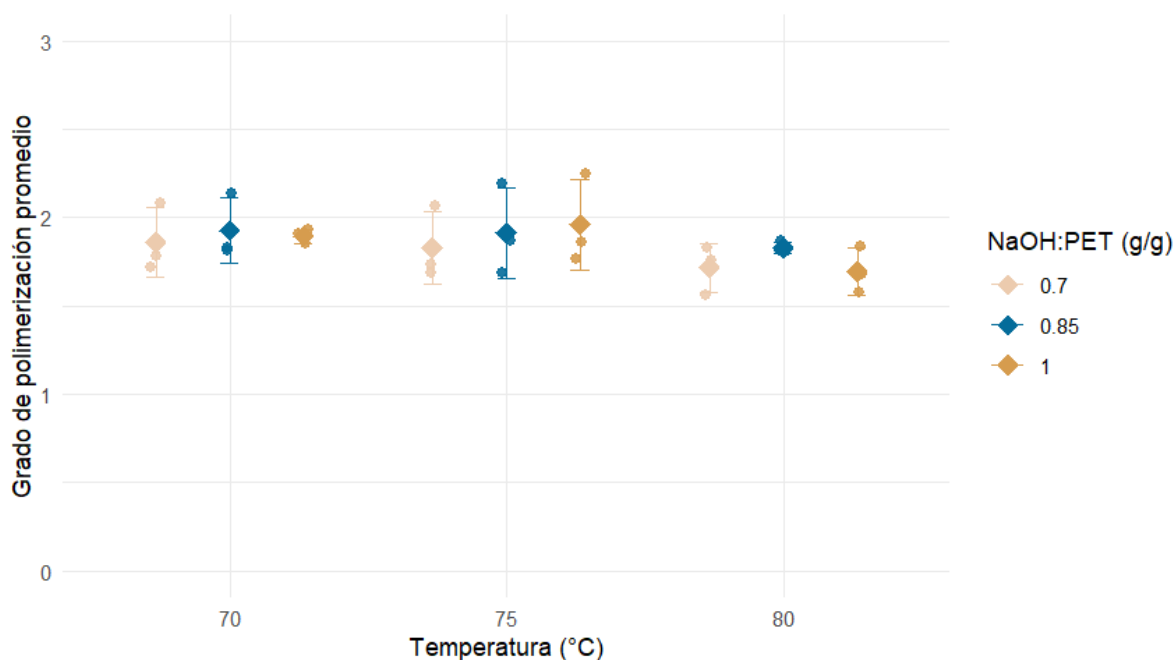
Nota. El gráfico, elaborado en R, muestra la evolución del rendimiento corregido por TPA tras la hidrólisis alcalina de PET, según las nueve condiciones experimentales del diseño factorial 3^2 . Las mediciones corresponden al rendimiento al aplicar la pureza de TPA obtenida por titulación. Las condiciones experimentales fueron ejecutadas bajo temperatura ambiente de 24 °C y presión atmosférica de 0.99 bar. (Elaboración propia).

Gráfica 7. Tendencia del rendimiento corregido por contenido de TPA en los sólidos obtenidos en función de la temperatura para cada relación NaOH:PET



Nota. Se presenta la tendencia, elaborada en R, del rendimiento corregido por TPA en función de la temperatura de reacción, para cada nivel de relación base/polímero evaluada. Las condiciones experimentales fueron ejecutadas bajo temperatura ambiente de 24 °C y presión atmosférica de 0.99 bar. (Elaboración propia).

Gráfica 8. Grado de polimerización del producto en función de la temperatura de reacción y relación NaOH:PET



Nota. Se muestra el promedio del grado de polimerización del producto obtenido tras la hidrólisis alcalina de PET, bajo diferentes combinaciones de temperatura y relación base/polímero. Esto indica la presencia de oligómeros en el producto obtenido. (Elaboración propia).

Cuadro 7. Resultados del análisis de varianza para los rendimientos corregidos por contenido de TPA en los sólidos obtenidos

Fuente de variación	Grados de libertad	Suma de cuadrados	Cuadrados medios	Valor F	Valor p
Temperatura	2	13.67	6.84	141.80	<0.001
Relación NaOH:PET	2	2.04	1.02	21.18	<0.001
Interacción	4	0.24	0.06	1.26	0.324
Residuales	18	0.87	0.05	---	---

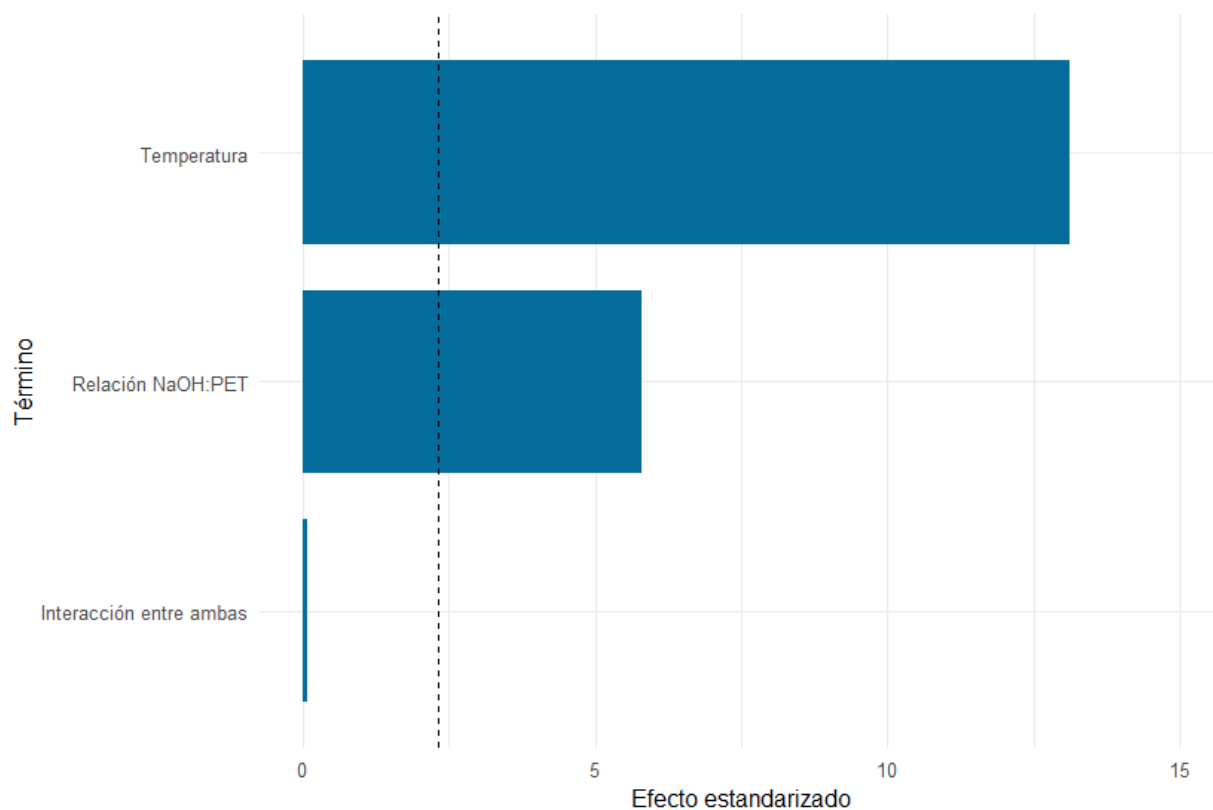
Nota. Se muestran los resultados del análisis de varianza (ANOVA) aplicado al rendimiento corregido por TPA, considerando como factores la temperatura, la relación NaOH:PET y su interacción. Los valores de $p < 0.001$ tanto para temperatura como para la relación base/polímero indican efectos altamente significativos sobre el rendimiento. (Elaboración propia).

Cuadro 8. Comparaciones múltiples de Tukey HSD entre niveles de temperatura y relación NaOH:PET para los rendimientos corregidos por contenido de TPA en los sólidos obtenidos

Comparación	Diferencia media	IC inferior	IC superior	Valor p
Temperatura				
75 – 70 °C	1.24	0.98	1.51	<0.001
80 – 70 °C	1.68	1.42	1.94	<0.001
80 – 75 °C	0.44	0.17	0.70	0.001
Relación NaOH:PET				
0.85 – 0.70	0.34	0.08	0.61	0.010
1.0 – 0.70	0.67	0.41	0.94	<0.001
1.0 – 0.85	0.33	0.07	0.60	0.013

Nota. Se presentan las comparaciones pareadas mediante el método de Tukey HSD, aplicadas a los niveles de los factores temperatura y relación base/polímero (NaOH:PET). Los valores mostrados incluyen la diferencia de medias, los intervalos de confianza del 95% (IC inferior y superior) y el valor p correspondiente a cada comparación. (Elaboración propia).

Gráfica 9. Diagrama de Pareto de efectos estandarizados para los rendimientos corregidos por contenido de TPA en los sólidos obtenidos



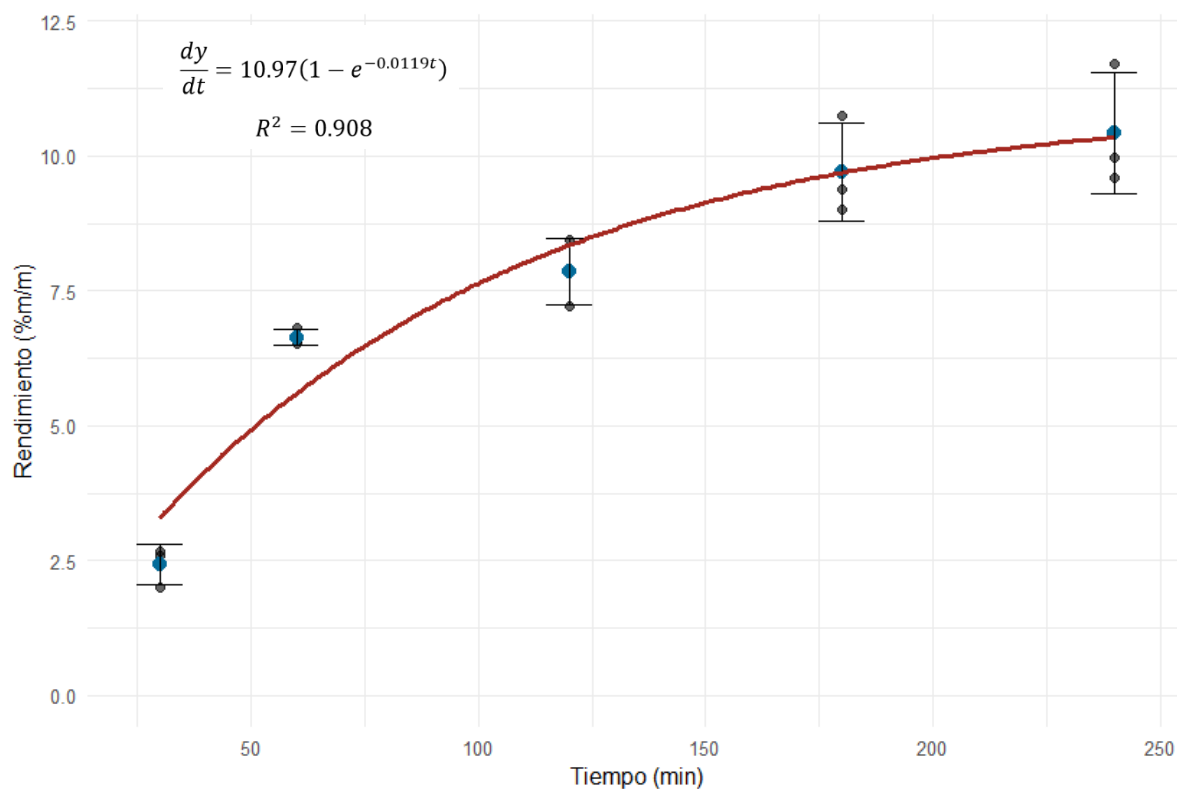
Nota. El diagrama de Pareto muestra la magnitud relativa de los efectos estandarizados de los factores temperatura, relación NaOH:PET y su interacción sobre el rendimiento corregido por contenido de TPA. Se observa que la temperatura fue el factor más influyente, seguida por la relación base/polímero, mientras que la interacción entre ambos no tuvo un efecto significativo. (Elaboración propia).

Cuadro 9. Picos observados por FTIR de productos obtenidos de la hidrólisis alcalina de PET a diferentes tiempos de reacción

Tiempo (min)	O–H 3300–2500	C=O (ácido)	C–O (ácido)	O–H Ácido Carboxílico	C=C aromático (~1600/1580)	¿Éster? (~1730)
30	Sí	1678.3	1283.6	1423.9	Sí	No
60	Sí	1677.7	1283	1424.3	Sí	No
120	Sí	1676.9	1281.5	1423.7	Sí	No
180	Sí	1676.8	1281.5	1423.8	Sí	No
240	Sí	1678.4	1282.8	1424.1	Sí	No

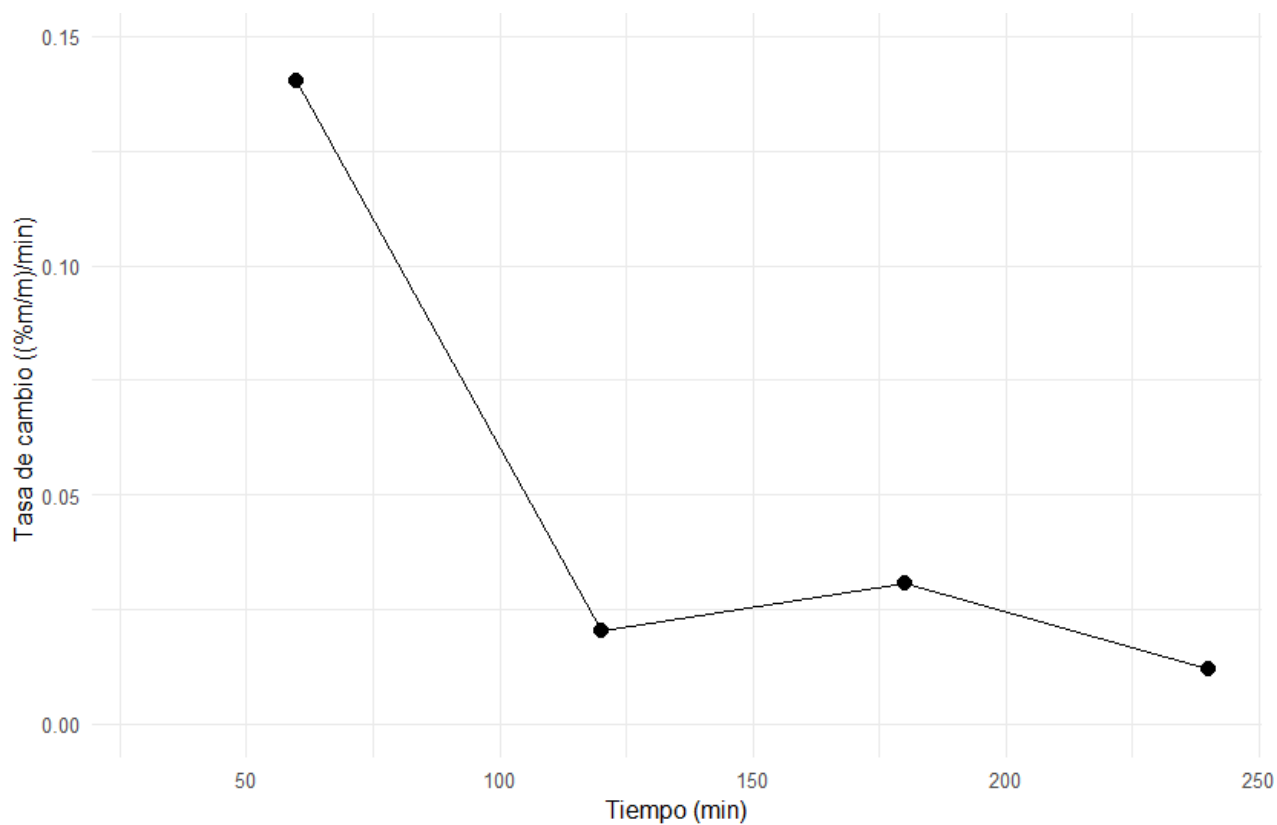
Nota. Este cuadro muestra los picos característicos identificados mediante espectroscopía FTIR para los productos obtenidos tras la hidrólisis alcalina de PET, en función del tiempo a condiciones de reacción de 80 °C y relación NaOH:PET de 1.0 g/g. Se observaron las bandas correspondientes al grupo hidroxilo, carbonilo ácido, carboxilo y aromáticos. Se debe notar que en la misma la banda de OH se observaban otros picos que coinciden con lo observado en el estándar de TPA presentado en la sección de antecedentes; ver los espectros IR obtenidos en la sección de apéndice. También cabe mencionar que solo se tomó como resultado positivo la presencia del éster en aquellos espectros donde el software de análisis reconoció el pico respectivo, aunque en todas las muestras se llega a observar una deformación en esa longitud de onda. El análisis se llevó a cabo en un espectrofotómetro infrarrojo Frontier marca Perkin Elmer. (Elaboración propia).

Gráfica 10. Rendimientos de recuperación de sólidos tras la hidrólisis alcalina de PET en función del tiempo



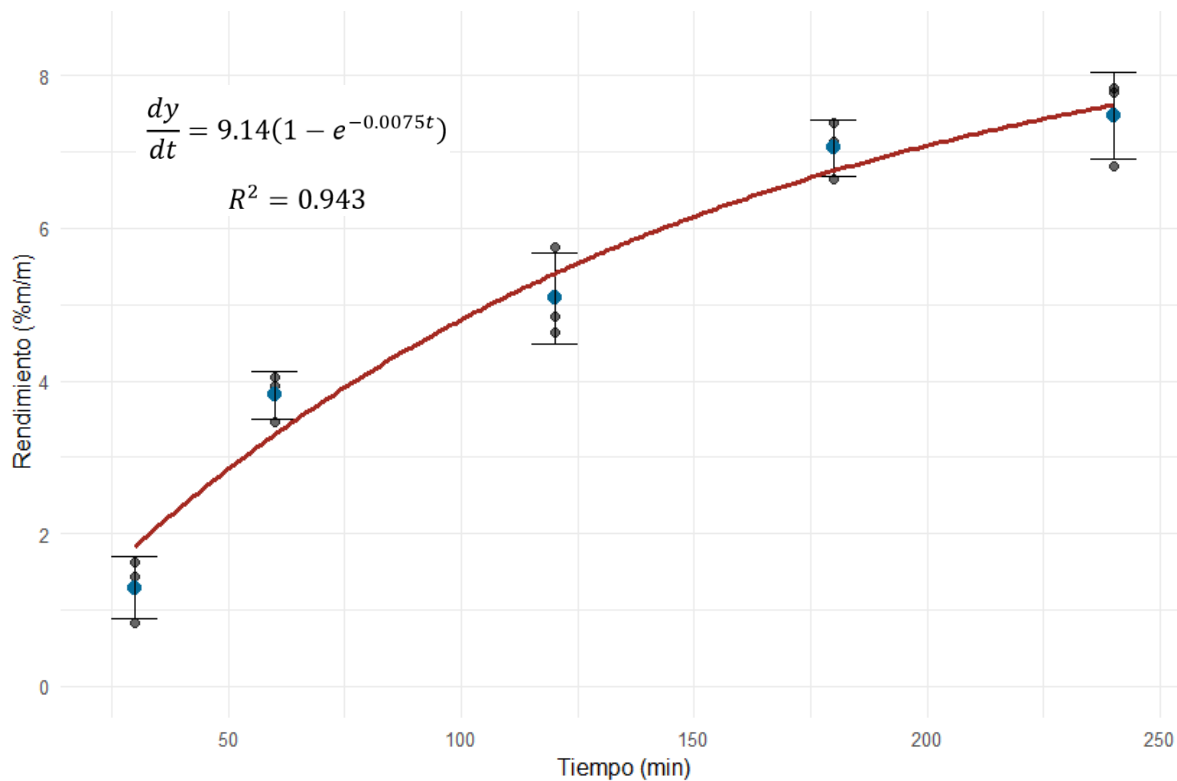
Nota. Se muestra el comportamiento del rendimiento de sólidos recuperados a lo largo del tiempo de reacción, ajustado mediante una regresión exponencial. El modelo fue ajustado a partir de los datos experimentales obtenidos para las diferentes duraciones evaluadas. (Elaboración propia).

Gráfica 11. Tasa de cambio del rendimiento de recuperación de sólidos tras la hidrólisis alcalina de PET en función del tiempo



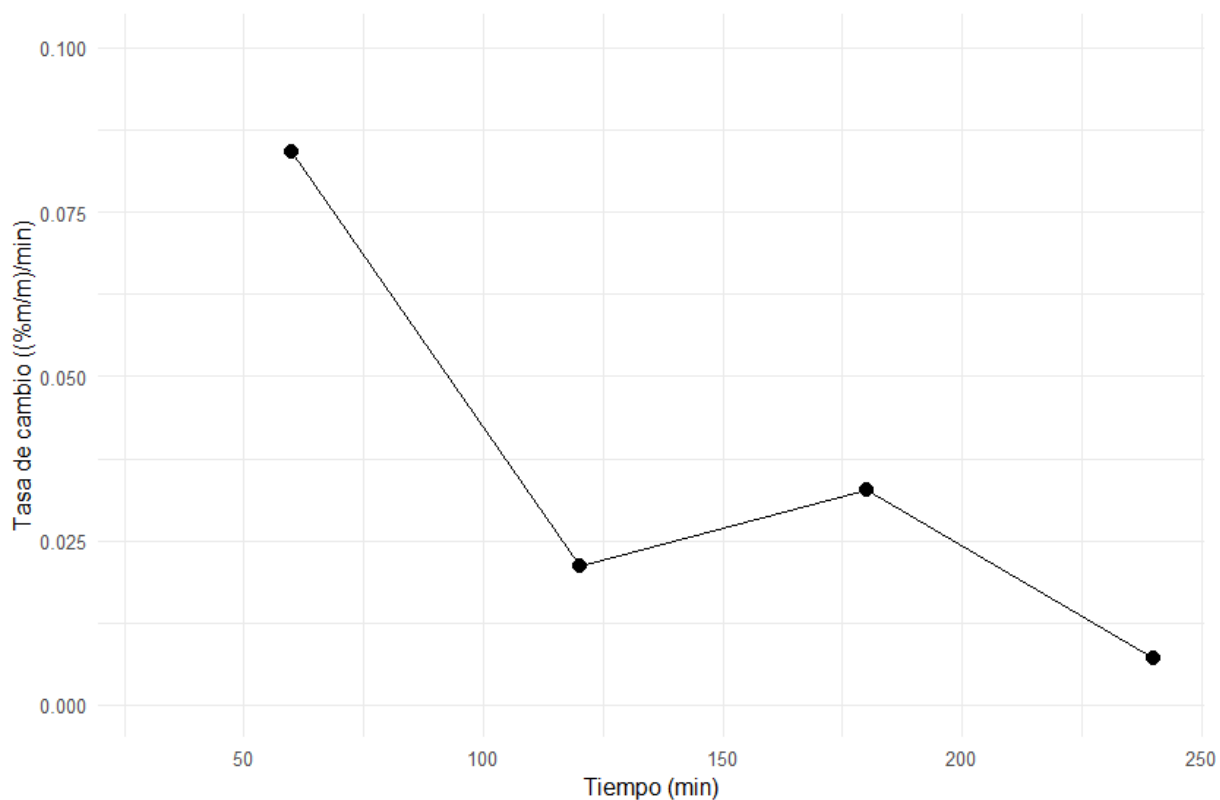
Nota. Se presenta la tasa de cambio del rendimiento de sólidos recuperados entre intervalos consecutivos de tiempo, calculada a partir de los datos experimentales de la Gráfica 10. La representación permite visualizar la variación de la velocidad de la reacción a lo largo del proceso. (Elaboración propia).

Gráfica 12. Rendimiento corregido por contenido de TPA en los sólidos obtenidos en función del tiempo



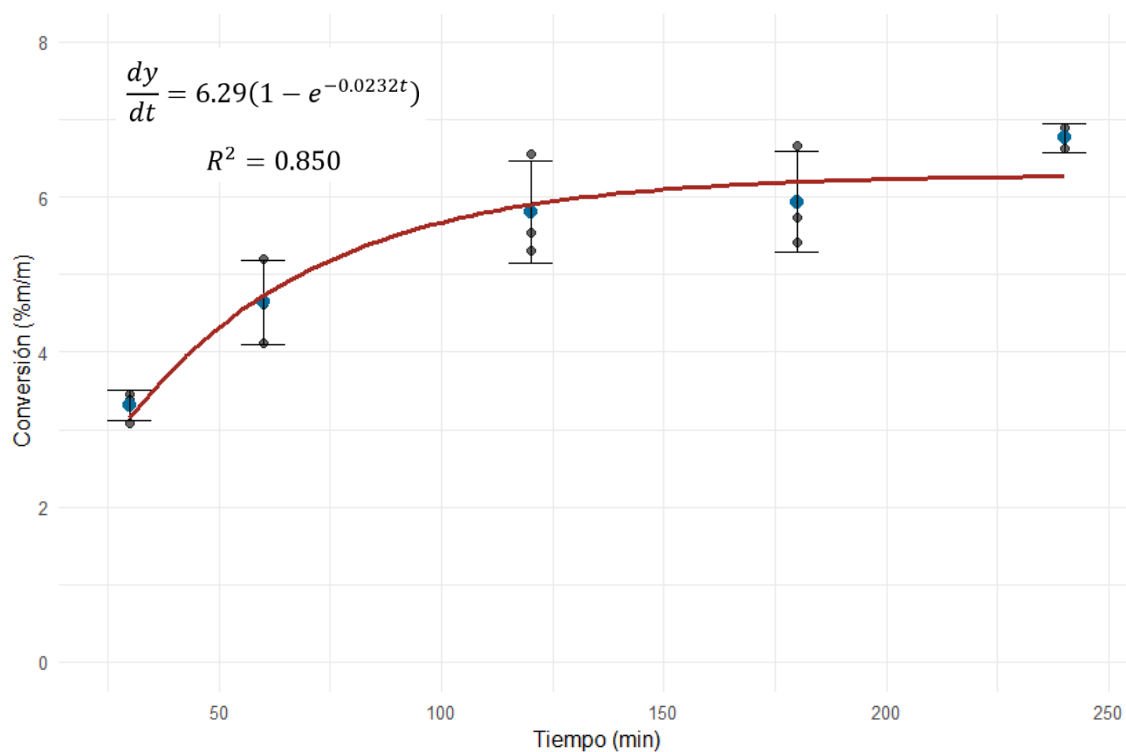
Nota. Se muestra el comportamiento del rendimiento corregido por TPA a lo largo del tiempo de reacción, ajustado mediante una regresión exponencial. El modelo fue ajustado a partir de los datos experimentales obtenidos para las diferentes duraciones evaluadas. (Elaboración propia).

Gráfica 13. Tasa de cambio del rendimiento corregido por contenido de TPA en los sólidos obtenidos en función del tiempo



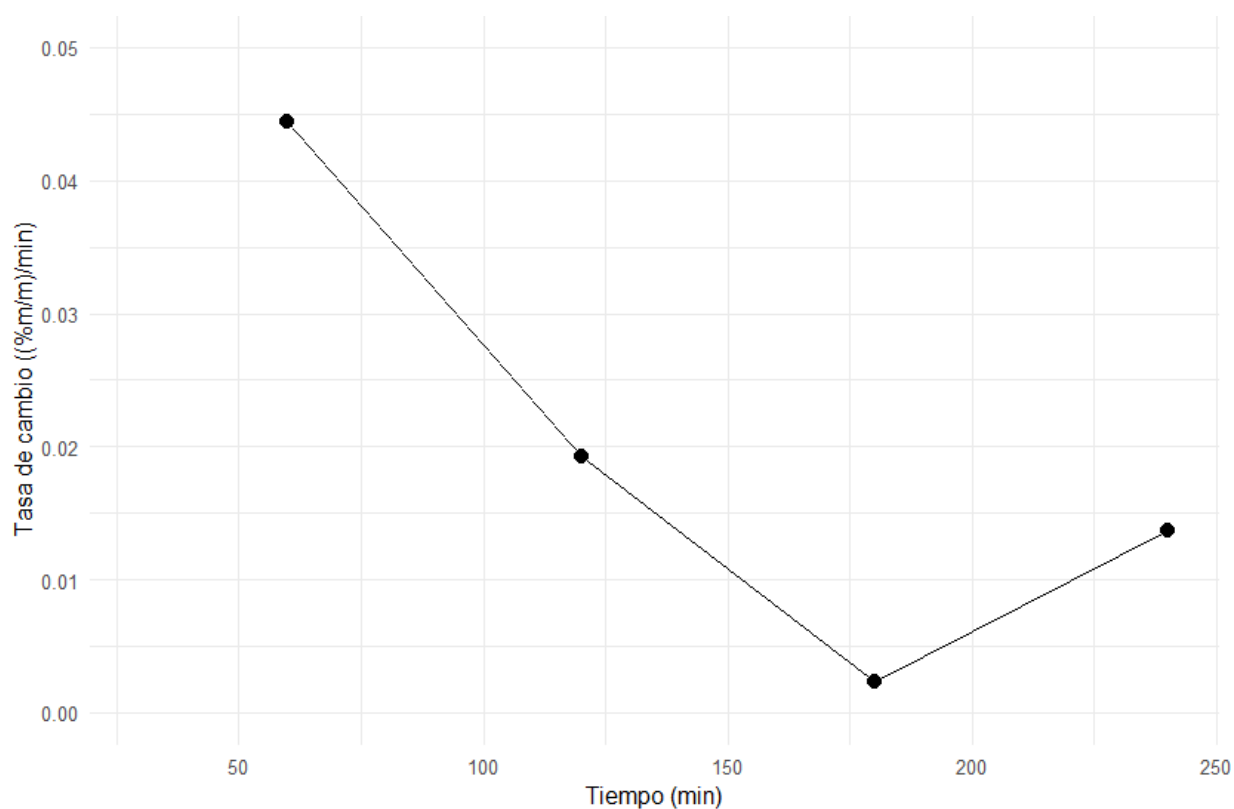
Nota. Se presenta la tasa de cambio del rendimiento corregido por TPA entre intervalos consecutivos de tiempo, calculada a partir de los datos experimentales de la Gráfica 12. La representación permite visualizar la variación de la velocidad de la reacción a lo largo del proceso. (Elaboración propia).

Gráfica 14. Conversión del PET en función del tiempo



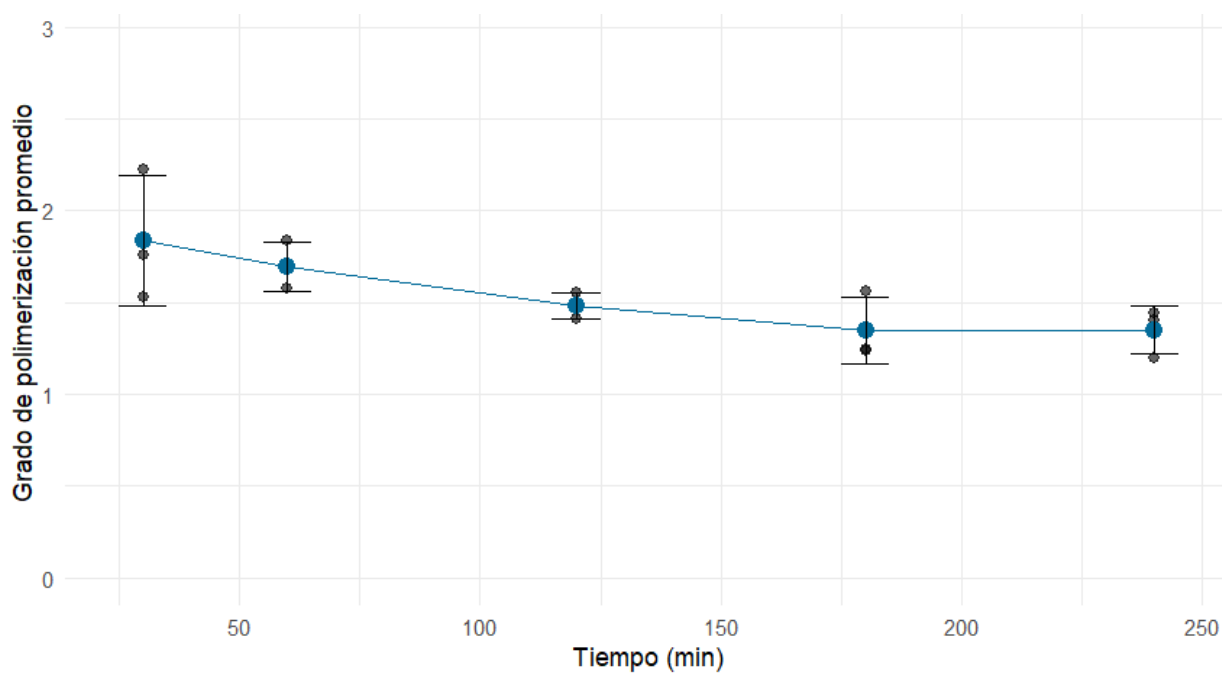
Nota. Se muestra el comportamiento de la conversión del PET a lo largo del tiempo de reacción, ajustado mediante una regresión exponencial. El modelo fue ajustado a partir de los datos experimentales obtenidos para las diferentes duraciones evaluadas. (Elaboración propia).

Gráfica 15. Tasa de cambio de la conversión del PET en función del tiempo



Nota. Se presenta la tasa de cambio de la conversión del PET entre intervalos consecutivos de tiempo, calculada a partir de los datos experimentales de la Gráfica 14. La representación permite visualizar la variación de la velocidad de la reacción a lo largo del proceso. (Elaboración propia).

Gráfica 16. Grado de polimerización del producto en función del tiempo



Nota. Se presenta el grado de polimerización promedio del producto sólido obtenido tras la hidrólisis alcalina de PET a lo largo del tiempo de reacción. Los valores corresponden a muestras obtenidas a diferentes tiempos bajo condiciones constantes de temperatura (80 °C) y relación NaOH:PET = 1.00 g/g. (Elaboración propia).

Cuadro 10. Análisis costo-beneficio de la hidrólisis alcalina de PET según la combinación de temperatura y relación NaOH:PET

No.	Temperatura (°C)	Relación NaOH:PET (g/g)	Beneficio (Q)	Costo (Q)	Beneficio/Costo
1	70	0.7	Q0.03	Q5.49	0.0048
2	70	0.85	Q0.04	Q6.08	0.0064
3	70	1	Q0.04	Q6.66	0.0064
4	75	0.7	Q0.06	Q5.50	0.0106
5	75	0.85	Q0.06	Q6.08	0.0101
6	75	1	Q0.07	Q6.67	0.0101
7	80	0.7	Q0.06	Q5.51	0.0116
8	80	0.85	Q0.07	Q6.09	0.0114
9	80	1	Q0.08	Q6.68	0.0121

Nota. Se muestra el análisis comparativo de los beneficios obtenidos por recuperación de TPA frente al costo total conformado por los costos de reactivos, así como de energía para cada combinación experimental. El beneficio fue calculado en función del rendimiento corregido por TPA y un valor de mercado referencial. Lo mismo pasa con el costo de la materia prima y se agregan los asociados al consumo energética para alcanzar y mantener la temperatura correspondiente, así como los costos de procesos posteriores como centrifugación y secado, aunque el costo agregado para cada combinación es el mismo. (Elaboración propia).

Cuadro 11. Análisis costo-beneficio de la hidrólisis alcalina de PET según el tiempo de reacción

No.	Tiempo (min)	Beneficio por TPA (Q)	Costo total (Q)	Beneficio/Costo
1	30	Q0.03	Q5.92	0.0045
2	60	Q0.08	Q6.68	0.0121
3	120	Q0.11	Q8.20	0.0131
4	180	Q0.15	Q9.72	0.0155
5	240	Q0.16	Q11.23	0.0142

Nota. Se presenta el análisis económico del proceso en función del tiempo de reacción, manteniendo constantes la temperatura (80 °C) y la relación base/polímero (NaOH:PET = 1.00 g/g). El beneficio fue estimado con base en el rendimiento corregido por contenido de TPA, mientras que el costo incluye materia y prima y consumos energéticos asociados al calentamiento, mantenimiento térmico, centrifugación y secado. (Elaboración propia).

VIII. Discusión

El presente trabajo de graduación se completó con la finalidad de evaluar la síntesis de ácido tereftálico (TPA) por hidrólisis alcalina a partir de tereftalato de polietileno (PET). Para lograr esto, se llevó a cabo la reacción variando la temperatura de esta, así como la relación entre la masa de hidróxido de sodio y PET utilizado. De esta forma, se analizaría la conversión de este bajo la condición que generó el mayor rendimiento para, finalmente, completar un estudio de costo-beneficio para observar las ventajas económicas según las condiciones de reacción.

Para completar el primer objetivo, el Cuadro 2 presenta el diseño factorial que se llevó a cabo del tipo 3^2 variando las temperaturas de reacción (70, 75 y 80°C) así como la relación NaOH:PET (0.7, 0.85 y 1.0 g/g) con tres corridas por condición con la finalidad de estudiar la variabilidad del experimento y completar un ANOVA. Este diseño permitió comparar los efectos de las variables, así como su interacción. Se debe notar que Chen (2023), estudió que a 60 - 70°C con uso de solventes orgánicos se logran conversiones casi completas, pero al buscar evaluar el proceso sin uso de estos, se desplazó la ventana operativa a 70 - 80°C. Lo mismo pasa con la relación base-polímero, donde ellos variaron de una relación de 0.25 a 0.7 g/g. El rango de relaciones NaOH:PET utilizado, garantiza un exceso estequiométrico de la base en un sistema sin cosolventes ni catalizadores y permite probar el efecto de este exceso sobre el rendimiento de la reacción; este rango termina siendo fuera de lo previamente estudiado por Chen. Se da el mismo caso con las temperaturas evaluadas. Asimismo, se nota que, al no completarse una caracterización rigurosa de la materia inicial, se refirió a la Figura 25; esta es una hoja de datos de una resina de PET utilizada para botellas por uno de los mayores productores del plástico a nivel mundial.

El Cuadro 3 confirma, por FTIR, el compuesto químico predominante del sólido recuperado tras el proceso llevado a cabo. Se observa en todas las condiciones estudiadas: la banda ancha O-H ($3300\text{--}2500\text{ cm}^{-1}$), cabe mencionar que en esta misma banda se observan los picos presentes en el estándar de TPA de Čolnik et al. (2021)), el carbonilo de ácido alrededor de $1676\text{--}1679\text{ cm}^{-1}$, el C-O también de ácido en $\sim 1281\text{--}1285\text{ cm}^{-1}$, el O-H característico de ácidos y los picos presentes en compuestos aromáticos ($\sim 1600/1580\text{ cm}^{-1}$) (Universidad de Granada, 2002; University of Colorado, 2011); todos consistentes con ácido tereftálico. Es importante notar que se reconoce la presencia de una señal cercana a ~ 1730

cm^{-1} que identifica un éster en algunas corridas, lo cual sugiere la presencia de oligómeros. Esto es coherente con el grado de polimerización presentado en la experimentación. A pesar de la presencia de estos, cabe recalcar la utilidad práctica que pueden poseer de igual forma, después de todo, los oligómeros de corto grado de polimerización (como los que se obtuvieron) pueden ser reincorporados en el proceso de repolimerización de PET (Watson-Sanders & Dadmun, 2024; Wei et al., 2024). Es por esta misma razón que se ha analizado el rendimiento de recuperación de sólidos tras la reacción, es decir, tomando en cuenta la masa de los compuestos oligoméricos, así como el rendimiento corregido por contenido de TPA.

En las gráficas 3 y 4 se observa un aumento del rendimiento de recuperación de sólidos con la temperatura en el caso de las tres relaciones base-polímero estudiadas. Sin embargo, se resalta el salto de este valor al pasar de 70 a 75°C; luego de este, el incremento se atenúa y las curvas tienden a ser una meseta al alcanzar la temperatura de 80°C. En el caso de todas las temperaturas, también se observa una jerarquía entre cada relación NaOH:PET donde la relación de 1.0 g/g da mayor rendimiento que 0.85 g/g y 0.70 g/g, mientras que la condición media da más resultados que la baja. De igual forma, es importante notar que la brecha entre 1.0 y 0.85 g/g es considerablemente menor a la de 1.0 y 0.70 g/g, especialmente al trabajar a 80°C; esto puede indicar rendimiento decreciente a partir del exceso de base cuando la temperatura ya acelera suficientemente la reacción. Esto va relacionado con lo mencionado por McMurry (2011), pues la degradación por hidrólisis básica de poliésteres con NaOH se puede ver limitado porque este ataca principalmente la superficie. Por lo tanto, se puede inferir que la ventaja de una mayor proporción se ve reducida mientras más se incrementa puesto que a un área de reacción constante, el exceso de NaOH propicia menos la reacción. Asimismo, se reconoce que la depolimerización se puede ver limitada por la transferencia de masa entre la fase acuosa y sólida.

En primer lugar, los supuestos para realizar el ANOVA de los datos se cumplen razonablemente. La prueba de Shapiro–Wilk del Cuadro 4 aplicado a los residuos del modelo para el rendimiento de recuperación de sólidos dio como resultado $W = 0.956$, $p = 0.292$, por lo que no se rechaza la normalidad. En este mismo también se observa que se obtuvo normalidad para el rendimiento corregido por contenido de TPA ($W = 0.965$, $p = 0.470$); sin embargo, estos se discutirán más adelante. El ANOVA del Cuadro 5 de dos factores muestra efectos altamente significativos de la temperatura al contar con un valor p considerablemente

menor a 0.001 ($F = 110.79$) y se da el mismo caso con la relación NaOH:PET ($F = 24.25$, $p < 0.001$); por lo que se rechaza la hipótesis nula de que estos factores no afectan la varianza de los resultados. Por otra parte, la interacción entre ambos factores no es significativa al contar con un valor p mayor a 0.05 ($F = 0.58$, $p = 0.681$). Se nota que la temperatura es la responsable por la mayor parte de la variabilidad al tener una suma de cuadrados (SS) de 40.53, seguida de un valor igual a 8.87 para la relación base-polímero. A partir del SS de los factores dividido por el SS total de la experimentación, se reconoce que el 94% de la variabilidad en los rendimientos está explicada por los cambios en temperatura y relación NaOH:PET. Asimismo, el cuadrado medio de los residuales al tener un valor de 0.18 en comparación con 20.27 y 4.44 para los factores, indica reproducibilidad en la experimentación.

Por otra parte, las comparaciones múltiples de Tukey del Cuadro 6 sirven para estudiar más a profundidad dónde se dan las mayores diferencias en los rendimientos de sólidos recuperados. Para temperatura, 75 – 70 °C presenta una diferencia media de 2.47 p.p. (IC 95%: 1.96 - 2.99) con un valor p menor que 0.001 y entre 80 – 70 °C una de 2.71 p.p (IC 95%: 2.20 – 3.22) con un valor p menor que 0.001; indicando contrastes significativos en ambos casos. Sin embargo, la diferencia entre 80 – 75 °C no lo es como se evidencia en su valor p de 0.480. Es decir, el salto clave de temperatura para el rendimiento de recuperación de sólidos se da al cambiar la temperatura de 70 a 75 °C y luego se da una meseta. Para la relación NaOH:PET, las comparaciones entre 0.85 – 0.70 g/g y 1.0 – 0.70 g/g resultaron significativas al presentar diferencias medias de 0.91 p.p. (IC 95%: 0.39 – 1.42; $p < 0.001$) y 1.38 p.p. (IC 95%: 0.87 – 1.90; $p < 0.001$), respectivamente. En contraste, la comparación entre 1.0 – 0.85 g/g no alcanzó significancia estadística al 5% presentando un valor p de 0.074. Esto indica que los incrementos en el rendimiento de recuperación de sólidos se dan mayoritariamente al cambiar las condiciones de 0.70 a 0.85 g/g, pues el beneficio de aumentar de 0.85 a 1.0 g/g es marginal y no estadísticamente confiable. La Gráfica 5 confirma la tendencia previamente discutida de que la temperatura es el factor con mayor efecto estandarizado, seguido por la relación base-polímero, mientras que la interacción entre ambos resulta despreciable. Por lo tanto, para el caso del rendimiento de recuperación de sólidos tras la hidrólisis alcalina de PET, se sugiere que la condición de operación más conveniente de las estudiadas se da al operar a temperaturas de al menos 75 °C con una

relación NaOH:PET de 0.85 g/g. A continuación, se verificará si esto se mantiene cuando el análisis corrige por contenido de TPA.

A diferencia del rendimiento de recuperación de sólidos, que integra TPA más fracciones oligoméricas de bajo grado de polimerización, el rendimiento corregido por TPA aísla el aporte del ácido tereftálico titulado. Incluir ambos indicadores es útil: el primero es por su potencial de reaprovechamiento a través de la repolimerización (Watson-Sanders & Dadmun, 2024; Wei et al., 2024), mientras que el segundo es el criterio directo de rendimiento de TPA.

En las gráficas 6 y 7 se observa que el rendimiento corregido por TPA aumenta con la temperatura para las tres relaciones NaOH:PET, con un salto claro de 70 a 75 °C y un incremento adicional considerablemente menor al 80 °C; una tendencia similar al caso previamente analizado. La jerarquía entre los niveles de base se conserva pues el rendimiento incrementa junto a la relación base-polímero utilizada; sin embargo, se observa gráficamente que la brecha entre 1.0 y 0.85 g/g es mayor que la observada en la de sólidos recuperados, lo que sugiere que parte del beneficio de más base entre la temperatura de 75 a 80 °C es que el grado de polimerización reduce su valor y, por ende, se obtiene más TPA como tal. En otras palabras, la temperatura parece seguir siendo el determinante principal del TPA obtenido, aunque el posterior análisis estadístico confirmará el impacto de los factores.

Antes de analizar estos, se refiere a la Gráfica 8 sobre el grado de polimerización, donde los valores promedios se sitúan entre 1.5 a 2.0. Estos muestran una tendencia leve a disminuir cuando se aumenta la temperatura, con variaciones mínimas en casi todos los niveles de base utilizada. Este comportamiento es coherente con la idea de que elevar la temperatura favorece el rompimiento de enlaces éster, por el modelo de Arrhenius, y empuja el resultado a una mezcla con especies más cortas (Plota & Masek, 2020). Con estas tendencias establecidas, el siguiente paso es contrastarlas con el ANOVA/Tukey del rendimiento corregido por TPA.

En el ANOVA que se encuentra en el Cuadro 7, la temperatura presenta un efecto altamente significativo nuevamente con un valor p menor a 0.001 ($F = 141.80$) y lo mismo ocurre con la relación NaOH:PET ($F = 21.18$; $p < 0.001$); otra vez, la interacción no resulta significativa pues se presenta un valor p de 0.324 ($F = 1.26$). Se nota que la temperatura vuelve a explicar la mayor porción de la variabilidad, con una SS igual a 13.67 frente a 2.04

de la relación base-polímero; en este caso, al observar el SS de los factores y el total, el 95% de la variabilidad total está explicada por los cambios en temperatura y proporción base-polímero. De igual forma, el cuadrado medio de los residuales es de 0.05 en comparación con 6.84 y 1.02 para los factores, indicando reproducibilidad en el experimento.

Por otra parte, las comparaciones múltiples de Tukey del Cuadro 8 precisan dónde se concentran las diferencias. Para temperatura, 75 – 70 °C muestra una diferencia media de 1.24 p.p. (IC 95%: 0.98 – 1.51) con un valor p menor a 0.001 y 80 – 70 °C una diferencia de 1.68 p.p. (IC 95%: 1.42 – 1.94) igual con un valor p menor a 0.001. La diferencia entre este rendimiento corregido por TPA con el rendimiento de sólidos, es que al comparar 80 – 75 °C, la diferencia promedio de 0.44 p.p. (IC 95%: 0.17 – 0.70) sí es significativa con un valor p igual a 0.001; esto evidencia que sí existe un beneficio significativo al elevar la temperatura a 80 °C cuando el rendimiento se mide por el TPA titulado. De igual forma, para la relación NaOH:PET, todos los contrastes resultan ser significativos: 0.85 – 0.70 g/g (diferencia de 0.34 p.p.; 0.08–0.61; p = 0.010), 1.0 – 0.70 g/g (diferencia de 0.67 p.p.; 0.41–0.94; p < 0.001) y también 1.0 – 0.85 g/g (diferencia de 0.33 p.p.; 0.07–0.60; p = 0.013). Esto quiere decir que al corregir por contenido de TPA, la brecha entre 1.0 y 0.85 g/g se amplía y se convierte estadísticamente significativa; esto confirma la separación mencionada en las gráficas 6 y 7. Por otra parte, en la Gráfica 9 de Pareto, los resultados son consistentes con el patrón mencionado pues la temperatura es el término con mayor efecto estandarizado, seguido por la relación NaOH:PET.

En síntesis, para maximizar el rendimiento corregido por TPA la evidencia estadística apoya operar a 80 °C con una relación de NaOH:PET igual a 1.0 g/g; mientras que para masa total de sólidos una temperatura de 75 °C con 0.85 g/g ya resultaba conveniente. Esta distinción refuerza la utilidad de presentar ambos indicadores.

En relación con el segundo objetivo, este se llevó a cabo utilizando las condiciones que presentaron el mayor rendimiento corregido por TPA, así que todas las corridas de este fueron a 80 °C y una relación NaOH:PET de 1.0 g/g. En el Cuadro 9 se observan, en todos los intervalos, las bandas O–H (3300–2500 cm⁻¹), el carbonilo de ácido alrededor de 1677 cm⁻¹, C–O también de ácido en 1282–1285 cm⁻¹, el O–H característico de ácidos y los picos presentes en compuestos aromáticos (~1600/1580 cm⁻¹), sin evidencia del pico de éster

($\sim 1730\text{ cm}^{-1}$). Esto respalda que el progreso de la reacción se refleja principalmente en la cantidad de TPA formado y no en un cambio de identidad del producto.

La Gráfica 10 del rendimiento de recuperación de sólidos muestra justamente un crecimiento asintótico en función del tiempo descrito por la regresión con R^2 igual a 0.908. Este ajuste permite estimar tiempos característicos como $t_{1/2} \approx 58\text{ min}$, $t_{90} \approx 193\text{ min}$ y $t_{95} \approx 252\text{ min}$ donde se observa que tarda aproximadamente una hora en llegar a la mitad del rendimiento máximo de 10.97%, dos horas más para llegar al 90% de este y permitir que la reacción continúe por prácticamente 1 hora adicional solo incrementa el rendimiento por 5 puntos porcentuales. Más adelante se discutirá sobre el punto más económicamente viable en el que se debería de parar la reacción. La misma Gráfica 11 evidencia que la tasa de cambio decae marcadamente entre el tramo de 60 y 120 minutos, con una ligera oscilación hacia los 180 min para volver a caer a los 240 min.

La Gráfica 12 presenta el rendimiento corregido por TPA en función del tiempo, y se encuentra que el ajuste exponencial describe adecuadamente la tendencia con un R^2 de 0.943. El comportamiento en este caso presenta que el $t_{1/2} \approx 92\text{ min}$, $t_{90} \approx 306\text{ min}$ y $t_{95} \approx 399\text{ min}$. Como se observa, al corregir por el contenido de TPA, el rendimiento avanza a una velocidad considerablemente menor; evidenciado también por las magnitudes de los puntos en la Gráfica 13. Por lo tanto, sí es posible obtener rendimientos de TPA titulado en los sólidos obtenidos similares al rendimiento de solo sólidos obtenidos (valor máximo de 9.14 vs 10.97% respectivamente), sin embargo, el tiempo de reacción aumentaría considerablemente. Después de todo, el coeficiente de la variable tiempo en la regresión de la gráfica para el rendimiento de sólidos obtenidos es 1.5 veces de mayor magnitud que al corregirla por contenido de TPA.

Respecto a la conversión de la reacción en función del tiempo (Gráfica 14), la regresión exponencial presentada presenta un R^2 igual a 0.850. Esto significa que el modelo describe de forma adecuada alrededor del 85% de la variabilidad observada en los datos y, por tanto, refleja con solidez la tendencia general de la reacción, aunque en menor medida que las regresiones de los rendimientos. Este valor es coherente con la naturaleza de los datos experimentales que se aproximan a una meseta, ya que conforme la reacción progresa y las variaciones en la conversión son menores (como se ve en la Gráfica 15), la dispersión relativa de los puntos se vuelve más evidente en la regresión. Por esta razón, algunos valores finales

aparecen por encima de la asíntota ajustada, lo cual no implica una conversión mayor al límite físico, sino que el parámetro asíntótico quedó levemente subestimado por el método de ajuste. De igual forma, el comportamiento observado confirma que la conversión tiende a estabilizarse y a aproximarse a un valor máximo, lo cual es consistente con modelos clásicos de reacción entre una fase sólida y otra líquida, donde la acumulación de resistencias adicionales en la película líquida adherida al sólido disminuye progresivamente la velocidad de conversión (Levenspiel, 1999).

En la Gráfica 16 se observa que el grado de polimerización del sólido disminuye de forma sostenida con el tiempo y luego se estabiliza alrededor de 1.4–1.5 hacia los 180–240 minutos. Este comportamiento indica que, bajo 80 °C y NaOH:PET = 1.0 g/g, el rompimiento de cadenas continúa durante las primeras horas generando especies cada vez más cortas. Otra vez se llega a observar que los resultados muestran ganancias marginales decrecientes con el paso del tiempo. El producto por lo tanto estaría compuesto por una mezcla de monómeros y dímeros en su mayoría. Asimismo, se hace notar que las barras de error son más grandes en los tiempos más cortos y su tamaño disminuye con el paso del tiempo, sugiriendo un producto más homogéneo en cuanto al grado de polimerización.

Para completar el tercer objetivo, se realizó un análisis costo-beneficio del proceso de obtención de TPA a escala laboratorio a distintas condiciones de reacción. También se completó para los distintos tiempos de reacción en el caso de la reacción a 80 °C y relación NaOH:PET de 1.0 g/g para determinar en qué tiempo de reacción deja de incrementar de forma apreciable. Para llevar a cabo este estudio, se consideraron solo los costos variables asociados al proceso; como reactivos y energía. Después de todo, el objetivo era comparar de forma relativa las distintas combinaciones de temperatura, relación base-polímero y tiempo dentro del marco experimental. Es importante mencionar que no se incluyeron los costos fijos, como el costo del equipo, mano de obra o uso de instalaciones, así que el indicador Beneficio/Costo funciona como una comparación a pequeña escala entre condiciones. Si se buscara escalar el proceso, por ejemplo, a nivel de planta piloto, se recomienda incorporar al análisis los costos fijos asociados al proceso.

Previo a discutir los resultados, también se señala a que la determinación del Beneficio en este análisis solo valoriza el TPA obtenido, a pesar de que también se forma etilenglicol. Sin embargo, este no se cuantificó ni se evaluó su posible aprovechamiento ya

que el foco del estudio fue exclusivamente la recuperación de TPA. Por lo tanto, los resultados económicos pueden considerarse conservadores en el escenario de que el etilenglicol llegara a valorizarse. La cuantificación y valorización del etilenglicol, así como el estudio de la factibilidad de su aprovechamiento, se proponen como una línea de trabajo posterior.

En primer lugar, al comparar temperatura y proporción base-polímero (Cuadro 10), el indicador Beneficio/Costo aumenta conforme se eleva la temperatura de 70 a 80 °C y al pasar de 0.70 a 1.0 g/g; esto refleja que el beneficio (calculado con el rendimiento corregido por TPA y el precio unitario) crece más rápido que los costos adicionales de utilizar más reactivos y energía por operar a mayores temperaturas. Se debe notar que, a 80 °C, la jerarquía entre niveles de base se mantiene y la condición 1.0 g/g presenta el mayor Beneficio/Costo de todas las combinaciones evaluadas (0.0121), seguida de 0.70 g/g y 0.85 g/g. Después de todo, aunque la base más alta encarece el insumo de NaOH y de HCl para neutralizar, el incremento en TPA puro obtenido compensa ese gasto a escala de laboratorio. En cambio, a 70 y 75 °C las diferencias entre 0.85 y 1.0 g/g son más estrechas. En síntesis, al comparar a la misma duración de reacción, la combinación 80 °C y 1.0 g/g es la que ofrece el mejor rendimiento económico relativo dentro del espacio estudiado.

Al analizar el tiempo de reacción en el Cuadro 11, el Beneficio/Costo muestra un máximo a 180 min (0.0155) y luego desciende a 240 min pese a que el beneficio absoluto aún aumenta. Después de todo, el incremento de TPA obtenido es pequeño en comparación con el incremento del costo total por el uso de energía. En realidad, se observa que, desde la marca de los 60 y 120 minutos, el Beneficio/Costo ya es competitivo con el tiempo de 240 minutos. De igual forma, se llega a la conclusión que, si se busca maximizar el beneficio obtenido de producir TPA a las condiciones estudiadas sobre los costos que esto conlleva, llevar a cabo la reacción por 180 minutos es el punto operativo recomendado; en conjunto con el análisis técnico previo, esta debería darse a 80 °C y una relación NaOH:PET de 1.0 g/g.

IX. Conclusiones

- La temperatura fue el factor con mayor significancia del rendimiento de sólidos recuperados, así como de este corregido por contenido de TPA. La relación NaOH:PET tuvo un efecto positivo secundario. Para sólidos recuperados, el aumento clave se dio de 70 a 75 °C y pasar de 0.70 a 0.85 g/g mejoró el rendimiento; el salto adicional a 1.0 g/g fue marginal. Al corregir por TPA, sí hubo mejora adicional al subir a 80 °C y la diferencia 1.0–0.85 g/g resultó significativa. En consecuencia, si se prioriza masa total de sólidos, conviene operar a temperaturas de 75 °C o mayores y 0.85 g/g; si se prioriza TPA puro, la mejor condición es 80 °C y 1.0 g/g.
- Bajo 80 °C y una relación NaOH:PET de 1.0 g/g, los rendimientos (totales y corregidos por TPA) y la conversión mostraron un comportamiento asintótico: incremento rápido inicial, ganancias marginales decrecientes con el paso del tiempo y estabilización práctica hacia pasados los 200 minutos de reacción. El grado de polimerización del producto descendió hasta rangos de 1.4–1.5 y luego se mantuvo, indicando un sólido más homogéneo a tiempos largos.
- El análisis costo–beneficio indicó que, comparando condiciones a igual duración, la combinación 80 °C – 1.0 g/g brinda el mayor Beneficio/Costo. Al evaluar el tiempo para esa condición, la relación Beneficio/Costo alcanza un máximo en 180 min y disminuye a 240 min por el aumento sostenido de costos frente a ganancias pequeñas. Por lo tanto, la condición recomendada a escala laboratorio es 80 °C, relación NaOH:PET igual a 1.0 g/g y 180 minutos.

X. Recomendaciones

- Completar experimentos a mayor escala para evaluar la influencia de esta sobre la relación Beneficio/Costo y mitigar el error asociado al manejo de masas pequeñas.
- Determinar el tamaño de partícula del sólido obtenido y su dispersión en el medio a lo largo de la reacción.
- Estudiar los fenómenos de transferencia de masa que inciden en la hidrólisis alcalina de PET como la resistencia de película líquida alrededor de este.
- Desarrollar un análisis cinético del sistema evaluado, estimando parámetros como la constante de velocidad de reacción y la energía de activación.
- Explorar nuevos usos de los oligómeros obtenidos en la reacción.
- Analizar cómo las condiciones de reacción afectan la distribución de pesos moleculares de los productos y la composición.
- Evaluar el efecto de la utilización de botellas con sus adhesivos y pegamentos originales en el proceso para evaluar cómo estos componentes adicionales afectan los rendimientos, la pureza del TPA y los requerimientos de tratamiento de los efluentes de reacción.
- Incorporar los costos fijos (equipos, mano de obra e infraestructura) en futuros análisis económicos al escalar el proceso a nivel piloto o industrial.
- Estudiar la recuperación y valorización de subproductos de la reacción (etilenglicol), mediante su cuantificación y análisis de factibilidad técnica y económica de aprovechamiento.

XI. Bibliografía

- Abedsoltan, H. (2023). A focused review on recycling and hydrolysis techniques of polyethylene terephthalate. *Polymer Engineering & Science*, 63(9), 2651–2674. <https://doi.org/10.1002/pen.26406>
- Adroit Market Research. (2022). *PET Resins Market Trends and Growth Drivers*. <https://www.adroitmarketresearch.com/industry-reports/pet-resins-market>
- Alfa Chemistry. (2025). *Acid and Base pH Indicator Reference Guide—Alfa Chemistry*. <https://www.alfa-chemistry.com/resources/acid-and-base-ph-indicator-reference-guide.html>
- Al-Sabagh, A. M., Yehia, F. Z., Eshaq, Gh., Rabie, A. M., & ElMetwally, A. E. (2016). Greener routes for recycling of polyethylene terephthalate. *Egyptian Journal of Petroleum*, 25(1), 53–64. <https://doi.org/10.1016/j.ejpe.2015.03.001>
- Arnold, W. A., Blum, A., Branyan, J., Bruton, T. A., Carignan, C. C., Cortopassi, G., Datta, S., DeWitt, J., Doherty, A.-C., Halden, R. U., Harari, H., Hartmann, E. M., Hrubec, T. C., Iyer, S., Kwiatkowski, C. F., LaPier, J., Li, D., Li, L., Muñiz Ortiz, J. G., ... Zheng, G. (2023). Quaternary Ammonium Compounds: *A Chemical Class of Emerging Concern*. *Environmental Science & Technology*, 57(20), 7645–7665. <https://doi.org/10.1021/acs.est.2c08244>
- Arrecis, M. (2023). Desechos plásticos en el ambiente guatemalteco y microplásticos en humanos. *Revista Análisis de la Realidad Nacional*. https://rarn.usac.edu.gt/wp-content/uploads/2024/02/R240_Desechos_plasticos_en_el_ambiente_guatemalteco_y_microplasticos.pdf
- ASTM. (2020). *Standard Test Method for Acid Number of Terephthalic Acid by Color Titration*. https://img.antpedia.com/standard/files/pdfs_ora/20221211/astm/ASTM%20D8032-20.pdf
- Babaei, M., Jalilian, M., & Shahbaz, K. (2024). Chemical recycling of Polyethylene terephthalate: A mini-review. *Journal of Environmental Chemical Engineering*, 12(3), 112507. <https://doi.org/10.1016/j.jece.2024.112507>
- Barredo, A., Asueta, A., Amundarain, I., Leivar, J., Miguel-Fernández, R., Arnaiz, S., Epelde, E., López-Fonseca, R., & Gutiérrez-Ortiz, J. I. (2023). Chemical recycling of monolayer PET tray waste by alkaline hydrolysis. *Journal of Environmental Chemical Engineering*, 11(3), 109823. <https://doi.org/10.1016/j.jece.2023.109823>
- Benavides, P. T., Dunn, J. B., Han, J., Biddy, M., & Markham, J. (2018). Exploring Comparative Energy and Environmental Benefits of Virgin, Recycled, and Bio-

- Derived PET Bottles. *ACS Sustainable Chemistry & Engineering*, 6(8), 9725–9733. <https://doi.org/10.1021/acssuschemeng.8b00750>
- Bertolotti, B., Chávez, J., Laos, R., Rospigliosi, C., & Nakamatsu, J. (2005). *Poliésteres y Reciclaje Químico del Poli(tereftalato de etileno)*. 2005, 19(1), 13–20.
- Bezeraj, E., Debie, S., Arraez, F. J., Reyes, P., Van Steenberge, P. H. M., D’hooge, D. R., & Edeleva, M. (2025). State-of-the-art of industrial PET mechanical recycling: Technologies, impact of contamination and guidelines for decision-making. *RSC Sustainability*, 3(5), 1996–2047. <https://doi.org/10.1039/D4SU00571F>
- Billmeyer, F. W. (1984). *Textbook of polymer science* (3rd ed). Wiley.
- Brazel, C. S., Rosen, S. L., & Rosen, S. L. (2012). *Fundamental principles of polymeric materials* (Third edition). Wiley.
- Cao, Z., Fu, X., Li, H., Pandit, S., Amombo Noa, F. M., Öhrström, L., Zeleznik, A., & Mijakovic, I. (2023). Synthesis of Metal–Organic Frameworks through Enzymatically Recycled Polyethylene Terephthalate. *ACS Sustainable Chemistry & Engineering*, 11(43), 15506–15512. <https://doi.org/10.1021/acssuschemeng.3c05222>
- Chanda, M. (2013). *Introduction to Polymer Science and Chemistry: A Problem-Solving Approach*, Second Edition (2nd ed). CRC Press.
- Chen, H., & Hu, H. (2023). Solvent System with Improved Hydroxide Reactivity for Mild and High-Efficiency PET Alkaline Hydrolysis. *Industrial & Engineering Chemistry Research*, 62(33), 12925–12934. <https://doi.org/10.1021/acs.iecr.3c01424>
- Čolnik, M., Pečar, D., Knez, Ž., Goršek, A., & Škerget, M. (2021). *Kinetics Study of Hydrothermal Degradation of PET Waste into Useful Products*. *Processes*, 10(1), 24. <https://doi.org/10.3390/pr10010024>
- Data Bridge Market Research. (2025). *Polyethylene Terephthalate (PET) Market – Global Market Size, Share, and Trends Analysis Report – Industry Overview and Forecast to 2032* | Data Bridge Market Research. <https://www.databridgemarketresearch.com/reports/global-polyethylene-terephthalate-pet-market?srsId=afmboor1pqfarj5lgab2wiltjtjvsub9mwulyelehwrh80atjqis2kykz>
- European Commission. (2025, agosto 5). *Single-use plastics*. https://environment.ec.europa.eu/topics/plastics/single-use-plastics_en
- Felder, R. M., & Rousseau, R. W. (2005). *Elementary principles of chemical processes: With integrated media and study tools* (3. ed., 2005 ed., international ed). Wiley.

- Gironi, F., & Piemonte, V. (2011). Life cycle assessment of polylactic acid and polyethylene terephthalate bottles for drinking water. *Environmental Progress & Sustainable Energy*, 30(3), 459–468. <https://doi.org/10.1002/ep.10490>
- Gleick, P. H., & Cooley, H. S. (2009). Energy implications of bottled water. *Environmental Research Letters*, 4(1), 014009. <https://doi.org/10.1088/1748-9326/4/1/014009>
- González, B. (2019). *Los desechos sólidos en la Ciudad de Guatemala—Investigación para todos*. <https://investigacionparatodos.usac.edu.gt/art%C3%ADculos-principales/item/25-desechos-s%C3%B3lidos>
- Hayes, A. (2025). *Benefit-Cost Ratio (BCR): Formula, Calculation, and Example Explained*. *Investopedia*. <https://www.investopedia.com/terms/b/bcr.asp>
- INE. (2021). *Compendio Estadístico Ambiental 2019*. INE. <https://www.ine.gob.gt/estadisticas/bases-de-datos/estadisticas-ambientales/%20>
- Jaramillo, A. S. (2025, agosto 10). *La pesadilla del río Las Vacas, uno de los más contaminados por plásticos del mundo*. El País. <https://elpais.com/clima-y-medio-ambiente/2025-08-10/el-rio-de-guatemala-convertido-en-una-de-las-mayores-corrientes-de-plastico-del-mundo.html>
- Jovanović, A., Bugarčić, M., Simić, M., Pejić, J., & Dimitrijević, J. (2025). The Global Market of PET Production: From Origins to Recycling. *Metallurgical and Materials Data*, 2(4), 113–118. <https://doi.org/10.30544/MMD46>
- Krevelen, D. W. van, & Nijenhuis, K. te. (2009). *Properties of polymers: Their correlation with chemical structure: their numerical estimation and prediction from additive group contributions* (4th, completely rev. ed eds.). Elsevier.
- Lapa, H. M., & Martins, L. M. D. R. S. (2023). p-Xylene Oxidation to Terephthalic Acid: New Trends. *Molecules*, 28(4), 1922. <https://doi.org/10.3390/molecules28041922>
- Levenspiel, O. (1999). *Chemical reaction engineering*. Hauptbd. (3. ed). Wiley.
- López-Fonseca, R., González-Marcos, M. P., González-Velasco, J. R., & Gutiérrez-Ortiz, J. I. (2009). A kinetic study of the depolymerisation of poly(ethylene terephthalate) by phase transfer catalysed alkaline hydrolysis. *Journal of Chemical Technology & Biotechnology*, 84(1), 92–99. <https://doi.org/10.1002/jctb.2011>
- Lower. (2016, febrero 13). *Acid/Base Titration*. Chemistry LibreTexts. [https://chem.libretexts.org/Bookshelves/General_Chemistry/Chem1_\(Lower\)/13%3A_A_Acid-Base_Equilibria/13.05%3A_A_Acid_Base_Titration](https://chem.libretexts.org/Bookshelves/General_Chemistry/Chem1_(Lower)/13%3A_A_Acid-Base_Equilibria/13.05%3A_A_Acid_Base_Titration)
- McMurry, J. (2011). *Fundamentals of organic chemistry* (7th ed). Brooks/Cole/Cengage Learning.

- NEMS. (2023). *Life Cycle Environmental Impacts of PET Plastic Water Bottles*. <https://nems.nih.gov/sustain/Pages/PETWaterBottleImpact.aspx>
- Odian, G. G. (2004). *Principles of polymerization* (4th ed). Wiley-Interscience.
- OECD. (2022). *Global Plastics Outlook: Economic Drivers, Environmental Impacts and Policy Options*. OECD. <https://doi.org/10.1787/de747aef-en>
- Perry, R. H., & Green, D. W. (Eds.). (2008). *Perry's chemical engineers' handbook* (8. ed). McGraw-Hill.
- Plota, A., & Masek, A. (2020). *Lifetime Prediction Methods for Degradable Polymeric Materials—A Short Review*. *Materials*, 13(20), 4507. <https://doi.org/10.3390/ma13204507>
- PubChem. (s/f). *Terephthalic Acid*. Recuperado el 21 de septiembre de 2025, de <https://pubchem.ncbi.nlm.nih.gov/compound/7489>
- RepetCo. (2022). *Main uses of PET, the king of plastic materials*. <https://www.repetco.com/main-uses-of-pet-the-king-of-plastic-materials/>
- Rezazadeh, A., Thomsen, K., Gavala, H. N., Skiadas, I. V., & Fosbøl, P. L. (2021a). Solubility and Freezing Points of Disodium Terephthalate in Water–Ethylene Glycol Mixtures. *Journal of Chemical & Engineering Data*, 66(5), 2143–2152. <https://doi.org/10.1021/acs.jced.1c00052>
- Rezazadeh, A., Thomsen, K., Gavala, H. N., Skiadas, I. V., & Fosbøl, P. L. (2021b). Solubility and Freezing Points of Disodium Terephthalate in Water–Ethylene Glycol Mixtures. *Journal of Chemical & Engineering Data*, 66(5), 2143–2152. <https://doi.org/10.1021/acs.jced.1c00052>
- River Impact. (2024, agosto 12). *Guatemala's Motagua River: Intercepting Truckloads of Plastic Waste every day*. <https://riverimpact.nl/motagua-river/>
- Singh, A., Rorrer, N. A., Nicholson, S. R., Erickson, E., DesVeaux, J. S., Avelino, A. F. T., Lamers, P., Bhatt, A., Zhang, Y., Avery, G., Tao, L., Pickford, A. R., Carpenter, A. C., McGeehan, J. E., & Beckham, G. T. (2021). *Techno-economic, life-cycle, and socioeconomic impact analysis of enzymatic recycling of poly(ethylene terephthalate)*. *Joule*, 5(9), 2479–2503. <https://doi.org/10.1016/j.joule.2021.06.015>
- Skoog, D. A., Crouch, S. R., De la Mora Lugo, E., Holler, F. J., Lanto Arriola, M. A., & West, D. M. (2015). *Fundamentos de química analítica*. <http://www.ebooks7-24.com/?il=798>
- S&P Global. (2025, abril 7). *European recycled to virgin plastics spreads steady despite upstream volatility*. *S&P Global Commodity Insights*.

<https://www.spglobal.com/commodity-insights/en/news-research/latest-news/chemicals/070425-european-recycled-to-virgin-plastics-spreads-steady-despite-upstream-volatility>

SpecialChem. (2025). *Polyethylene Terephthalate (PET)*. <https://www.specialchem.com/plastics/guide/polyethylene-terephthalate-pet-plastic>

Su, Y., Zheng, Q., Suga, Y., & Watanabe, M. (2025). Measurement of solubility of terephthalic acid in water under hydrothermal conditions. *The Journal of Supercritical Fluids*, 218, 106497. <https://doi.org/10.1016/j.supflu.2024.106497>

Textile Exchange. (2024). *Materials Market Report 2024* (p. 75). <https://textileexchange.org/app/uploads/2024/09/Materials-Market-Report-2024.pdf>

Uekert, T., Singh, A., DesVeaux, J. S., Ghosh, T., Bhatt, A., Yadav, G., Afzal, S., Walzberg, J., Knauer, K. M., Nicholson, S. R., Beckham, G. T., & Carpenter, A. C. (2023). Technical, Economic, and Environmental Comparison of Closed-Loop Recycling Technologies for Common Plastics. *ACS Sustainable Chemistry & Engineering*, 11(3), 965–978. <https://doi.org/10.1021/acssuschemeng.2c05497>

UNEP. (2022, febrero 8). *Plastic Pollution*. <https://www.unep.org/plastic-pollution>

UNESDA. (2024, abril 18). *PET Collection rates*. <https://unesda.eu/our-priorities/pet-collection-rates/>

Universidad de Granada. (2002). *Tablas de Espectroscopia*. QUIORED. https://www.ugr.es/~quiorred/lab/tablas_espec/ir.htm

University of Colorado. (2011). *IR: carboxylic acids*. <https://orgchemboulder.com/Spectroscopy/irtutor/carbacidsir.shtml>

Wade, L. G. (2016). *QUIMICA ORGANICA*, VOL I. PEARSON.

Watson-Sanders, S., & Dadmun, M. (2024). More Efficient Chemical Recycling of Poly(Ethylene Terephthalate) by Intercepting Intermediates. *ChemSusChem*, 17(23), e202301698. <https://doi.org/10.1002/cssc.202301698>

Wei, X., Zheng, W., Chen, X., Qiu, J., Sun, W., Xi, Z., & Zhao, L. (2024). Chemical upcycling of poly(ethylene terephthalate) with binary mixed alcohols toward value-added copolyester by depolymerization and repolymerization strategy. *Chemical Engineering Science*, 294, 120103. <https://doi.org/10.1016/j.ces.2024.120103>

World Health Organization. (2019). *Microplastics in drinking-water*. World Health Organization. <https://iris.who.int/handle/10665/326499>

Young, R. J., & Lovell, P. A. (2011). *Introduction to Polymers*, Third Edition (3rd ed). CRC Press.

XII. Anexos

A. Datos originales

Cuadro 12. Datos originales para todas las corridas de las distintas combinaciones de temperatura y relación base-polímero realizadas

Corrida	Temperatura (°C)	Tiempo de reacción (min)	Peso NaOH (± 0.0001 g)	Peso agua (± 0.0001 g)	Peso PET (± 0.0001 g)	Peso PET sin reaccionar (± 0.0001 g)	Peso sólidos recuperados (± 0.0001 g)
1	70	60	2.8016	40.1	4.0030	3.8459	0.0923
2	70	60	3.4480	43.6	4.0079	3.8864	0.1440
3	70	60	4.0023	47.2	4.0011	3.8682	0.1311
4	75	60	2.8431	40.1	4.0070	3.8853	0.1760
5	75	60	3.4021	43.6	4.0063	3.8771	0.1860
6	75	60	4.0018	47.2	4.0045	3.8500	0.2300
7	80	60	2.8401	40.1	4.0025	3.8580	0.1820
8	80	60	3.4215	43.6	4.0081	3.8670	0.2380
9	80	60	4.0656	47.2	4.0087	3.8000	0.2260
10	70	60	2.8685	40.1	4.0046	3.8920	0.0850
11	70	60	3.4648	43.6	4.0055	3.8550	0.1110
12	70	60	4.0024	47.2	4.0060	3.8180	0.1410
13	75	60	2.8333	40.1	4.0006	3.8700	0.1700
14	75	60	3.4141	43.6	4.0025	3.8660	0.1990
15	75	60	4.0133	47.2	4.0087	3.8480	0.2070
16	80	60	2.8063	40.1	4.0130	3.8480	0.1690

Corrida	Temperatura (°C)	Tiempo de reacción (min)	Peso NaOH (±0.0001 g)	Peso agua (±0.0001 g)	Peso PET (±0.0001 g)	Peso PET sin reaccionar (±0.0001 g)	Peso sólidos recuperados (±0.0001 g)
17	80	60	3.4136	43.8	4.0008	3.8260	0.2050
18	80	60	4.0031	47.2	4.0081	3.8430	0.2360
19	70	60	2.8063	40.5	4.0032	3.8820	0.0730
20	70	60	3.4627	43.7	4.0029	3.8480	0.1300
21	70	60	4.0067	47.2	4.0063	3.8250	0.1450
22	75	60	2.8067	40.1	4.0133	3.8480	0.1970
23	75	60	3.4192	43.6	4.0034	3.8470	0.2180
24	75	60	4.0030	47.3	4.0047	3.8490	0.2400
25	80	60	2.8143	40.1	4.0050	3.8400	0.2090
26	80	60	3.4051	43.6	4.0117	3.8530	0.2050
27	80	60	4.0267	47.6	4.0107	3.8260	0.2280

Nota. En este cuadro se encuentran todas las masas de los reactivos utilizados para el proceso, así como las masas de los productos finales. (Elaboración propia).

Cuadro 13. Datos originales para todas las corridas realizadas a distintos tiempos de reacción a 80 °C y una relación NaOH:PET de 1.0 g/g

Corrida	Temperatura (°C)	Tiempo de reacción (min)	Peso NaOH (±0.0001 g)	Peso agua (±0.0001 g)	Peso PET (±0.0001 g)	Peso PET sin reaccionar (±0.0001 g)	Peso sólidos recuperados (±0.0001 g)
28	80	30	4.0094	47.4	4.0034	3.8650	0.0897
29	80	30	4.0647	47.4	4.0027	3.8670	0.0927
30	80	30	4.0018	47.3	4.0106	3.8870	0.0695
9	80	60	4.0656	47.2	4.0087	3.8000	0.2260
18	80	60	4.0031	47.2	4.0081	3.8430	0.2360

Corrida	Temperatura (°C)	Tiempo de reacción (min)	Peso NaOH (±0.0001 g)	Peso agua (±0.0001 g)	Peso PET (±0.0001 g)	Peso PET sin reaccionar (±0.0001 g)	Peso sólidos recuperados (±0.0001 g)
27	80	60	4.0267	47.6	4.0107	3.8260	0.2280
31	80	120	4.0089	47.5	4.0045	3.7420	0.2499
32	80	120	4.0274	47.4	4.0046	3.7920	0.2925
33	80	120	4.0088	47.4	4.0102	3.7880	0.2736
34	80	180	4.0113	47.4	4.0038	3.7740	0.3243
35	80	180	4.0090	47.3	4.0078	3.7910	0.3721
36	80	180	4.0063	47.5	4.0030	3.7360	0.3116
37	80	240	4.0102	47.4	4.0105	3.7340	0.3329
38	80	240	4.0395	47.4	4.0131	3.6820	0.3461
39	80	240	4.0223	47.3	4.0140	3.7480	0.4057

Nota. En este cuadro se encuentran todas las masas de los reactivos utilizados para el proceso, así como las masas de los productos finales. (Elaboración propia).

Cuadro 14. Mediciones para la elaboración de solución de NaOH 0.1 M para la titulación del TPA

Corridas tituladas con dicha solución	Peso NaOH (±0.0001 g)	Volumen aforado (±0.25 mL)	Concentración solución (±0.0001 M)
1 – 7	2.0019	500	0.1000
8 - 27	2.0660	500	0.1032
28 – 34 y 37 – 39	2.0090	500	0.1004
35 – 36	2.0375	500	0.1018

Nota. En este cuadro se encuentran las masas medidas de NaOH al 99% con los que se realizaron las soluciones, todas aforadas en un balón de aforo de 500 mL. Se usaron diferentes soluciones para titular diferentes corridas. (Elaboración propia).

Cuadro 15. Mediciones realizadas durante la titulación de las muestras de sólidos recuperados para determinar su pureza

Corrida	Peso TPA (± 0.0001 g)	Volumen para titulación (± 0.05 mL)
1	0.0393	2.10
2	0.0404	2.10
3	0.0391	2.30
4	0.0353	2.30
5	0.0327	2.20
6	0.0381	2.30
7	0.0329	2.40
8	0.0321	2.00
9	0.0345	2.50
10	0.035	2.30
11	0.0341	2.10
12	0.0379	2.30
13	0.0313	2.10
14	0.0333	2.00
15	0.0345	2.20
16	0.0312	2.00
17	0.0333	2.00
18	0.0326	2.20

Corrida	Peso TPA (± 0.0001 g)	Volumen para titulación (± 0.05 mL)
19	0.0379	2.40
20	0.0339	2.10
21	0.0327	1.90
22	0.0333	1.80
23	0.0355	1.80
24	0.0345	1.70
25	0.0325	2.00
26	0.0306	1.90
27	0.0326	2.00
28	0.0327	2.45
29	0.0312	2.00
30	0.0301	1.50
31	0.0311	2.40
32	0.0318	2.60
33	0.0326	2.40
34	0.0307	2.90
35	0.0328	2.40
36	0.0315	2.95
37	0.0322	3.15
38	0.0317	2.60

Corrida	Peso TPA (± 0.0001 g)	Volumen para titulación (± 0.05 mL)
39	0.0313	2.50

Nota. En este cuadro se encuentran las masas de los sólidos recuperados a titular para determinar la pureza de estos a partir de los volúmenes usados. La solución utilizada para cada corrida se puede identificar en el Cuadro 14. (Elaboración propia).

Cuadro 16. Retención de PET en cada plato utilizado en el tamizado

Tamaño de mesh (mm)	Peso TPA retenido (± 0.1 g)	Porcentaje retenido (± 0.1 %)
9.53	0.0	0.0%
6.35	4.7	5.0%
4.76	18.1	19.1%
3.18	38.0	40.1%
1.00	31.5	33.2%
<1.00	2.5	2.6%
TOTAL	94.8	100%

Nota. En este cuadro se encuentran los datos de las masas retenidas en cada mesh evaluado para el tamaño de partícula del PET triturado a utilizar para la reacción. De este se puede observar que el 73.3% de las partículas se encuentran entre 4.76 mm y 1.00 mm. (Elaboración propia).

B. Cálculos de muestra

Cálculo 1. Conversión de PET

Para el cálculo de conversión de PET se requirió de la Ecuación 4 con todas las variables mencionadas en esa, las cuales se pueden encontrar en el Cuadro 12 y 13; a partir de los resultados de cada una fue que se llevó a cabo los promedios y desviaciones estándar. En el ejemplo se presenta el ejemplo usando la corrida 1.

$$PET_{conversión}(\%) = \frac{m_{PET}^0 - m_{PET}^f}{m_{PET}^0}$$

$$PET_{conversión}(\%) = \frac{(4.0030 - 3.8459)g}{4.0030 g} \cdot 100\% = 3.92\%$$

Este cálculo se completó para cada corrida de reacción utilizado. Resultados se pueden encontrar en el Cuadro 17 y 18.

Cálculo 2. Determinación de pureza de muestra de sólidos de TPA

Para este cálculo se hizo uso de la Ecuación 1. Los datos utilizados se obtuvieron de los Cuadros 12, 13, 15 y 16. Se debe tomar en consideración la concentración de la solución de NaOH utilizada para la titulación y que los datos a continuación pertenecen a la corrida 1.

$$Pureza = \frac{\frac{1}{2} V_{sol} C_{sol} M_{TPA}}{m_{TPA}}$$

$$Pureza = \frac{\frac{1}{2} (0.00210 L)(0.1000 M)(192.2 \frac{g}{mol})}{0.0393 g} = 0.444 \frac{g TPA}{g muestra}$$

Este cálculo se completó para cada corrida y fue utilizado para determinar tanto el rendimiento corregido por TPA, así como el grado de polimerización. Resultados se pueden encontrar en el Cuadro 17 y 18.

Cálculo 3. Rendimiento de sólidos recuperados con TPA

Para el cálculo de rendimiento de sólidos recuperados con TPA se hace uso de la Ecuación 2 con todas las variables mencionadas en esa, las cuales se pueden encontrar en el Cuadro 12 y 13; a partir de los resultados de cada una fue que se llevó a cabo los promedios y desviaciones estándar. En el ejemplo se presenta el ejemplo usando la corrida 1.

$$Sólidos_{rendimiento}(\%) = \frac{m_{TPA}/M_{TPA}}{m_{PET}/M_{PET}} \cdot 100\%$$

$$Sólidos_{rendimiento}(\%) = \frac{0.0923 g / 166.1 g/mol}{4.0030 g / 192.2 g/mol} \cdot 100\% = 2.67\%$$

Este cálculo se completó para cada corrida e indica el rendimiento de sólidos recuperados, lo cual incluye TPA y oligómeros. Resultados se pueden encontrar en el Cuadro 17 y 18.

Cálculo 4. Rendimiento corregido por TPA haciendo uso de la pureza

Para el cálculo del rendimiento corregido por TPA se requirió de la Ecuación 3 con todas las variables mencionadas en esa, las cuales se pueden encontrar en el Cuadro 12 y 13; a partir de los resultados de cada una fue que se llevó a cabo los promedios y desviaciones estándar. En el ejemplo se presenta el ejemplo usando la corrida 1

$$TPA_{rendimiento}(\%) = \frac{m_{TPA}/M_{TPA}}{m_{PET}/M_{PET}} \cdot Pureza \cdot 100$$

$$TPA_{rendimiento}(\%) = \frac{0.0923 \text{ g} / 166.1 \frac{\text{g}}{\text{mol}}}{4.0030 \text{ g} / 192.2 \frac{\text{g}}{\text{mol}}} \cdot 0.444 \frac{\text{g TPA}}{\text{g muestra}} \cdot 100\% = 1.18\%$$

Este cálculo se completó para cada corrida e indica el rendimiento de la reacción corregido por TPA, lo cual solo incluye el TPA efectivo. Resultados se pueden encontrar en el Cuadro 17 y 18.

Cálculo 5. Grado de polimerización promedio de la muestra de sólidos con TPA

Para el cálculo del grado de polimerización se requirió de las ecuaciones 5, 6, 7 y 8 con todas las variables mencionadas en esas, las cuales se pueden encontrar en el Cuadro 12 y 13; a partir de los resultados de cada una fue que se llevó a cabo los promedios y desviaciones estándar. En el ejemplo se presenta el ejemplo usando la corrida 1. Como primer punto, se debía calcular el valor ácido (AV) de la muestra de TPA.

$$AV \left(\frac{\text{mg NaOH}}{\text{g muestra}} \right) = \frac{1000 V_{sol} C_{sol} M_{NaOH}}{m_{TPA}}$$

$$AV = \frac{1000 (0.00210 \text{ L})(0.1000 \text{ M}) \left(40.0 \frac{\text{g}}{\text{mol}} \right)}{0.0393 \text{ g}} = 213.7 \frac{\text{mg NaOH}}{\text{g muestra}}$$

Una vez calculado este valor, se hace la relación para saber el peso equivalente ácido (EW) de la muestra.

$$EW \left(\frac{\text{g muestra}}{\text{eq COOH}} \right) = \frac{1000 M_{NaOH}}{AV}$$

$$EW = \frac{1000 \left(40.0 \frac{\text{g}}{\text{mol}} \right)}{213.7 \frac{\text{mg NaOH}}{\text{g muestra}}} = 187.1 \frac{\text{g muestra}}{\text{eq COOH}}$$

Seguidamente, a partir de que por cada COOH neutralizado, existe una molécula de TPA o una molécula oligomérica con dos colas ácidas, se multiplica este por dos para obtener la masa molar promedio.

$$M_n \left(\frac{g}{mol} \right) = 2 EW$$

$$M_n = 2 \left(187.1 \frac{g \text{ muestra}}{eq \text{ COOH}} \right) = 374.3 \frac{g}{mol}$$

Ya con este valor, se puede determinar el grado de polimerización a partir de la masa molar promedio tomando en cuenta los supuestos realizados para la Ecuación 8.

$$n (\text{unidades repetitivas}) = \frac{M_n + 26}{192}$$

$$n (\text{unidades repetitivas}) = \frac{374.3 \frac{g}{mol} + 26}{192} = 2.08 \text{ unidades repetitivas}$$

Este cálculo se completó para cada corrida realizada. Resultados se pueden encontrar en el Cuadro 19 y 20.

Cálculo 6. Tasa de cambio de la conversión del PET a un tiempo determinado

A continuación, se demostrará cómo se realizó el cálculo para la tasa de cambio de conversión del PET entre el tiempo de 30 y 60 minutos, se debe notar que se realiza el mismo cálculo para los rendimientos, solo se sustituyen los valores de conversión por la variable deseada. Los datos de los cuales se calcularon se pueden encontrar en los cuadros 24, 25 y 26 haciendo uso de los promedios de estos.

$$\text{Tasa de cambio conversión PET} = \frac{PET_{\text{conversión},30} - PET_{\text{conversión},60}}{t_f - t_i}$$

$$\text{Tasa de cambio conversión PET} = \frac{4.64\% - 3.31\%}{60\text{min} - 30\text{min}} = \frac{0.0445\%}{\text{min}}$$

Este cálculo se completó para los tiempos a los que se realizó la reacción para determinar la tasa de cambio entre cada una de ellas. Los resultados se pueden ver en los cuadros 30, 31 y 32.

Cálculo 7. Determinación del Beneficio/Costo de una combinación de condiciones de reacción

A continuación, se demostrará la memoria de cálculo para obtener el Beneficio/Costo de llevar a cabo el proceso de la hidrólisis alcalina de PET, como ejemplo se tomarán los promedios de las corridas a 80 °C, relación NaOH:PET 1.0 g/g y 60 minutos de tiempo de reacción. Es importante notar que se tomó como nulo el costo del PET al ser PET descartado

y que el precio unitario del TPA (Q0.61/g) fue obtenido de Fisher Scientific, el costo del NaOH (Q0.658/g) de Merck, el costo del HCl (Q0.371/mL), el costo del agua destilada (Q22/18.9L) y se utilizó un precio de la energía de Q1.419/kWh basado en precios de EEGSA. También que la potencia de cada uno de los equipos se encuentra en la sección de los Anexos de “Datos de equipo”.

Primeramente, se determinó el Beneficio el cual solamente dependía de la cantidad de TPA producida (tomando en cuenta la pureza) y el precio de mercado de este. Por lo que se determinó así:

$$\begin{aligned} \text{Beneficio} &= P_{TPA} m_{TPA} \text{pureza} \\ &= \left(0.61 \frac{Q}{g \text{ TPA}}\right) (0.230 \text{ g muestra}) \left(0.575 \frac{g \text{ TPA}}{g \text{ muestra}}\right) = Q \text{ 0.08} \end{aligned}$$

En cuanto a los costos de la materia prima, se lleva a cabo el mismo procedimiento que se ve a continuación para el NaOH, así como para el agua y HCl usado, el cual se usó en rangos de 4 a 5 mL (se utiliza la P para precios y C para costos).

$$C_{NaOH} = P_{NaOH} m_{NaOH} = \left(0.658 \frac{Q}{g \text{ NaOH}}\right) (4 \text{ g NaOH}) = Q \text{ 2.63}$$

Ahora para la energía usada de la estufa, se tuvo que determinar primero la cantidad de energía necesaria para cambiar la temperatura del sistema de temperatura ambiente que incluye el agua del baño maría (24°C) a la temperatura de reacción (80 °C en este caso) y la energía de mantenimiento por la cantidad de tiempo que se llevaba a cabo la reacción. Este se realizó de la siguiente manera:

$$\begin{aligned} E_{estufa} &= m_{sist} \Delta T C_{p,H2O} + Potencia_{estufa} t \\ E_{estufa} &= (1.047 \text{ kg})(80 - 24)^{\circ}C \left(4.186 \frac{kJ}{kg^{\circ}C}\right) \left(\frac{kWh}{3600 \text{ kJ}}\right) + (1.070 \text{ kW})(1 \text{ h}) \\ &= 1.138 \text{ kWh} \end{aligned}$$

Por lo que tomando en cuenta el costo de la energía se llega a:

$$C_{energía,estufa} = (1.138 \text{ kWh}) \left(1.419 \frac{Q}{kWh}\right) = Q \text{ 1.62}$$

El costo de la energía de centrifugación usó la potencia de la centrífuga y el tiempo de 15 minutos en la cual se centrifugó.

$$C_{energía,centrifuga} = (0.242 \text{ kW})(0.25 \text{ h}) \left(1.419 \frac{Q}{kWh}\right) = Q \text{ 0.09}$$

Finalmente, el costo de la energía de secado se calculó a partir de la potencia del secador (0.320 kW), tomando en cuenta las 48 horas de secado y que, por tanda de secado, en este se puede introducir hasta 50 muestras al mismo tiempo.

$$C_{energía,secador} = \frac{(0.320 \text{ kW})}{50} (48 \text{ h}) \left(1.419 \frac{Q}{kWh} \right) = Q \text{ 0.44}$$

Al obtener todos los costos, se determina el costo total con la suma de todos:

$$C_{total} = Q(2.63 + 1.85 + 0.06 + 1.62 + 0.09 + 0.44) = Q \text{ 6.68}$$

Para determinar el Beneficio/Costo, simplemente se tiene que realizar la división de ambos:

$$\frac{Beneficio}{Costo} = \frac{Q \text{ 0.08}}{Q \text{ 6.68}} = 0.0121$$

Este procedimiento se llevó a cabo para todas las condiciones realizadas durante la experimentación. Los resultados se encuentran en los Cuadros 33 y 34.

Cálculo 8. Balance de masa y energía

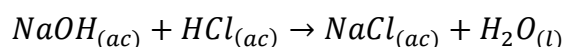
Para el balance de masa y energía (ver Figura 10 y Figura 11), primero se demostrará cómo se completó el balance de masa haciendo uso de la Ecuación 9. Cabe mencionar que se utilizan los datos promedios de las condiciones de 80 °C, relación NaOH:PET 1.0 g/g y 60 minutos de reacción.

En el caso de la trituración, todo lo que entra de PET (4 g) sale pues no hay ninguna salida extra de la masa. Sin embargo, para la reacción se conoce que debe entrar 47.4 g de agua destilada y 4 g de NaOH por la relación siendo estudiada. Debido a que se conoce que el agua no se consume en la reacción, esta se mantiene constante. Sin embargo, a partir del PET que no reacciona (3.787 g) se puede conocer las relaciones estequiométricas.

$$(4 - 3.787) \text{ g PET} \left(\frac{1 \text{ mol PET}}{192 \text{ g}} \right) = 0.001108 \text{ mol PET}$$

$$0.001108 \text{ mol PET} \left(\frac{2 \text{ mol NaOH}}{1 \text{ mol PET}} \right) \left(\frac{40.0 \text{ g NaOH}}{1 \text{ mol NaOH}} \right) = 0.089 \text{ g NaOH reacciona}$$

Estequiométricamente, se puede conocer entonces que se forma 0.069 g de Etilenglicol, así como los 0.230 g de los sólidos recuperados (tomados como TPA para facilidad del balance). Seguidamente, se da la precipitación con un exceso de HCl para garantizar llegar el medio a un pH de 2. Por lo que la salida de este cuenta con HCl en exceso. La reacción de neutralización que posibilita llegar al pH deseado es la siguiente:



Por lo que, a partir del NaOH que es el reactivo limitante se determina la cantidad de NaCl y H₂O formado.

$$3.911 \text{ g NaOH} \left(\frac{1 \text{ mol NaOH}}{40.0 \text{ g NaOH}} \right) \left(\frac{1 \text{ mol NaCl}}{1 \text{ mol NaOH}} \right) \left(\frac{58.44 \text{ g NaCl}}{1 \text{ mol NaCl}} \right) = 5.714 \text{ g NaCl}$$

El mismo procedimiento se realiza para el agua, la cual termina siendo igual a 1.762 g formados. Seguidamente, la centrifugación separa por completo la fase líquida de la sólida, por lo que solo pasa el TPA a la etapa de mezclado con agua destilada. Esto se da simplemente para lavar el TPA pegado a los tubos Eppendorf y así poder secarlos en un recipiente y medir el producto. Por lo que la entrada al secador, termina siendo los mismos 0.230 g de TPA y aproximadamente 59.770 g de agua; de los cuales toda la masa de agua es evaporado al pasar las 48 horas dentro del secador a 60°C. Esto deja como producto final, los sólidos recuperados de la reacción totalmente secos.

Ahora, para la parte energética del balance se toma como referencia la Ecuación 10, primero se toma en consideración el trabajo empleado por la licuadora para llevar a cabo al trituration del PET. Esta al contar con una potencia de 600 W y con un licuadora de alrededor de 3 minutos:

$$Q_{\text{licuadora}} = (600 \text{ W})(180 \text{ s}) \left(\frac{1 \text{ kJ}}{1000 \text{ Ws}} \right) = 108 \text{ kJ}$$

Por lo que se alimenta en esta parte del proceso los 108 kJ de energía. Seguidamente, para la energía suministrada durante la reacción, se hace el mismo cálculo realizado para el análisis costo-beneficio mostrado (ver Cálculo 7) por lo que se conoce que se requiere 1.138 kWh lo cual equivale a 4096.8 kJ suministrados al sistema. Seguidamente, la centrifugación y secador también se calculan como en el análisis costo-beneficio, tomando en cuenta la potencia de cada equipo y su tiempo de operación.

$$Q_{\text{centrífuga}} = (0.242 \text{ kW})(0.25 \text{ h}) \left(\frac{3600 \text{ kJ}}{1 \text{ kWh}} \right) = 217.8 \text{ kJ}$$

$$Q_{\text{secador}} = \frac{(0.320 \text{ kW})}{50} (48 \text{ h}) \left(\frac{3600 \text{ kJ}}{1 \text{ kWh}} \right) = 149.9 \text{ kJ}$$

La culminación de todos los cálculos realizados para el balance de masa y energía se puede observar en las Figuras 10 y 11

C. Análisis de error

Cálculo 9. Media aritmética utilizada

Para llevar a cabo todos los promedios calculados durante la experimentación, se utilizó la siguiente ecuación:

Ecuación 11. Promedio de valores

Obtenida de Skoog et al. (2015)

$$\bar{x} = \frac{\sum_{i=1}^n x_i}{n}$$

Donde:

$\bar{x}$ es el promedio de las mediciones

x_i es cada valor individual medido

n es el número total de mediciones

A continuación, se muestra como ejemplo el promedio de las conversiones de la reacción completada a 80 °C, relación NaOH:PET de 1.0 g/g y 60 minutos de reacción.

$$\bar{x} = \frac{(5.21 + 4.12 + 4.61)\%}{3} = 4.64\%$$

Esto se llevó a cabo para todos los promedio calculados.

Cálculo 10. Desviación estándar de valores

Para llevar a cabo el cálculo de desviaciones estándar, se utilizó la siguiente ecuación:

Ecuación 12. Desviación estándar para un conjunto de datos

Obtenida de Skoog et al. (2015)

$$s = \sqrt{\frac{\sum_{i=1}^n (x_i - \bar{x})^2}{n - 1}}$$

Donde:

s es la desviación estándar de la muestra

x_i es cada medición individual

$\bar{x}$ es el promedio de los valores

N es el número de mediciones

A continuación, se muestra un ejemplo de la desviación estándar de las conversiones de la reacción completada a 80 °C, relación NaOH:PET de 1.0 g/g y 60 minutos de reacción.

$$s = \sqrt{\frac{(5.21 - 4.64)^2 + (4.12 - 4.64)^2 + (4.61 - 4.64)^2}{3 - 1}} = 0.54\%$$

Esto se llevó a cabo para todas las desviaciones estándar calculadas.

Cálculo 11. Incertidumbre de cálculos que involucran multiplicaciones y divisiones

En todos los cálculos realizados con multiplicaciones y divisiones se tuvo que determinar la incertidumbre con la siguiente ecuación:

Ecuación 13. Propagación de errores por multiplicación y división

Obtenida de Skoog et al. (2015)

$$\Delta Q = Q \sqrt{\left(\frac{\Delta A}{A}\right)^2 + \left(\frac{\Delta B}{B}\right)^2 + \dots + \left(\frac{\Delta Z}{Z}\right)^2}$$

Donde:

Todos los valores con Δ se refiere a la incertidumbre del dato

Todas las letras sin el signo pasado se refieren al valor del dato

Esta ecuación fue empleada para cada procedimiento completado.

Cálculo 12. Análisis de varianza (ANOVA)

Todos los análisis ANOVA se realizaron haciendo uso de la herramienta de programación R, por lo cual se puede referir a la sección de “Código utilizado para análisis de datos” donde se observa el procedimiento que se llevó a cabo. De igual forma se presenta la ecuación típica para conocer el estadístico de Fisher:

Ecuación 14. Fórmula del estadístico F

Obtenida de Skoog et al. (2015)

$$F = \frac{MS_{factor}}{MS_{error}}$$

Donde:

F es el estadístico de Fisher usado para conocer el valor p

MSfactor son los cuadrados medios debidos al factor analizado

MSerror son los cuadrados medios por el error experimental

La herramienta permitió determinar el estadístico F, así como el valor P para cada factor; donde se interpreta que al ser menor a 0.05 (por trabajar con el 95% de confianza) se rechaza la hipótesis nula de que el factor no es significativo.

Cálculo 13. Prueba Q

En los datos obtenidos para la reacción llevada a cabo a 80 °C, relación NaOH:PET de 1.0 g/g y 240 minutos, se identificó un valor para la conversión del PET que se sospechaba ser atípico. Por lo que se empleó una prueba Q de Dixon para determinar si estadísticamente hablando se podía descartar. La ecuación es como sigue:

Ecuación 15. Prueba Q de Dixon

Obtenida de Skoog et al. (2015)

$$Q = \frac{|x_q - x_{vecino}|}{x_{max} - x_{min}}$$

Donde:

x_q es el valor sospechoso

x_{vecino} es el valor más cercano al sospechoso

x_{max} es el valor máximo

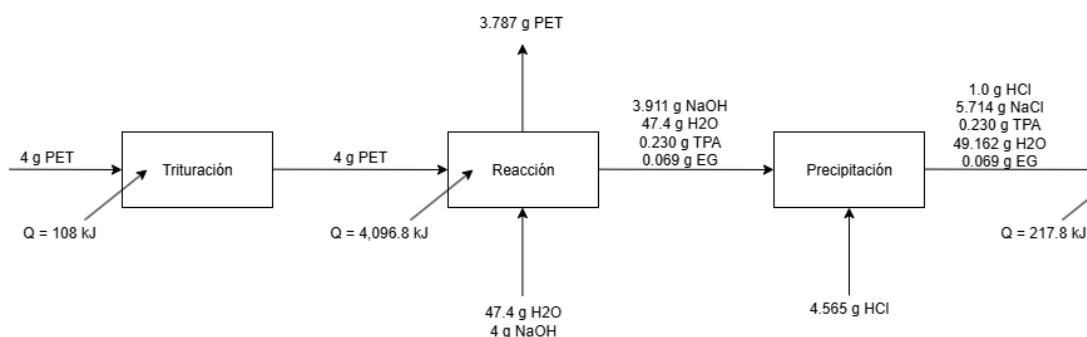
x_{min} es el valor mínimo

Q es el valor calculado de la prueba

Nuevamente para completar este cálculo, se utilizó la herramienta de R (ver “Código utilizado para análisis de datos”) donde se compara el valor con el Q crítico dependiendo del nivel n de los datos y el nivel de confianza (usado siempre el 95%). En el caso del dato mencionado, el valor de la Q crítica fue menor al valor Q obtenido, por lo que se descartó la conversión inusualmente elevada.

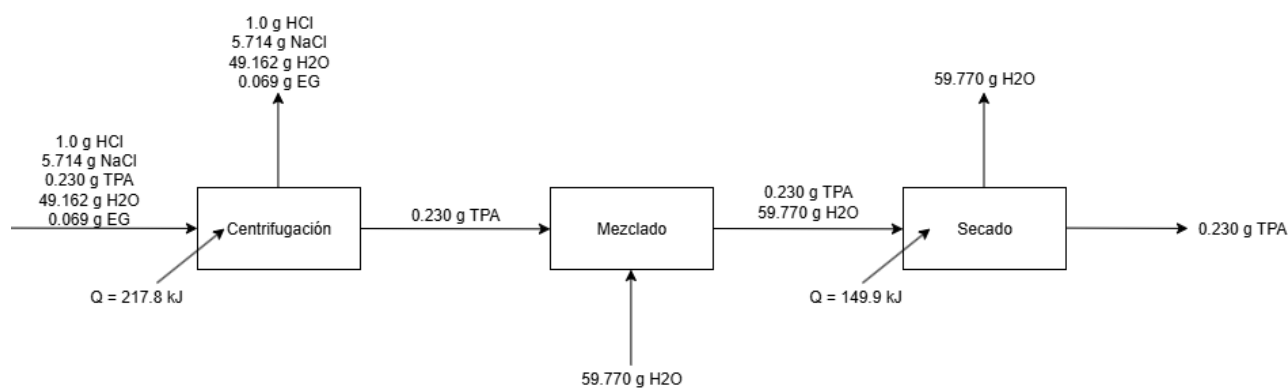
D. Balance de masa y energía

Figura 10. Parte 1 del balance de masa y energía del proceso



Nota. Primera parte del balance de masa del proceso llevado a cabo. (Elaboración propia).

Figura 11. Parte 2 del balance de masa y energía del proceso



Nota. Segunda parte del balance de masa del proceso llevado a cabo. (Elaboración propia).

E. Datos calculados

Cuadro 17. Datos calculados para la comparación de combinaciones de temperatura y relación base-polímero

Corrida	Temperatura (°C)	Relación NaOH:PET (g/g)	Conversión de PET (±0.01%)	Pureza del TPA (±0.001 g/g)	Rendimiento de sólidos recuperados (±0.01 %)	Rendimiento corregido por TPA (±0.02 %)
1	70	0.70	3.92%	0.444	2.67%	1.18%
2	70	0.85	3.03%	0.432	4.16%	1.79%
3	70	1.00	3.32%	0.489	3.79%	1.85%
4	75	0.70	3.04%	0.541	5.08%	2.75%
5	75	0.85	3.22%	0.559	5.37%	3.00%
6	75	1.00	3.86%	0.501	6.64%	3.33%
7	80	0.70	3.61%	0.606	5.26%	3.19%
8	80	0.85	3.52%	0.534	6.87%	3.67%
9	80	1.00	5.21%	0.621	6.52%	4.05%
10	70	0.70	2.81%	0.563	2.46%	1.38%
11	70	0.85	3.76%	0.528	3.21%	1.69%
12	70	1.00	4.69%	0.520	4.07%	2.12%
13	75	0.70	3.26%	0.575	4.92%	2.83%
14	75	0.85	3.41%	0.515	5.75%	2.96%
15	75	1.00	4.01%	0.547	5.97%	3.27%
16	80	0.70	4.11%	0.550	4.87%	2.68%
17	80	0.85	4.37%	0.515	5.93%	3.05%

Corrida	Temperatura (°C)	Relación NaOH:PET (g/g)	Conversión de PET (±0.01%)	Pureza del TPA (±0.001 g/g)	Rendimiento de sólidos recuperados (±0.01 %)	Rendimiento corregido por TPA (±0.02 %)
18	80	1.00	4.12%	0.579	6.81%	3.94%
19	70	0.70	3.03%	0.543	2.11%	1.15%
20	70	0.85	3.87%	0.531	3.76%	2.00%
21	70	1.00	4.53%	0.498	4.19%	2.09%
22	75	0.70	4.12%	0.463	5.68%	2.63%
23	75	0.85	3.91%	0.435	6.30%	2.74%
24	75	1.00	3.89%	0.422	6.93%	2.93%
25	80	0.70	4.12%	0.528	6.04%	3.19%
26	80	0.85	3.96%	0.532	5.91%	3.15%
27	80	1.00	4.61%	0.526	6.58%	3.46%

Nota. Estos fueron calculados como se mostraron en la sección de cálculos de muestra, la conversión fue calculada con el peso inicial y final de PET en la reacción, para la pureza se utilizó el volumen de titulación para cada corrida, los rendimientos fueron calculados a partir de la cantidad de monómeros de TPA disponibles en el PET inicial y la cantidad que se obtuvo. El de sólidos recuperados no toma en cuenta la pureza, mientras que el corregido por TPA sí. (Elaboración propia).

Cuadro 18. Datos calculados para la comparación de tiempos de reacción para la condición seleccionada que brindó el mayor rendimiento

Corrida	Tiempo de reacción (min)	Conversión de PET (±0.01%)	Pureza del TPA (±0.001 g/g)	Rendimiento de sólidos recuperados (±0.01 %)	Rendimiento corregido por TPA (±0.02 %)
28	30	3.46%	0.625	2.59%	1.62%
29	30	3.39%	0.534	2.68%	1.43%
30	30	3.08%	0.415	2.00%	0.83%

Corrida	Tiempo de reacción (min)	Conversión de PET ($\pm 0.01\%$)	Pureza del TPA (± 0.001 g/g)	Rendimiento de sólidos recuperados ($\pm 0.01\%$)	Rendimiento corregido por TPA ($\pm 0.02\%$)
9	60	5.21%	0.621	6.52%	4.05%
18	60	4.12%	0.579	6.81%	3.94%
27	60	4.61%	0.526	6.58%	3.46%
31	120	6.56%	0.643	7.22%	4.64%
32	120	5.31%	0.682	8.45%	5.76%
33	120	5.54%	0.614	7.89%	4.84%
34	180	5.74%	0.787	9.37%	7.38%
35	180	5.41%	0.619	10.74%	6.64%
36	180	6.67%	0.792	9.01%	7.13%
37	240	6.89%	0.815	9.60%	7.83%
38	240	8.25%	0.684	9.98%	6.82%
39	240	6.63%	0.666	11.69%	7.79%

Nota. Para estas corridas, se utilizó 80 °C y relación NaOH:PET de 1.0 g/g pues fue la que brindó los mejores rendimientos. Los datos calculados como se mostraron en la sección de cálculos de muestra, la conversión fue calculada con el peso inicial y final de PET en la reacción, para la pureza se utilizó el volumen de titulación para cada corrida, los rendimientos fueron calculados a partir de la cantidad de monómeros de TPA disponibles en el PET inicial y la cantidad que se obtuvo. El de sólidos recuperados no toma en cuenta la pureza, mientras que el corregido por TPA sí. (Elaboración propia).

Cuadro 19. Datos calculados para los grados de polimerización de las distintas combinaciones de temperatura y relación base-polímero

Corrida	Temperatura (°C)	Relación NaOH:PET (g/g)	Valor ácido (± 5.0 mg NaOH / g muestra)	Peso equivalente ácido (± 4.5 g muestra / eq COOH)	Promedio masa molar (± 9.0 g / mol)	Grado de polimerización (± 0.05)
1	70	0.70	213.7	187.1	374.3	2.08
2	70	0.85	207.9	192.4	384.8	2.14
3	70	1.00	235.3	170.0	340.0	1.91
4	75	0.70	260.6	153.5	306.9	1.73
5	75	0.85	269.1	148.6	297.3	1.68
6	75	1.00	241.5	165.6	331.3	1.86
7	80	0.70	291.8	137.1	274.2	1.56
8	80	0.85	249.2	160.5	321.0	1.81
9	80	1.00	289.9	138.0	276.0	1.57
10	70	0.70	262.9	152.2	304.3	1.72
11	70	0.85	246.3	162.4	324.8	1.83
12	70	1.00	242.7	164.8	329.6	1.85
13	75	0.70	268.4	149.0	298.1	1.69
14	75	0.85	240.2	166.5	333.0	1.87
15	75	1.00	255.1	156.8	313.6	1.77
16	80	0.70	256.4	156.0	312.0	1.76
17	80	0.85	240.2	166.5	333.0	1.87
18	80	1.00	269.9	148.2	296.4	1.68
19	70	0.70	253.3	157.9	315.8	1.78

Corrida	Temperatura (°C)	Relación NaOH:PET (g/g)	Valor ácido (±5.0 mg NaOH / g muestra)	Peso equivalente ácido (±4.5 g muestra / eq COOH)	Promedio masa molar (±9.0 g / mol)	Grado de polimerización (±0.05)
20	70	0.85	247.8	161.4	322.8	1.82
21	70	1.00	232.4	172.1	344.2	1.93
22	75	0.70	216.2	185.0	370.0	2.06
23	75	0.85	202.8	197.2	394.4	2.19
24	75	1.00	197.1	202.9	405.9	2.25
25	80	0.70	246.2	162.5	325.0	1.83
26	80	0.85	248.4	161.0	322.1	1.81
27	80	1.00	245.4	163.0	326.0	1.83

Nota. Se muestran los datos requeridos para calcular el grado de polimerización según las combinaciones de temperatura y relación base polímero. El valor ácido representa la cantidad de mg de NaOH requeridos para neutralizar un gramo de muestra (suele presentarse en mg KOH, pero por facilidad de cálculo se presenta este), el peso equivalente ácido indica los gramos de muestra que hay por equivalente ácido (COOH), la masa molar presentada es un promedio según lo calculado y el grado de polimerización se refiere a la cantidad de unidades monoméricas promedio se encuentran en una cadena del producto siendo evaluado. (Elaboración propia).

Cuadro 20. Datos calculados para los grados de polimerización según los tiempos de reacción para la condición seleccionada que brindó el mayor rendimiento

Corrida	Tiempo de reacción (min)	Valor ácido (±5.0 mg NaOH / g muestra)	Peso equivalente ácido (±4.5 g muestra / eq COOH)	Promedio masa molar (±9.0 g / mol)	Grado de polimerización (±0.05)
28	30	299.7	133.5	266.9	1.53
29	30	256.4	156.0	312.0	1.76
30	30	199.3	200.7	401.3	2.23
9	60	289.9	138.0	276.0	1.57

Corrida	Tiempo de reacción (min)	Valor ácido (± 5.0 mg NaOH / g muestra)	Peso equivalente ácido (± 4.5 g muestra / eq COOH)	Promedio masa molar (± 9.0 g / mol)	Grado de polimerización (± 0.05)
18	60	269.9	148.2	296.4	1.68
27	60	245.4	163.0	326.0	1.83
31	120	308.7	129.6	259.2	1.49
32	120	327.1	122.3	244.6	1.41
33	120	294.5	135.8	271.7	1.55
34	180	377.9	105.9	211.7	1.24
35	180	292.7	136.7	273.3	1.56
36	180	374.6	106.8	213.6	1.25
37	240	391.3	102.2	204.4	1.20
38	240	328.1	121.9	243.8	1.41
39	240	319.5	125.2	250.4	1.44

Nota. Para estas corridas, se utilizó 80 °C y relación NaOH:PET de 1.0 g/g pues fue la que brindó los mejores rendimientos. Se muestran los datos requeridos para calcular el grado de polimerización. El valor ácido representa la cantidad de mg de NaOH requeridos para neutralizar un gramo de muestra (suele presentarse en mg KOH, pero por facilidad de cálculo se presenta este), el peso equivalente ácido indica los gramos de muestra que hay por equivalente ácido (COOH), la masa molar presentada es un promedio según lo calculado y el grado de polimerización se refiere a la cantidad de unidades monoméricas promedio se encuentran en una cadena del producto siendo evaluado. (Elaboración propia).

Cuadro 21. Promedio, desviación estándar y coeficiente de variación para el rendimiento de recuperación de sólidos de las distintas combinaciones de temperatura y relación base-polímero estudiadas

Temperatura (°C)	Relación NaOH:PET (g/g)	Promedio del rendimiento de sólidos recuperados (± 0.01 %)	Desviación estándar del rendimiento de sólidos recuperados (± 0.01 %)	Coeficiente de variación (± 0.01 %)
70	0.7	2.41%	0.28%	11.7%
70	0.85	3.71%	0.48%	12.9%
70	1	4.02%	0.20%	5.1%
75	0.7	5.23%	0.40%	7.7%
75	0.85	5.81%	0.47%	8.0%
75	1	6.52%	0.49%	7.5%
80	0.7	5.39%	0.59%	11.0%
80	0.85	6.24%	0.55%	8.8%
80	1	6.64%	0.15%	2.3%

Nota. Estos fueron calculados como se mostraron en la sección de análisis error; provienen de los triplicados encontrados en el Cuadro 17. Estos rendimientos son de los sólidos recuperados, por lo que no se toma en cuenta la pureza del producto. (Elaboración propia).

Cuadro 22. Promedio, desviación estándar y coeficiente de variación para el rendimiento corregido por TPA de las combinaciones de temperatura y relación base-polímero estudiadas

Temperatura (°C)	Relación NaOH:PET (g/g)	Promedio del rendimiento corregido por TPA (± 0.01 %)	Desviación estándar del rendimiento corregido por TPA (± 0.01 %)	Coeficiente de variación (± 0.01 %)
70	0.7	1.24%	0.13%	10.3%
70	0.85	1.83%	0.15%	8.4%

Temperatura (°C)	Relación NaOH:PET (g/g)	Promedio del rendimiento corregido por TPA (± 0.01 %)	Desviación estándar del rendimiento corregido por TPA (± 0.01 %)	Coefficiente de variación (± 0.01 %)
70	1	2.02%	0.15%	7.2%
75	0.7	2.74%	0.10%	3.6%
75	0.85	2.90%	0.14%	4.9%
75	1	3.18%	0.22%	6.8%
80	0.7	3.02%	0.29%	9.7%
80	0.85	3.29%	0.33%	10.1%
80	1	3.82%	0.32%	8.2%

Nota. Estos fueron calculados como se mostraron en la sección de análisis error; provienen de los triplicados encontrados en el Cuadro 17. Estos rendimientos son corregidos por TPA, por lo que se toma en cuenta la pureza obtenida por titulación. (Elaboración propia).

Cuadro 23. Promedio, desviación estándar y coeficiente de variación para el grado de polimerización de las combinaciones de temperatura y relación base-polímero estudiadas

Temperatura (°C)	Relación NaOH:PET (g/g)	Promedio del grado de polimerización (± 0.05)	Desviación estándar del grado de polimerización (± 0.05)	Coefficiente de variación (± 0.01 %)
70	0.7	1.86	0.195	10.5%
70	0.85	1.93	0.183	9.5%
70	1	1.9	0.039	2.1%
75	0.7	1.83	0.204	11.1%
75	0.85	1.91	0.256	13.4%
75	1	1.96	0.255	13.0%
80	0.7	1.72	0.138	8.0%

Temperatura (°C)	Relación NaOH:PET (g/g)	Promedio del grado de polimerización (± 0.05)	Desviación estándar del grado de polimerización (± 0.05)	Coefficiente de variación (± 0.01 %)
80	0.85	1.83	0.035	1.9%
80	1	1.7	0.131	7.7%

Nota. Estos fueron calculados como se mostraron en la sección de análisis error; provienen de los triplicados encontrados en el Cuadro 19. (Elaboración propia).

Cuadro 24. Promedio, desviación estándar y coeficiente de variación para la conversión del PET de los distintos tiempos de reacción para la condición seleccionada que brindó el mayor rendimiento

Tiempo de reacción (min)	Promedio de la conversión de PET (± 0.01 %)	Desviación estándar de la conversión de PET (± 0.01 %)	Coefficiente de variación (± 0.01 %)
30	3.31%	0.20%	6%
60	4.64%	0.54%	12%
120	5.80%	0.66%	11%
180	5.94%	0.65%	11%
240	7.26%	0.87%	12%

Nota. Las condiciones de reacción para estos datos son de 80 °C y relación NaOH:PET de 1.0 g/g. Estos fueron calculados como se mostraron en la sección de análisis error; provienen de los triplicados encontrados en el Cuadro 18. (Elaboración propia).

Cuadro 25. Promedio, desviación estándar y coeficiente de variación para el rendimiento de recuperación de sólidos de los distintos tiempos de reacción para la condición seleccionada que brindó el mayor rendimiento

Tiempo de reacción (min)	Promedio del rendimiento de sólidos recuperados (± 0.01 %)	Desviación estándar del rendimiento de sólidos recuperados (± 0.01 %)	Coeficiente de variación (± 0.01 %)
30	2.43%	0.37%	15.1%
60	6.64%	0.15%	2.3%
120	7.85%	0.62%	7.8%
180	9.71%	0.92%	9.4%
240	10.4%	1.11%	10.7%

Nota. Las condiciones de reacción para estos datos son de 80 °C y relación NaOH:PET de 1.0 g/g. Estos fueron calculados como se mostraron en la sección de análisis error; provienen de los triplicados encontrados en el Cuadro 18. Estos rendimientos son de los sólidos recuperados, por lo que no se toma en cuenta la pureza del producto. (Elaboración propia).

Cuadro 26. Promedio, desviación estándar y coeficiente de variación para el rendimiento corregido por TPA de los distintos tiempos de reacción para la condición seleccionada que brindó el mayor rendimiento

Tiempo de reacción (min)	Promedio del rendimiento corregido por TPA (± 0.01 %)	Desviación estándar del rendimiento corregido por TPA (± 0.01 %)	Coeficiente de variación (± 0.01 %)
30	1.29%	0.41%	31.9%
60	3.82%	0.32%	8.2%
120	5.08%	0.60%	11.7%
180	7.05%	0.37%	5.3%
240	7.48%	0.57%	7.6%

Nota. Las condiciones de reacción para estos datos son de 80 °C y relación NaOH:PET de 1.0 g/g. Estos fueron calculados como se mostraron en la sección de análisis error; provienen de los triplicados encontrados en el Cuadro 18. Estos rendimientos son corregidos por TPA, por lo que se considera la pureza del producto. (Elaboración propia).

Cuadro 27. Promedio, desviación estándar y coeficiente de variación para el grado de polimerización a distintos tiempos de reacción para la condición seleccionada que brindó el mayor rendimiento

Tiempo de reacción (min)	Promedio del grado de polimerización (± 0.05)	Desviación estándar del grado de polimerización (± 0.05)	Coeficiente de variación (± 0.01 %)
30	1.29%	0.41%	31.9%
60	3.82%	0.32%	8.2%
120	5.08%	0.60%	11.7%
180	7.05%	0.37%	5.3%
240	7.48%	0.57%	7.6%

Nota. Las condiciones de reacción para estos datos son de 80 °C y relación NaOH:PET de 1.0 g/g. Estos fueron calculados como se mostraron en la sección de análisis error; provienen de los triplicados encontrados en el Cuadro 20. (Elaboración propia).

Cuadro 28. Efecto estandarizado de cada factor para completar el Pareto de los rendimientos de recuperación de sólidos

Factor	Efecto estandarizado
Temperatura	13.76
Relación NaOH:PET	7.01
Interacción entre ambas	0.88
Línea crítica	2.31

Nota. Se presentan los efectos estandarizados para cada factor y el valor de la línea crítica, donde si el efecto de uno de los factores sobrepasa la línea quiere decir que es significativo.

Cabe mencionar que para este cálculo se tomó en cuenta los valores altos y bajos de cada factor. (Elaboración propia).

Cuadro 29. Efecto estandarizado de cada factor para completar el Pareto de los rendimientos corregidos por TPA

Factor	Efecto estandarizado
Temperatura	13.11
Relación NaOH:PET	5.80
Interacción entre ambas	0.07
Línea crítica	2.31

Nota. Se presentan los efectos estandarizados para cada factor y el valor de la línea crítica, donde si el efecto de uno de los factores sobrepasa la línea quiere decir que es significativo. Cabe mencionar que para este cálculo se tomó en cuenta los valores altos y bajos de cada factor. (Elaboración propia).

Cuadro 30. Datos calculados de la tasa de cambio del rendimiento de recuperación de sólidos en función del tiempo

Tiempo (min)	Tasa de cambio (± 0.0006 %/min)
60	0.1400
120	0.0203
180	0.0309
240	0.0120

Nota. Se presentan las tasas de cambio calculadas a partir de los rendimientos de recuperación de sólidos y el cambio en el tiempo entre mediciones. Estos fueron calculados con los datos del Cuadro 25. (Elaboración propia).

Cuadro 31. Datos calculados de la tasa de cambio del rendimiento corregido por TPA en función del tiempo

Tiempo (min)	Tasa de cambio (± 0.0006 %/min)
60	0.0841
120	0.0211
180	0.0328
240	0.0071

Nota. Se presentan las tasas de cambio calculadas a partir de los rendimientos corregidos por TPA y el cambio en el tiempo entre mediciones. Estos fueron calculados con los datos del Cuadro 26. (Elaboración propia).

Cuadro 32. Datos calculados de la tasa de cambio de la conversión de PET en función del tiempo

Tiempo (min)	Tasa de cambio (± 0.0006 %/min)
60	0.0445
120	0.0193
180	0.0023
240	0.0137

Nota. Se presentan las tasas de cambio calculadas a partir de la conversión del PET en función del cambio en el tiempo entre mediciones. Estos fueron calculados con los datos del Cuadro 27. (Elaboración propia).

Cuadro 33. Datos calculados para completar el análisis costo-beneficio de las distintas combinaciones de temperatura y relación base-polímero.

T° (°C)	Relación NaOH : PET (g/g)	Beneficio por TPA (Q)	Costo NaOH (Q)	Costo HCl (Q)	Costo agua (Q)	Energía usada estufa (kWh)	Costo energía estufa (Q)	Costo energía centrifugación (Q)	Costo energía secado (Q)	Costo total (Q)	Beneficio / Costo
70	0.7	Q0.03	Q1.84	Q1.48	Q0.05	1.126	Q1.60	Q0.09	Q0.44	Q5.49	0.0048
70	0.85	Q0.04	Q2.24	Q1.67	Q0.05	1.126	Q1.60	Q0.09	Q0.44	Q6.08	0.0064
70	1	Q0.04	Q2.63	Q1.85	Q0.05	1.126	Q1.60	Q0.09	Q0.44	Q6.66	0.0064
75	0.7	Q0.06	Q1.84	Q1.48	Q0.05	1.132	Q1.61	Q0.09	Q0.44	Q5.50	0.0106
75	0.85	Q0.06	Q2.24	Q1.67	Q0.05	1.132	Q1.61	Q0.09	Q0.44	Q6.08	0.0101
75	1	Q0.07	Q2.63	Q1.85	Q0.05	1.132	Q1.61	Q0.09	Q0.44	Q6.67	0.0101
80	0.7	Q0.06	Q1.84	Q1.48	Q0.05	1.138	Q1.61	Q0.09	Q0.44	Q5.51	0.0116
80	0.85	Q0.07	Q2.24	Q1.67	Q0.05	1.138	Q1.61	Q0.09	Q0.44	Q6.09	0.0114
80	1	Q0.08	Q2.63	Q1.85	Q0.06	1.138	Q1.62	Q0.09	Q0.44	Q6.68	0.0121

Nota. Se presentan todos los datos calculados para el análisis costo-beneficio, ver la sección de cálculos de muestra para el procedimiento. El precio unitario del TPA (Q0.61/g) fue obtenido de Fisher Scientific, el costo del NaOH (Q0.658/g) de Merck, el costo del HCl (Q0.371/mL), el costo del agua destilada (Q22/18.9L) y se utilizó un precio de la energía de Q1.419/kWh basado en precios de EEGSA. (Elaboración propia).

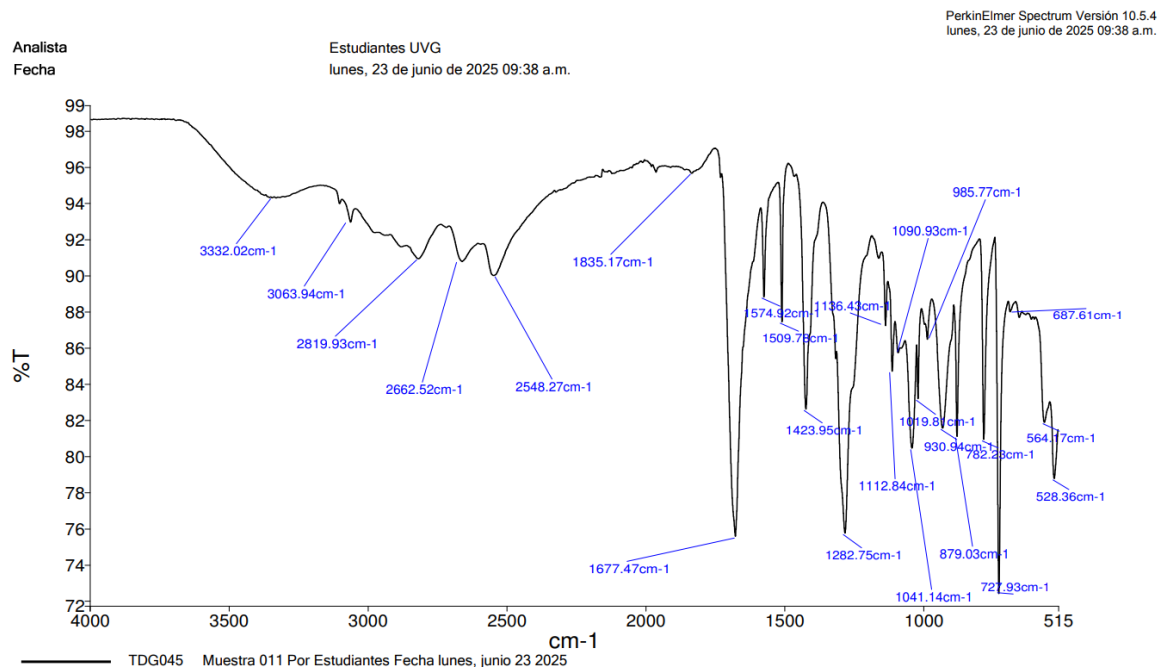
Cuadro 34. Datos calculados para completar el análisis costo-beneficio de la reacción en función del tiempo para la condición seleccionada que brindó el mayor rendimiento

Tiempo (min)	Beneficio por TPA (Q)	Costo NaOH (Q)	Costo HCl (Q)	Costo agua (Q)	Energía usada estufa (kWh)	Costo energía estufa (Q)	Costo energía centrifugación (Q)	Costo energía secado (Q)	Costo total (Q)	Beneficio / Costo
30	Q0.03	Q2.63	Q1.85	Q0.06	0.603	Q0.86	Q0.09	Q0.44	Q5.92	0.0045
60	Q0.08	Q2.63	Q1.85	Q0.06	1.138	Q1.62	Q0.09	Q0.44	Q6.68	0.0121
120	Q0.11	Q2.63	Q1.85	Q0.06	2.208	Q3.13	Q0.09	Q0.44	Q8.20	0.0131
180	Q0.15	Q2.63	Q1.85	Q0.06	3.278	Q4.65	Q0.09	Q0.44	Q9.72	0.0155
240	Q0.16	Q2.63	Q1.85	Q0.06	4.348	Q6.17	Q0.09	Q0.44	Q11.23	0.0142

Nota. Se presentan todos los datos calculados para el análisis costo-beneficio, ver la sección de cálculos de muestra para el procedimiento. El precio unitario del TPA (Q0.61/g) fue obtenido de Fisher Scientific, el costo del NaOH (Q0.658/g) de Merck, el costo del HCl (Q0.371/mL), el costo del agua destilada (Q22/18.9L) y se utilizó un precio de la energía de Q1.419/kWh basado en precios de EEGSA. (Elaboración propia).

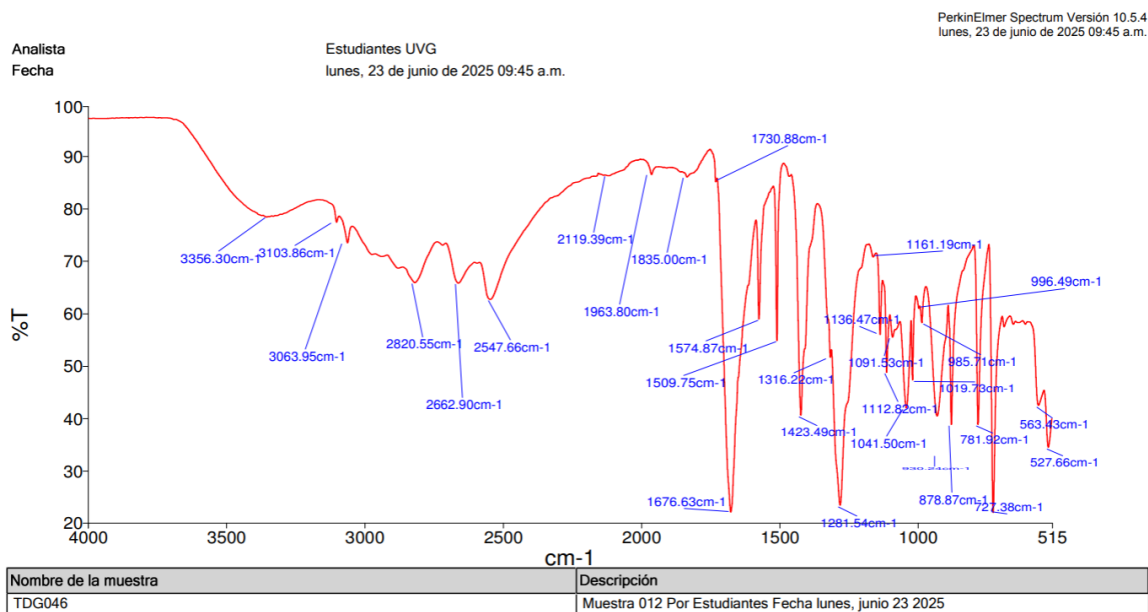
F. Espectros infrarrojo

Figura 12. Espectro FTIR de la muestra de sólidos recuperados a las condiciones de 70 °C, relación NaOH:PET de 0.70 g/g y 60 minutos de reacción.



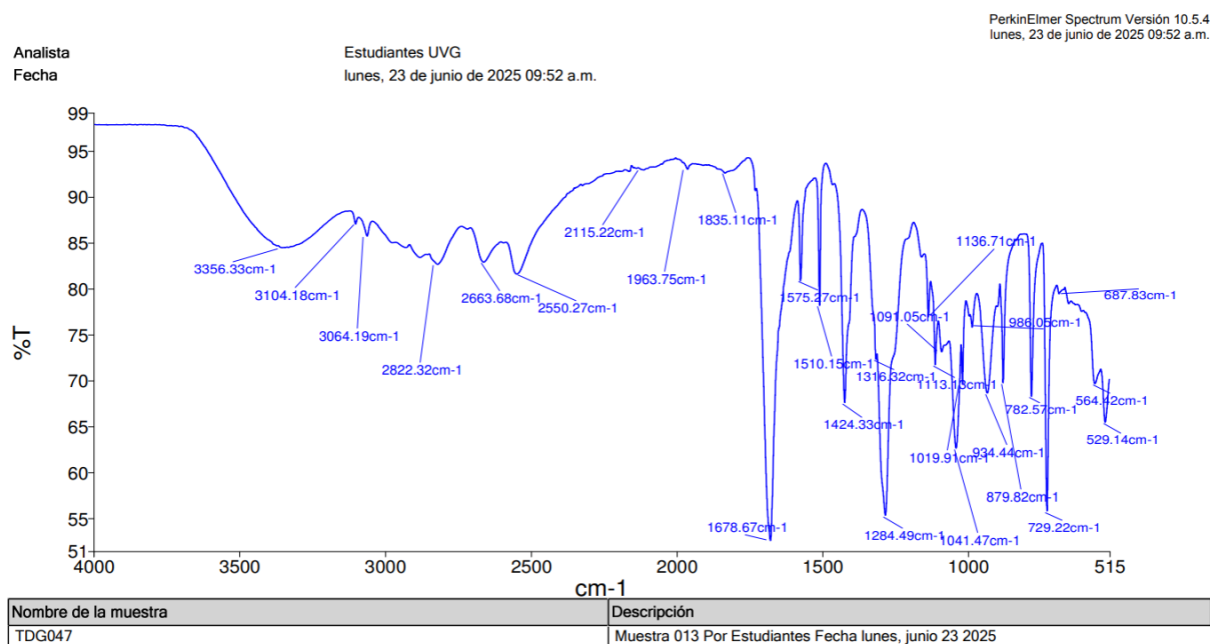
Nota. Se analizó una muestra de todas las combinaciones de temperatura y relación base-polímero, así como todos los tiempos de reacción, para confirmar la obtención de TPA. Se utilizó un espectrofotómetro FTIR Perkin Elmer Frontier con un accesorio UATR. (Elaboración propia).

Figura 13. Espectro FTIR de la muestra de sólidos recuperados a las condiciones de 70 °C, relación NaOH:PET de 0.85 g/g y 60 minutos de reacción.



Nota. Se analizó una muestra de todas las combinaciones de temperatura y relación base-polímero, así como todos los tiempos de reacción, para confirmar la obtención de TPA. Se utilizó un espectrofotómetro FTIR Perkin Elmer Frontier con un accesorio UATR. (Elaboración propia).

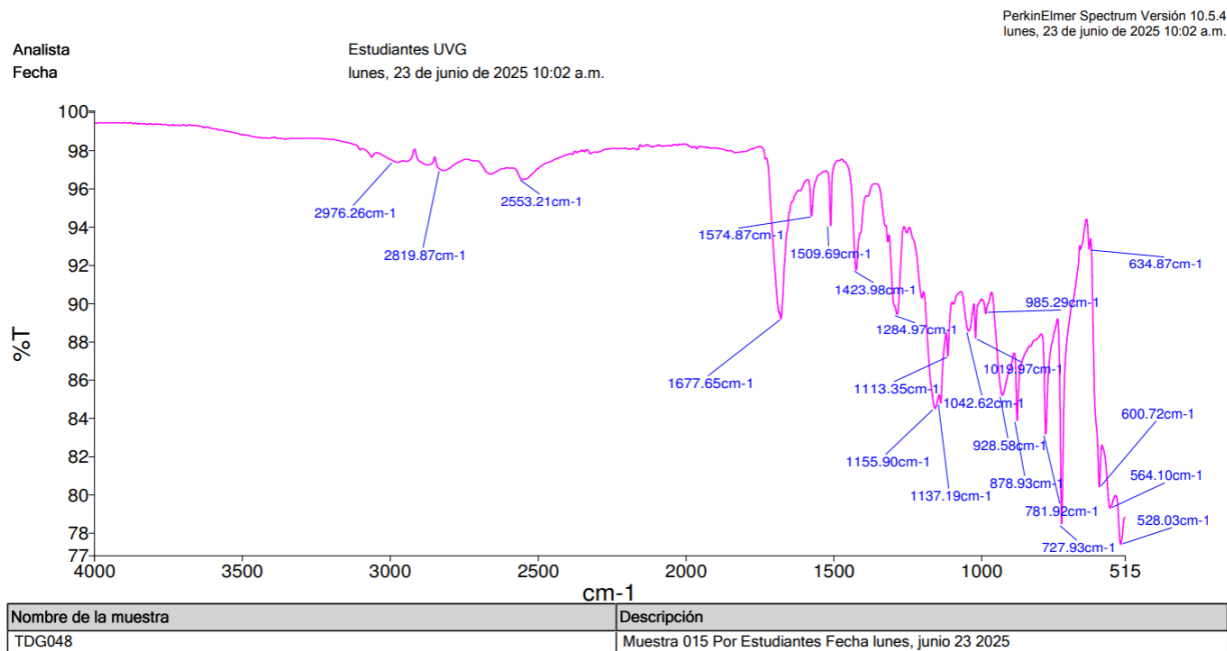
Figura 14. Espectro FTIR de la muestra de sólidos recuperados a las condiciones de 70 °C, relación NaOH:PET de 1.0 g/g y 60 minutos de reacción.



Nota. Se analizó una muestra de todas las combinaciones de temperatura y relación base-polímero, así como todos los tiempos de reacción, para confirmar la obtención de TPA.

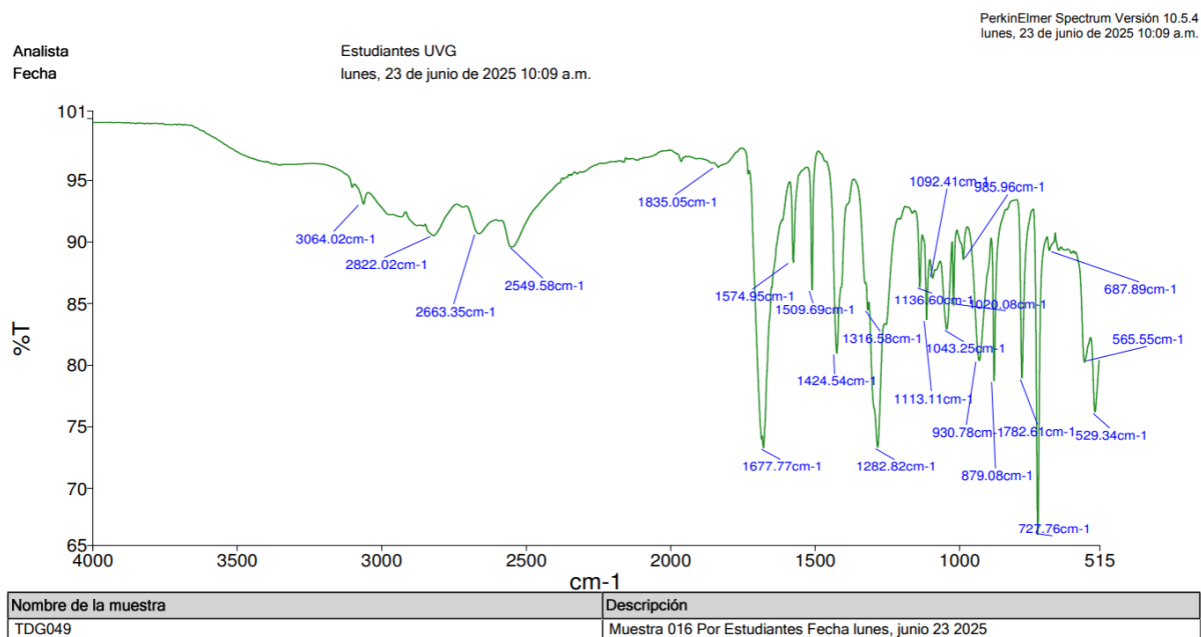
utilizó un espectrofotómetro FTIR Perkin Elmer Frontier con un accesorio UATR. (Elaboración propia).

Figura 15. Espectro FTIR de la muestra de sólidos recuperados a las condiciones de 75 °C, relación NaOH:PET de 0.70 g/g y 60 minutos de reacción.



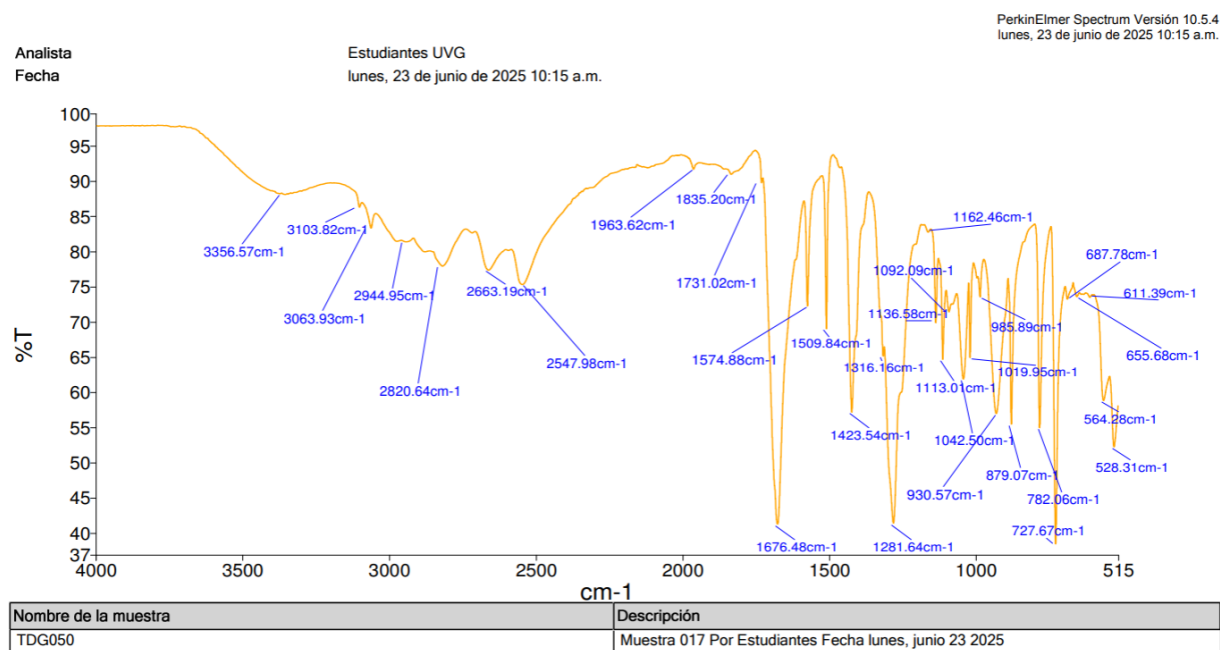
Nota. Se analizó una muestra de todas las combinaciones de temperatura y relación base-polímero, así como todos los tiempos de reacción, para confirmar la obtención de TPA. Se utilizó un espectrofotómetro FTIR Perkin Elmer Frontier con un accesorio UATR. (Elaboración propia).

Figura 16. Espectro FTIR de la muestra de sólidos recuperados a las condiciones de 75 °C, relación NaOH:PET de 0.85 g/g y 60 minutos de reacción.



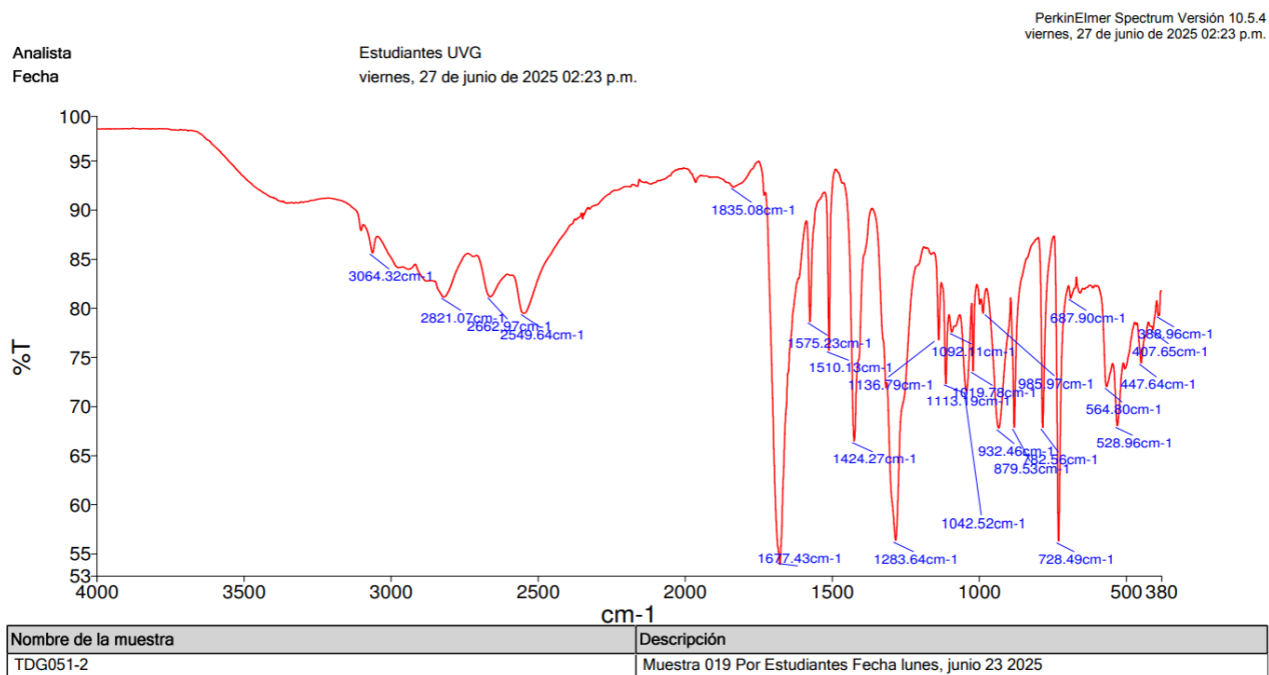
Nota. Se analizó una muestra de todas las combinaciones de temperatura y relación base-polímero, así como todos los tiempos de reacción, para confirmar la obtención de TPA. Se utilizó un espectrofotómetro FTIR Perkin Elmer Frontier con un accesorio UATR. (Elaboración propia).

Figura 17. Espectro FTIR de la muestra de sólidos recuperados a las condiciones de 75 °C, relación NaOH:PET de 1.0 g/g y 60 minutos de reacción.



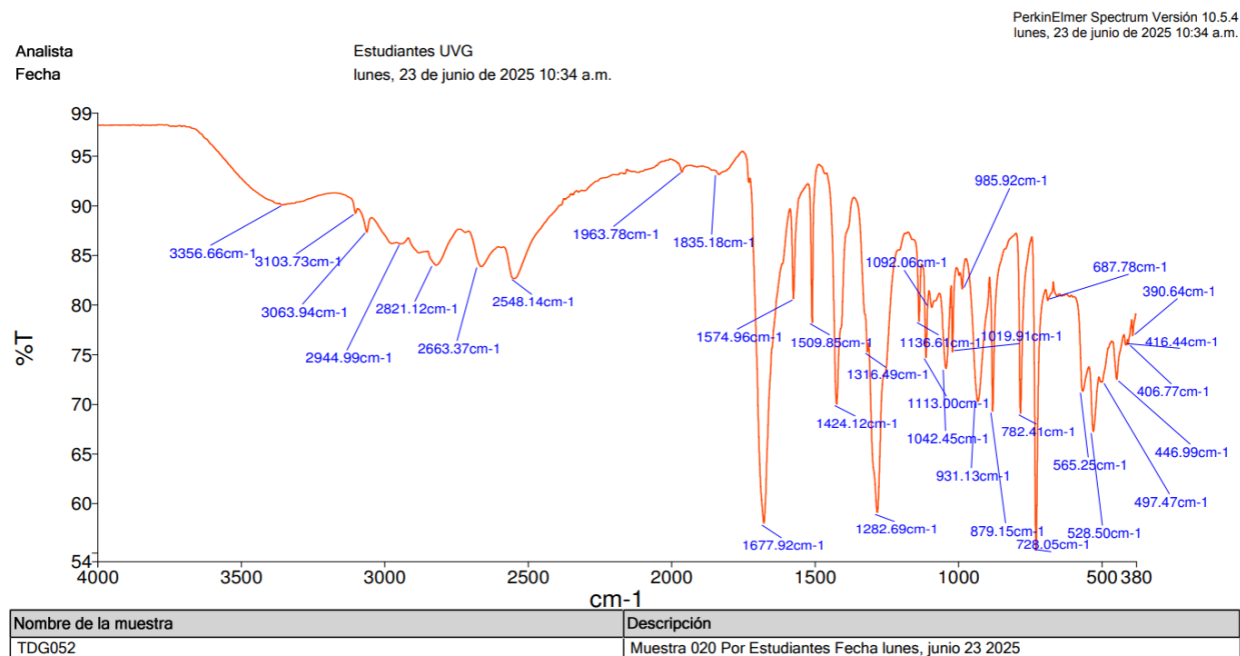
Nota. Se analizó una muestra de todas las combinaciones de temperatura y relación base-polímero, así como todos los tiempos de reacción, para confirmar la obtención de TPA. Se utilizó un espectrofotómetro FTIR Perkin Elmer Frontier con un accesorio UATR. (Elaboración propia).

Figura 18. Espectro FTIR de la muestra de sólidos recuperados a las condiciones de 80 °C, relación NaOH:PET de 0.70 g/g y 60 minutos de reacción.



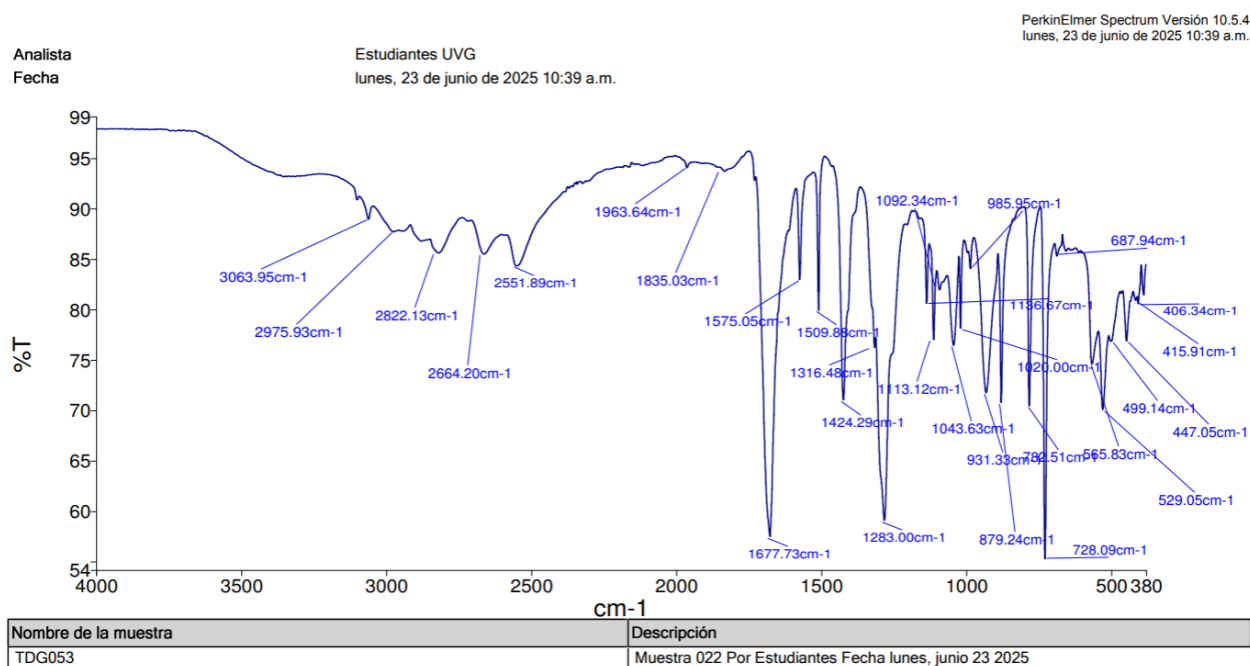
Nota. Se analizó una muestra de todas las combinaciones de temperatura y relación base-polímero, así como todos los tiempos de reacción, para confirmar la obtención de TPA. Se utilizó un espectrofotómetro FTIR Perkin Elmer Frontier con un accesorio UATR. (Elaboración propia).

Figura 19. Espectro FTIR de la muestra de sólidos recuperados a las condiciones de 80 °C, relación NaOH:PET de 0.85 g/g y 60 minutos de reacción.



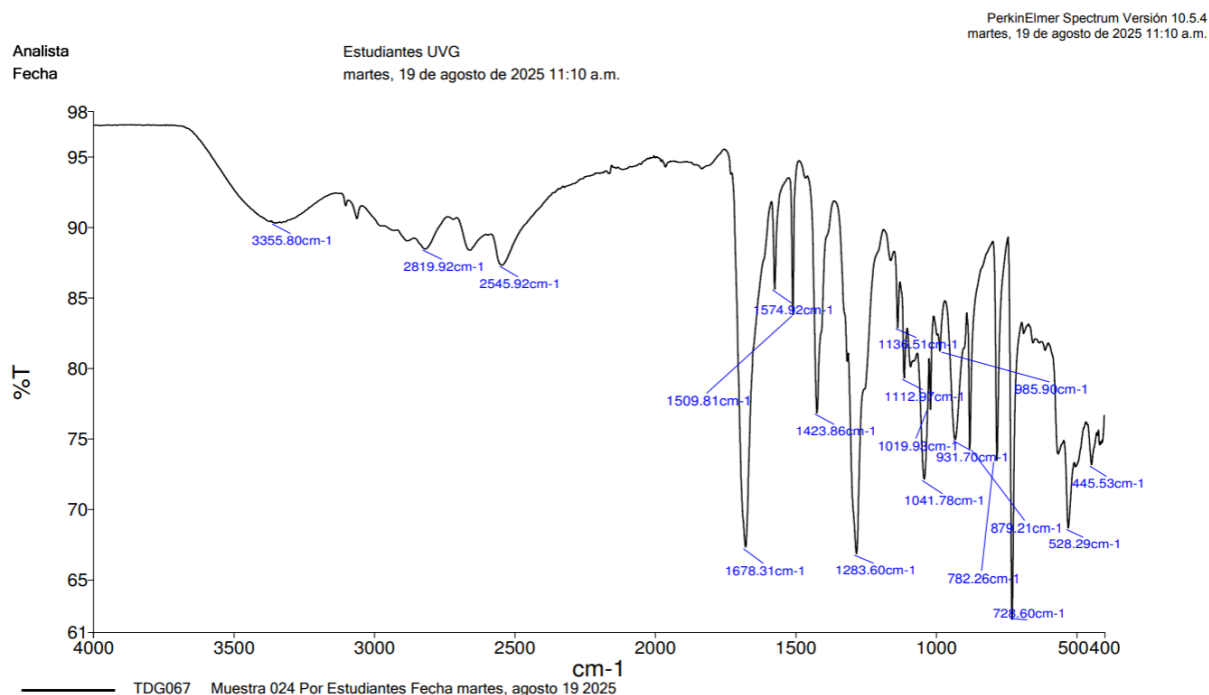
Nota. Se analizó una muestra de todas las combinaciones de temperatura y relación base-polímero, así como todos los tiempos de reacción, para confirmar la obtención de TPA. Se utilizó un espectrofotómetro FTIR Perkin Elmer Frontier con un accesorio UATR. (Elaboración propia).

Figura 20. Espectro FTIR de la muestra de sólidos recuperados a las condiciones de 80 °C, relación NaOH:PET de 1.0 g/g y 60 minutos de reacción.



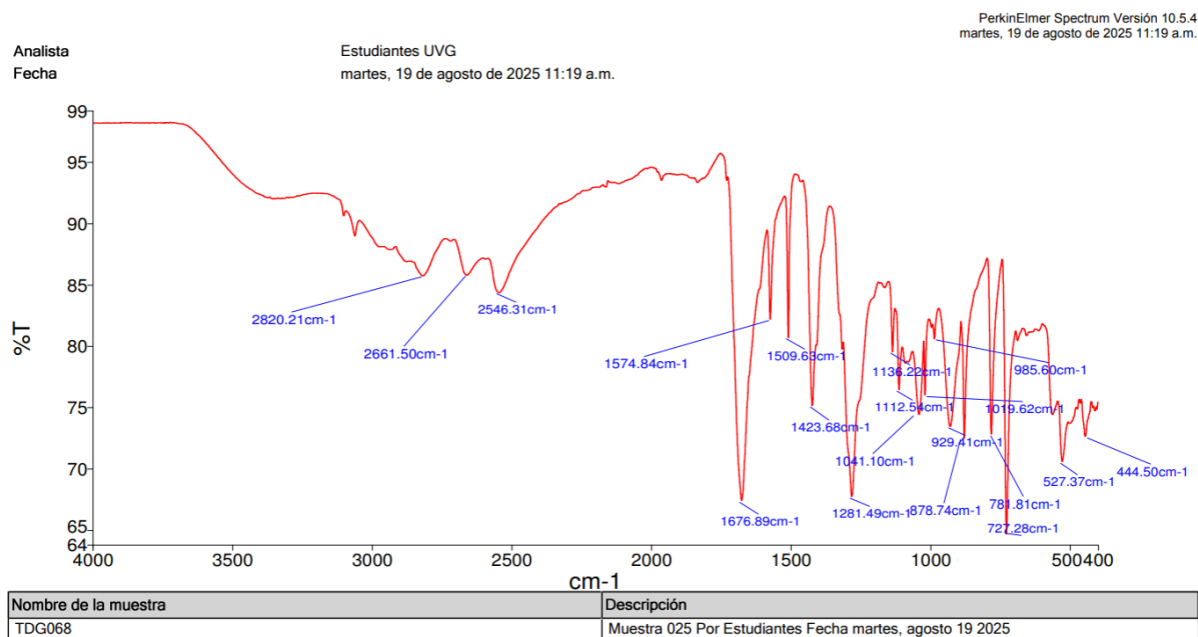
Nota. Se analizó una muestra de todas las combinaciones de temperatura y relación base-polímero, así como todos los tiempos de reacción, para confirmar la obtención de TPA. Se utilizó un espectrofotómetro FTIR Perkin Elmer Frontier con un accesorio UATR. (Elaboración propia).

Figura 21. Espectro FTIR de la muestra de sólidos recuperados a las condiciones de 80 °C, relación NaOH:PET de 1.0 g/g y 30 minutos de reacción.



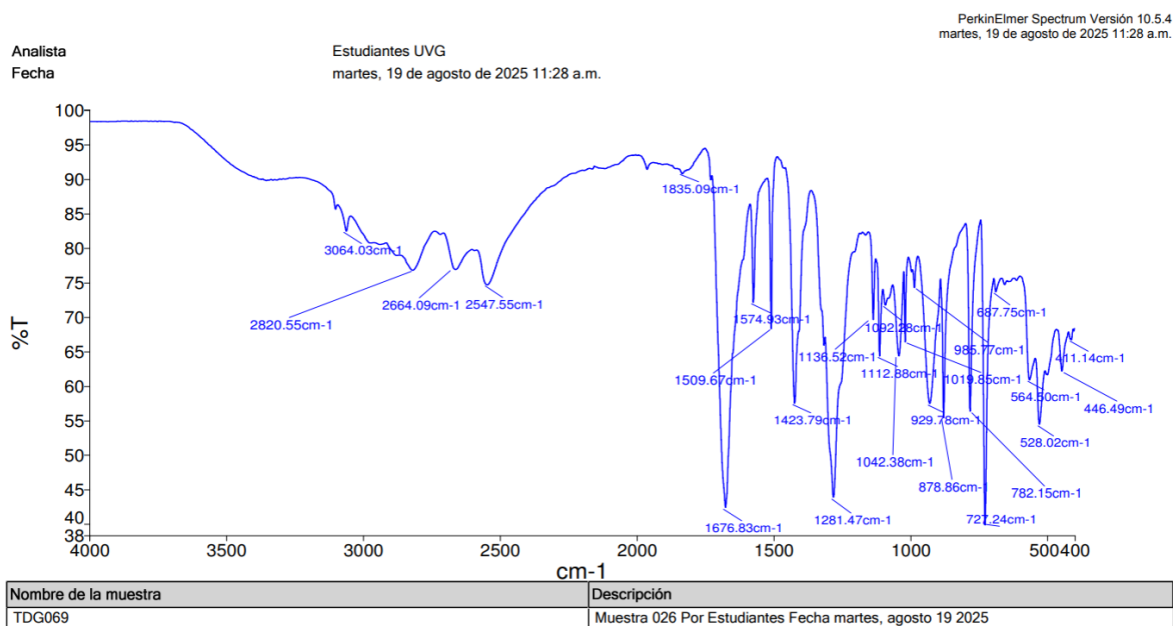
Nota. Se analizó una muestra de todas las combinaciones de temperatura y relación base-polímero, así como todos los tiempos de reacción, para confirmar la obtención de TPA. Se utilizó un espectrofotómetro FTIR Perkin Elmer Frontier con un accesorio UATR. (Elaboración propia).

Figura 22. Espectro FTIR de la muestra de sólidos recuperados a las condiciones de 80 °C, relación NaOH:PET de 1.0 g/g y 120 minutos de reacción.



Nota. Se analizó una muestra de todas las combinaciones de temperatura y relación base-polímero, así como todos los tiempos de reacción, para confirmar la obtención de TPA. Se utilizó un espectrofotómetro FTIR Perkin Elmer Frontier con un accesorio UATR. (Elaboración propia).

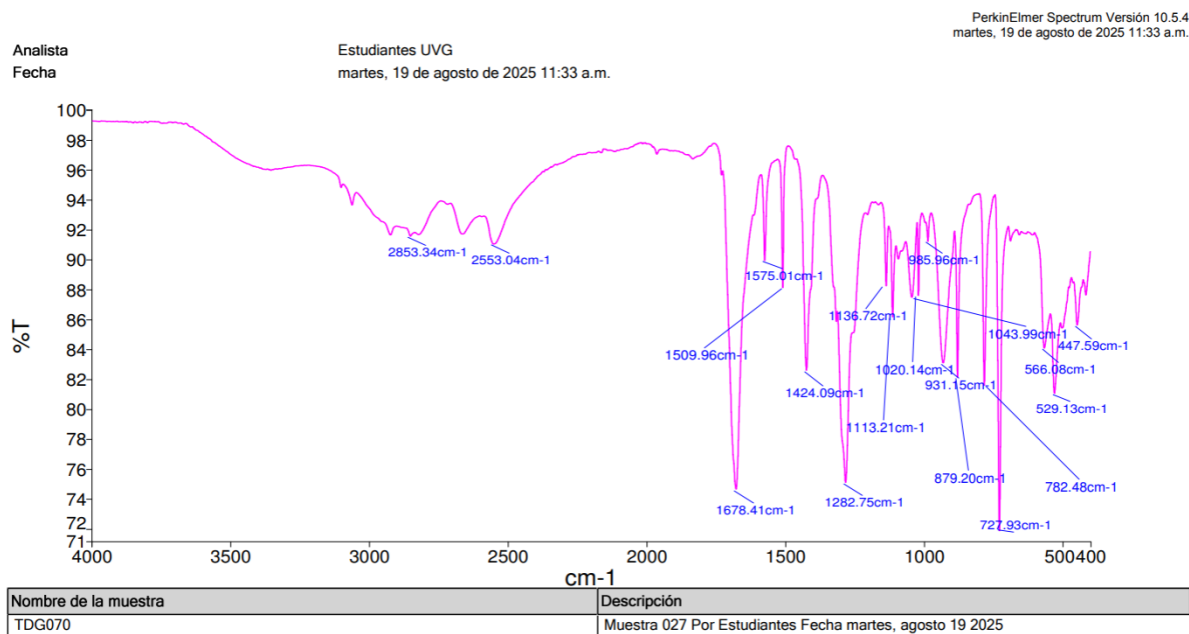
Figura 23. Espectro FTIR de la muestra de sólidos recuperados a las condiciones de 80 °C, relación NaOH:PET de 1.0 g/g y 180 minutos de reacción.



Nota. Se analizó una muestra de todas las combinaciones de temperatura y relación base-polímero, así como todos los tiempos de reacción, para confirmar la obtención de TPA. Se

utilizó un espectrofotómetro FTIR Perkin Elmer Frontier con un accesorio UATR. (Elaboración propia).

Figura 24. Espectro FTIR de la muestra de sólidos recuperados a las condiciones de 80 °C, relación NaOH:PET de 1.0 g/g y 240 minutos de reacción.



Nota. Se analizó una muestra de todas las combinaciones de temperatura y relación base-polímero, así como todos los tiempos de reacción, para confirmar la obtención de TPA. Se utilizó un espectrofotómetro FTIR Perkin Elmer Frontier con un accesorio UATR. (Elaboración propia).

G. Datos de equipo y material

Cuadro 35. Datos de la estufa eléctrica utilizada para el calentamiento de la reacción

Dato	Valor
Modelo	Cimarec™ SP131325
Tipo	Estufa con agitación y calentamiento
Dimensiones	20.8 × 33.0 × 9.7 cm
Peso	5.0 kg
Material de placa superior	Cerámica (7.25" × 7.25")
Voltaje	120 V

Dato	Valor
Frecuencia	60 Hz
Corriente	8.9 A
Potencia	1070 W
Temperatura máxima	540 °C
Capacidad de carga	11.3 kg sobres superficie

Nota. Esta estufa marca Thermo Scientific fue utilizada en todo proceso que requirió calentamiento y/o agitación, como llevar a cabo la reacción o la titulación. (Elaboración propia).

Cuadro 36. Datos de la centrífuga utilizada para separar el TPA sólido del medio

Dato	Valor
Modelo	Centrific® 228 04-978-228
Tipo de rotor	6 posiciones, ángulo 45° (nylon)
Tubos compatibles	7–17 mm Ø y 100–133 mm largo
Velocidad de rotación	3300 rpm
Fuerza centrífuga relativa	1380xg
Temporizador	Hasta 15 min con posición Hold
Voltaje	115 V
Potencia	242 W

Nota. Esta centrífuga marca Fisher Scientific fue utilizada para centrifugar la mezcla entre la fase sólida de TPA y la fase líquida ácida para poder remover la líquida y secarla en el secador con agua. (Elaboración propia).

Cuadro 37. Datos del secador utilizado para secar las muestras de TPA

Dato	Valor
Modelo	VWR Symphony Gravity Convection
Volumen interior	155 L
Dimensiones internas	55.1 W × 47 D × 59.9 H cm
Rango de temperatura	25 – 230 °C
Exactitud	±0.5 °C; uniformidad ±2 °C
Exactitud de ajuste	±1 °C
Recuperación	5 min a 100 °C tras abrir 30 s
Capacidad de carga	15 kg por parrilla; 25 kg en total
Flujo de aire	Convección por soplador
Potencia	320 W

Nota. Este secador marca VWR Symphony fue utilizado para secar todas las muestras de los sólidos recuperados luego de haberlos centrifugado y mezclado con agua nuevamente para separarlo de los tubos de la centrifuga y realizar el análisis gravimétrico. (Elaboración propia).

Cuadro 38. Datos del espectrofotómetro FTIR utilizado para analizar las muestras sólidas

Dato	Valor
Modelo	Perkin Elmer Frontier
Tipo de análisis	Espectroscopía de infrarrojo medio y cercano
Rango espectral	7800–350 cm ⁻¹ (dependiendo de configuración de detector)
Resolución espectral	Hasta 0.4 cm ⁻¹
Fuente de radiación	IR interna con purga de humedad/CO ₂ opcional
Detector	DTGS (opcional MCT según configuración)

Dato	Valor
Software	Perkin Elmer Spectrum
Dimensiones aprox.	60 × 40 × 25 cm (ancho × fondo × alto)
Peso aprox.	20–25 kg
Alimentación eléctrica	100–240 V, 50/60 Hz

Nota. Este espectrofotómetro marca Perkin Elmer fue utilizado para determinar si los picos característicos de TPA se encontraban en la muestra de sólidos obtenidos. Cabe mencionar que se este se utilizó con un accesorio UATR que se puede ver a continuación. (Elaboración propia).

Cuadro 39. Datos del UATR utilizado con el espectrofotómetro FTIR

Dato	Valor
Accesorio	UATR (Universal Attenuated Total Reflectance)
Compatibilidad	Serie Spectrum Two / Frontier
Cristal ATR	Diamante (resistente a ácidos, bases y presión)
Rango de operación	Coincide con el rango completo del FTIR, con menor sensibilidad en 1900–2700 cm ⁻¹
Tipo de muestra	Sólidos, polvos, pastas, geles, líquidos
Modo de operación	Reflexión interna total atenuada (ATR)
Presión aplicada	Mediante brazo de presión con zapatas intercambiables
Dimensiones aprox.	Se acopla al compartimiento de muestras del FTIR
Mantenimiento	Limpieza de cristal con agua destilada o solvente puro; reemplazo de o-ring y top-plate

Nota. Este accesorio UATR se utilizó en conjunto con el espectrofotómetro FTIR para llevar a cabo los análisis de las muestras de sólidos recuperados. (Elaboración propia).

Figura 25. Hoja de datos de producto de resina de PET usada para la producción de botellas de agua



Polyclear® Splash PET 3301

MOV-02-031 Rev. # 15 Enero, 2018

HOJA DE DATOS DE PRODUCTO

La resina Polyclear® Splash PET 3301 de Indorama Ventures Polymers México (IVPM) es un copolímero de Polietilén Tereftalato de fácil plastificación y baja velocidad de re-cristalización que facilita el proceso de inyección-estirado-soplado y ha sido diseñada especialmente para generar una cantidad mínima de acetaldehído durante el proceso de inyección.

Los envases fabricados con resina Polyclear® Splash PET 3301 tienen excelente color y claridad, se usan principalmente para envasar agua, alimentos, así como en aplicaciones de envases con diseños especiales y ofrece excelente rendimiento en procesos de inyección estirado-soplado.

La resina cumple con la regulación de la *Federal Food, Drug and Cosmetic Act* para aplicaciones específicas en alimentos. Para mayores detalles de la FDA, por favor contacte a IVPM. Los envases elaborados con la resina PET de IVPM son ligeros, irrompibles, tienen excelentes propiedades de transparencia, brillo y propiedades de barrera. Son atóxicos, se pueden pigmentar en una amplia gama de colores, y tienen la gran ventaja de ser totalmente reciclables.

Propiedad General	Unidad	Objetivo	Límites	Método de Análisis
Viscosidad Intrínseca *	dl/g	0.74	± 0.02	M2E-75-011 **
Color b	UCE	-2.0	± 1.25	M2E-75-002 **
Acetaldehído	ppm	0.6	1.0 Max.	M2E-75-007
Cristalización	%	53	50 Min.	M2E-71-043
Humedad	% wt	0.15	0.3 Max.	M2E-72-010 **
Finos	%	-	0.05 Max.	M2E-75-008 **
Densidad	g/ cm ³	1.398	1.394 Min.	M2E-71-043 **
Densidad Aparente	g/ cm ³	0.90	± 0.05	M2E-72-015 **
Tamaño de Chip	No/g	80	± 15	M2E-75-004 **
Punto de Fusión	° C	-	248 Máx.	M2E-73-002 **
Chips Amarillos	No/125 g	-	9 Max.	M2E-75-014 **

* Determinada por conversión de viscosidad en solución a viscosidad intrínseca usando una correlación empírica desarrollada por Indorama Ventures Polymers México.
 ** Método Interno.

Nota. Esta hoja de datos de la resina mencionada, producida por Indorama ventures, el mayor productor de resinas de PET a nivel mundial, presenta valores típicos para propiedades relevantes de dicho material, como la viscosidad intrínseca y densidad. Estas son utilizadas para la producción de botellas que cumplen con las regulaciones de la FDA para aplicaciones en alimentos. (Indorama Ventures, 2018).

H. Código utilizado para análisis de datos

En este trabajo de graduación, la mayor parte del análisis de datos se completó haciendo uso de la herramienta de R. En este se completaron las gráficas presentadas en el trabajo y los análisis estadísticos (ANOVA, Tukey HSD, etc.). A continuación, se observa la totalidad de este.

#Universidad del Valle de Guatemala

#Andrés Paz Molina 20181

#install.packages(c("tidyverse", "janitor", "ggpubr", "psych"))

#install.packages("readxl")

2. Cargar los paquetes para usarlos en esta sesión

library(tidyverse) # Conjunto de paquetes para importar, manipular y graficar datos

library(janitor) # Limpieza rápida de nombres de columnas y tablas

library(ggpubr) # Gráficos estadísticos amigables

library(psych) # Estadística descriptiva avanzada

library(readxl)

library(dplyr)

3. Leer el archivo Excel (Archivo en el working directory)

datos <- read_excel("Datos 1 Tesis sin modificar.xlsx", sheet = "Datos mod para R")

4. Limpiar nombres de las columnas (quita espacios, pone todo en minúscula, reemplaza tildes, etc.)

datos <- janitor::clean_names(datos)

#head(datos) # Muestra las primeras 6 filas

#str(datos) # Muestra la estructura de las variables (tipo, nombres de columna, etc.)

#summary(datos)

#colnames(datos) # Muestra los nombres actuales de las columnas

Objetivo específico 1

1. Filtrar SOLO las corridas del objetivo 1 (primera parte del experimento)

datos1 <- datos %>%

filter(row_number() <= 27)

2. Revisar nombres de columnas para ajustar en el código

colnames(datos1)

3. Tabla resumen (promedio y desviación estándar) por temperatura y relación

resumen_obj1 <- datos1 %>%

group_by(t, relacion_naohpet) %>%

summarise(

promedio = mean(rendimiento_tpa_sin_contar_pureza_percent, na.rm = TRUE),

desv_est = sd(rendimiento_tpa_sin_contar_pureza_percent, na.rm = TRUE),

n = n()

)

```

print(resumen_obj1)

datos1 <- datos1 %>%
  mutate(relacion_naohpet = as.factor(relacion_naohpet))

#####Gráfica con promedio y desviación

datos1["rendimiento_tpa_c_pureza_percent"]=datos1["rendimiento_tpa_c_pureza_percent"]*100
datos1["rendimiento_tpa_sin_contar_pureza_percent"] =
datos1["rendimiento_tpa_sin_contar_pureza_percent"]*100

summary_data <- datos1 %>%
  group_by(t, relacion_naohpet) %>%
  summarise(
    media = mean((rendimiento_tpa_sin_contar_pureza_percent), na.rm = TRUE),
    sd = sd((rendimiento_tpa_sin_contar_pureza_percent), na.rm = TRUE),
    media2 = mean((rendimiento_tpa_c_pureza_percent), na.rm = TRUE),
    sd2 = sd((rendimiento_tpa_c_pureza_percent), na.rm = TRUE),
    media3 = mean((n), na.rm = TRUE),
    sd3 = sd((n), na.rm = TRUE)
  )

#rendimiento de sólidos recuperados (sin pureza)
ggplot(datos1, aes(x = factor(t), y = rendimiento_tpa_sin_contar_pureza_percent, color =
relacion_naohpet)) +
  # Puntos individuales (de datos1)
  geom_point(position = position_jitterdodge(jitter.width = 0.1, dodge.width = 0.8), size =
2, alpha = 0.9) +
  # Media por grupo (de summary_data)
  geom_point(
    data = summary_data,
    aes(x = factor(t), y = media, color = relacion_naohpet, group = relacion_naohpet),
    shape = 18, size = 4, position = position_dodge(width = 0.8), inherit.aes = FALSE
  ) +
  # Barra de error (de summary_data)
  geom_errorbar(
    data = summary_data,
    aes(x = factor(t), ymin = media - sd, ymax = media + sd, color = relacion_naohpet, group
= relacion_naohpet),
    width = 0.2, position = position_dodge(width = 0.8), inherit.aes = FALSE
  ) +
  labs(
    title = "Rendimiento de la reacción de síntesis de TPA sin tomar en cuenta la
pureza en función de Temperatura y Relación NaOH:PET",

```

```

    x = "Temperatura (°C)",
    y = "Rendimiento (%)",
    color = "NaOH:PET (g/g)"
) +
scale_y_continuous(limits = c(0, 8)) +
scale_color_manual(values = c("#ECCBAE", "#046C9A", "#D69C4E")) +
theme_minimal()+
theme(
  plot.title = element_text(hjust = 0.5) # centra el título (1 o 2 líneas)
)

#rendimiento corregido por TPA (con pureza)
ggplot(datos1, aes(x = factor(t), y = rendimiento_tpa_c_pureza_percent, color =
relacion_naohpet)) +
  # Puntos individuales (de datos1)
  geom_point(position = position_jitterdodge(jitter.width = 0.1, dodge.width = 0.8), size =
2, alpha = 0.9) +
  # Media por grupo (de summary_data)
  geom_point(
    data = summary_data,
    aes(x = factor(t), y = media2, color = relacion_naohpet, group = relacion_naohpet),
    shape = 18, size = 4, position = position_dodge(width = 0.8), inherit.aes = FALSE
  ) +
  # Barra de error (de summary_data)
  geom_errorbar(
    data = summary_data,
    aes(x = factor(t), ymin = media2 - sd2, ymax = media2 + sd2, color = relacion_naohpet,
group = relacion_naohpet),
    width = 0.2, position = position_dodge(width = 0.8), inherit.aes = FALSE
  ) +
  labs(
    title = "Rendimiento de la reacción de síntesis de TPA tomando en cuenta la
pureza en función de Temperatura y Relación NaOH:PET",
    x = "Temperatura (°C)",
    y = "Rendimiento (%)",
    color = "NaOH:PET (g/g)"
  ) +
  scale_y_continuous(limits = c(0, 4.5)) +
  scale_color_manual(values = c("#ECCBAE", "#046C9A", "#D69C4E")) +
  theme_minimal()+
  theme(
    plot.title = element_text(hjust = 0.5) # centra el título (1 o 2 líneas)
  )

#Grado de polimerización
ggplot(datos1, aes(x = factor(t), y = n, color = relacion_naohpet)) +
  # Puntos individuales (de datos1)

```

```

geom_point(position = position_jitterdodge(jitter.width = 0.1, dodge.width = 0.8), size =
2, alpha = 0.9) +
# Media por grupo (de summary_data)
geom_point(
  data = summary_data,
  aes(x = factor(t), y = media3, color = relacion_naohpet, group = relacion_naohpet),
  shape = 18, size = 4, position = position_dodge(width = 0.8), inherit.aes = FALSE
) +
# Barra de error (de summary_data)
geom_errorbar(
  data = summary_data,
  aes(x = factor(t), ymin = media3 - sd3, ymax = media3 + sd3, color = relacion_naohpet,
group = relacion_naohpet),
  width = 0.2, position = position_dodge(width = 0.8), inherit.aes = FALSE
) +
labs(
  title = "Grado de polimerización por Temperatura y Relación NaOH:PET",
  x = "Temperatura (°C)",
  y = "Grado de polimerización promedio",
  color = "NaOH:PET (g/g)"
) +
scale_y_continuous(limits = c(0, 3)) +
scale_color_manual(values = c("#ECCBAE", "#046C9A", "#D69C4E")) +
theme_minimal()+
theme(
  plot.title = element_text(hjust = 0.5) # centra el título (1 o 2 líneas)
)

```

```

# 5. Gráfico de interacción (con los promedios de rendimiento), sólidos recuperados (sin
pureza)
datos1 %>%
  group_by(t, relacion_naohpet) %>%
  summarise(media = mean(rendimiento_tpa_sin_contar_pureza_percent, na.rm = TRUE))
%>%
  ggplot(aes(x = t, y = media, group = relacion_naohpet, color =
as.factor(relacion_naohpet))) +
  geom_line(size = 1.2) + geom_point(size = 3) +
  labs(title = "Interacción Temperatura sin pureza - Relación NaOH:PET",
    x = "Temperatura (°C)", y = "Rendimiento promedio (%)", color = "NaOH:PET (g/g)")
+
  scale_y_continuous(limits = c(0, 7)) +
  scale_color_manual(values = c("#ECCBAE", "#046C9A", "#D69C4E")) +
  theme_minimal()+
  theme(
    plot.title = element_text(hjust = 0.5) # centra el título (1 o 2 líneas)
  )

```

```

# Gráfico de interacción (con los promedios de rendimiento), rendimiento corregido por
TPA
datos1 %>%
  group_by(t, relacion_naohpet) %>%
  summarise(media = mean(rendimiento_tpa_c_pureza_percent, na.rm = TRUE)) %>%
  ggplot(aes(x = t, y = media, group = relacion_naohpet, color =
as.factor(relacion_naohpet))) +
  geom_line(size = 1.2) + geom_point(size = 3) +
  labs(title = "Interacción Temperatura con pureza - Relación NaOH:PET",
    x = "Temperatura (°C)", y = "Rendimiento promedio (%)", color = "NaOH:PET (g/g)")
+
  scale_y_continuous(limits = c(0, 4)) +
  scale_color_manual(values = c("#ECCBAE", "#046C9A", "#D69C4E")) +
  theme_minimal()+
  theme(
    plot.title = element_text(hjust = 0.5) # centra el título (1 o 2 líneas)
  )

# 6. ANOVA de dos factores
# Convierte los factores
datos1 <- datos1 %>%
  mutate(
    t = as.factor(t),
    relacion_naohpet = as.factor(relacion_naohpet)
  )

#Anova de rendimientos de sólidos recuperados
anova1 <- aov(rendimiento_tpa_sin_contar_pureza_percent ~ t * relacion_naohpet, data =
datos1)
summary(anova1)

#Tukey de rendimientos de sólidos recuperados
TukeyHSD(anova1)

#Anova de rendimientos corregidos por TPA
anova2 <- aov(rendimiento_tpa_c_pureza_percent ~ t * relacion_naohpet, data = datos1)
summary(anova2)

#Tukey de rendimientos corregidos por TPA
TukeyHSD(anova2)

# Test de normalidad de datos de sólidos recuperados
shapiro.test(residuals(anova1))

# Test de normalidad de datos de renmientos corregidos por TPA
shapiro.test(residuals(anova2))

```

```

##### Pareto de error estandarizado

### Se selecciona el resp_var a utilizar de los dos según el pareto que se busque obtener
resp_var <- "rendimiento_tpa_sin_contar_pureza_percent"
resp_var <- "rendimiento_tpa_c_pureza_percent" # alternativa

# Aquí se usa 70 vs 80 °C y 0.7 vs 1.0 g/g, usando los bajos y altos nada más para el pareto
datos1 <- datos1 %>%
  mutate(
    t = as.numeric(as.character(t)),
    relacion_naohpet = as.numeric(as.character(relacion_naohpet))
  )

df_2k <- datos1 %>%
  mutate(rel_num = as.numeric(as.character(relacion_naohpet))) %>% # por si quedó como
factor
  filter(t %in% c(70, 80), rel_num %in% c(0.7, 1.0)) %>%
  # codificación -1/+1 para DOE
  mutate(
    A = ifelse(t == max(t), 1, -1), # A = Temperatura (alto=80, bajo=70)
    B = ifelse(rel_num == max(rel_num), 1, -1), # B = Relación (alto=1.0, bajo=0.7)
    y = .data[[resp_var]]
  )

# Ajuste del modelo codificado ( $y = b_0 + b_A * A + b_B * B + b_{AB} * A * B$ ), de analisis factorial
fit <- lm(y ~ A * B, data = df_2k)
sm <- summary(fit)

# Efectos y efectos estandarizados
# En el modelo codificado, "efecto" = 2*coeficiente; SE(efecto) = 2*SE(coef)
coefs <- as.data.frame(sm$coefficients)
eff <- coefs[c("A", "B", "A:B"), , drop = FALSE]
eff$effect <- 2 * eff$Estimate
eff$se_effect <- 2 * eff$`Std. Error`
eff$std_effect <- abs(eff$effect / eff$se_effect) # = |t| del coeficiente

pareto_std <- eff %>%
  mutate(term = c("Temperatura",
    "Relación NaOH:PET",
    "Interacción entre ambas")) %>%
  select(term, std_effect)

# Línea crítica (t de Student,  $\alpha=0.05$ , dos colas)
alpha <- 0.05
df_res <- sm$df[2] # grados de libertad residuales
tcrit <- qt(1 - alpha/2, df_res) # umbral de |t|

```

```

# Pareto clásico de efectos estandarizados
ggplot(pareto_std, aes(x = reorder(term, std_effect), y = std_effect)) +
  geom_col(fill = "#046C9A", width = 0.8) +
  coord_flip() +
  geom_hline(yintercept = tcrit, linetype = "dashed") +
  labs(
    title = "Pareto de efectos estandarizados de TPA",
    x = "Término",
    y = "Efecto estandarizado"
  ) +
  scale_y_continuous(limits = c(0, 15)) +
  theme_minimal()

library(dplyr)
library(ggplot2)
library(broom)

#Para analisis factorial típico 2^2 del alto y bajo nada más
#No se colocó pero se usó para analizar
# Bajo/Alto para cada factor
t_low <- 70
t_high <- 80
r_low <- 0.7
r_high <- 1.0

# Asegura que relacion_naohpet pueda compararse (si es factor, pásalo a número seguro)
datos1 <- datos1 %>%
  mutate(relacion_naohpet_num = as.numeric(as.character(relacion_naohpet)))

# Filtra 2 niveles por factor
datos_factorial <- datos1 %>%
  filter(t %in% c(t_low, t_high),
         relacion_naohpet_num %in% c(r_low, r_high)) %>%
  # por claridad, nos quedamos con la columna original de relación como factor "limpio"
  mutate(relacion_naohpet = factor(relacion_naohpet_num,
                                   levels = c(r_low, r_high),
                                   labels = c(as.character(r_low), as.character(r_high)))) %>%
  select(t, relacion_naohpet, rendimiento_tpa_sin_contar_pureza_percent)

count_table <- datos_factorial %>% count(t, relacion_naohpet)
print(count_table)

# MATRIZ DE SIGNOS (método clásico)
# Efectos = sum(signo * y) / (n/2)
df_signos <- datos_factorial %>%

```

```

mutate(
  A = ifelse(t == t_high, 1, -1), # Temperatura codificada ±1
  B = ifelse(relacion_naohpet == as.character(r_high), 1, -1), # Relación codificada ±1
  AB = A * B
)

n_total <- nrow(df_signos)
efecto_A <- sum(df_signos$A * df_signos$rendimiento_tpa_sin_contar_pureza_percent) /
(n_total/2)
efecto_B <- sum(df_signos$B * df_signos$rendimiento_tpa_sin_contar_pureza_percent) /
(n_total/2)
efecto_AB <- sum(df_signos$AB *
df_signos$rendimiento_tpa_sin_contar_pureza_percent) / (n_total/2)

efectos_signos <- tibble(
  termino = c("Temperatura (A)", "Relación NaOH:PET (B)", "Interacción (A:B)"),
  efecto = c(efecto_A, efecto_B, efecto_AB)
)
print(efectos_signos)

# Interpretación rápida:
# - efecto > 0: subir del nivel bajo al alto incrementa el rendimiento.
# - efecto < 0: subir del nivel bajo al alto disminuye el rendimiento.
# Si la interacción es grande → el efecto de un factor depende del otro

# 2) REGRESIÓN CON VARIABLES CODIFICADAS (±1)
# (equivalente, pero con p-valores, ICs y predicción)
# En variables codificadas, el coeficiente = efecto/2.
fit_coded <- lm(
  rendimiento_tpa_sin_contar_pureza_percent ~ A + B + A:B,
  data = df_signos
)

# Resumen con p-valores
summary(fit_coded)

# Tabla ordenada y con efectos (coef * 2)
tabla_reg <- tidy(fit_coded, conf.int = TRUE) %>%
  mutate(efecto_equivalente = ifelse(term == "(Intercept)", NA, 2*estimate)) %>%
  arrange(desc(abs(ifelse(is.na(efecto_equivalente), 0, efecto_equivalente))))
print(tabla_reg)

```

Objetivo específico 2

1. Filtrar SOLO las corridas del objetivo 2 (según filas o por columna tiempo)

```

datos2 <- datos %>%
  filter(row_number() > 27) # O usa un filtro por columna si tienes "tiempo_min" o similar

datos2["rendimiento_tpa_c_pureza_percent"]=datos2["rendimiento_tpa_c_pureza_percent"]*100
datos2["rendimiento_tpa_sin_contar_pureza_percent"] =
datos2["rendimiento_tpa_sin_contar_pureza_percent"]*100

#Para rendimiento de sólidos recuperados (sin pureza)
# 2. Tabla resumen
resumen_obj2 <- datos2 %>%
  group_by(tiempo_min) %>%
  summarise(
    promedio = mean(rendimiento_tpa_sin_contar_pureza_percent, na.rm = TRUE),
    desv_est = sd(rendimiento_tpa_sin_contar_pureza_percent, na.rm = TRUE),
    n = n()
  )
print(resumen_obj2)

#cálculos para la regresión de esta

df_fit <- datos2 %>%
  transmute(
    tiempo_min = as.numeric(tiempo_min),
    rendimiento = as.numeric(rendimiento_tpa_sin_contar_pureza_percent)
  ) %>%
  filter(is.finite(tiempo_min), is.finite(rendimiento))

# 1) AJUSTE EXPONENCIAL: rendimiento = Rmax * (1 - exp(-k * t))
start_Rmax <- max(df_fit$rendimiento, na.rm = TRUE)
start_k <- 0.01

modelo <- nls(
  rendimiento ~ Rmax * (1 - exp(-k * tiempo_min)),
  data = df_fit,
  start = list(Rmax = start_Rmax, k = start_k),
  control = nls.control(maxiter = 200, warnOnly = TRUE)
)

summary(modelo) # para ver estimaciones y errores estándar

# 2) CÁLCULO DE R² para nls
#  $R^2 = 1 - \text{RSS}/\text{TSS}$ , usando los datos realmente usados en el ajuste
y_obs <- df_fit$rendimiento
y_pred <- predict(modelo, newdata = df_fit)

```

```

rss    <- sum((y_obs - y_pred)^2)
tss    <- sum((y_obs - mean(y_obs))^2)
R2_exp <- 1 - rss/tss
cat(sprintf("R² del modelo exponencial (rendimiento): %.3f\n", R2_exp))

# 3) CURVA PARA GRAFICAR: malla de tiempos y predicción suave
tiempos_pred <- seq(
  min(df_fit$tiempo_min, na.rm = TRUE),
  max(df_fit$tiempo_min, na.rm = TRUE),
  length.out = 200
)

pred_curve <- data.frame(
  tiempo_min = tiempos_pred,
  rend_pred = predict(modelo, newdata = data.frame(tiempo_min = tiempos_pred))
)

# 4) (Re)CREAR RESUMEN por tiempo (promedio y SD) si no existe
# Usa solo datos de datos2 (segundo objetivo)
if(!exists("resumen_obj2")) {
  resumen_obj2 <- datos2 %>%
    group_by(tiempo_min) %>%
    summarise(
      promedio = mean(rendimiento_tpa_sin_contar_pureza_percent, na.rm = TRUE),
      desv_est = sd(rendimiento_tpa_sin_contar_pureza_percent, na.rm = TRUE),
      .groups = "drop"
    ) %>%
    arrange(tiempo_min)
}

# 5) GRÁFICA FINAL:
# puntos reales + promedios + barras de error + regresión exponencial
ggplot(resumen_obj2, aes(x = tiempo_min, y = promedio)) +
  # (a) Puntos reales individuales (datos2)
  geom_point(data = datos2,
    aes(x = tiempo_min, y = rendimiento_tpa_sin_contar_pureza_percent),
    color = "black", size = 2, alpha = 0.6, inherit.aes = FALSE) +
  # (b) Puntos promedio
  geom_point(size = 3, color = "#046C9A") +
  # (d) Barras de error (±1 SD)
  geom_errorbar(aes(ymin = promedio - desv_est, ymax = promedio + desv_est),
    width = 10) +
  # (e) Curva exponencial ajustada (línea roja)
  geom_line(data = pred_curve,
    aes(x = tiempo_min, y = rend_pred),
    color = "#A42820", linewidth = 1) +
  labs(title = "Rendimiento de TPA sin pureza vs. Tiempo (con ajuste exponencial)",

```

```

    x = "Tiempo (min)",
    y = "Rendimiento (%)" +
scale_y_continuous(limits = c(0, 12)) +
theme_minimal() +
theme(
  plot.title = element_text(hjust = 0.5) # centra el título
)

resumen_obj2 <- resumen_obj2 %>%
  mutate(
    tasa_cambio = c(NA, diff(promedio) / diff(tiempo_min))
  )

print(resumen_obj2) #para ver el cambio en la tasa de crecimiento

#Gráfica de tasas de cambio
ggplot(resumen_obj2, aes(x = tiempo_min, y = tasa_cambio)) +
  geom_point(size = 3) +
  geom_line(group = 1) +
  labs(
    title = "Tasa de cambio del rendimiento sin pureza en función del tiempo",
    x = "Tiempo (min)",
    y = "Tasa de cambio (%/min)"
  ) +
  scale_y_continuous(limits = c(0, 0.15)) +
  theme_minimal()

#Para rendimiento corregido por TPA (con pureza)

resumen_obj2 <- datos2 %>%
  group_by(tiempo_min) %>%
  summarise(
    promedio = mean(rendimiento_tpa_c_pureza_percent, na.rm = TRUE),
    desv_est = sd(rendimiento_tpa_c_pureza_percent, na.rm = TRUE),
    n = n()
  )

df_fit <- datos2 %>%
  transmute(
    tiempo_min = as.numeric(tiempo_min),
    rendimiento = as.numeric(rendimiento_tpa_c_pureza_percent)
  ) %>%
  filter(is.finite(tiempo_min), is.finite(rendimiento))

```

```

# 1) AJUSTE EXPONENCIAL: rendimiento = Rmax * (1 - exp(-k * t))
start_Rmax <- max(df_fit$rendimiento, na.rm = TRUE)
start_k <- 0.01

modelo <- nls(
  rendimiento ~ Rmax * (1 - exp(-k * tiempo_min)),
  data = df_fit,
  start = list(Rmax = start_Rmax, k = start_k),
  control = nls.control(maxiter = 200, warnOnly = TRUE)
)

summary(modelo) # para ver estimaciones y errores estándar

# 2) CÁLCULO DE R2 para nls
# R2 = 1 - RSS/TSS, usando los datos realmente usados en el ajuste
y_obs <- df_fit$rendimiento
y_pred <- predict(modelo, newdata = df_fit)
rss <- sum((y_obs - y_pred)^2)
tss <- sum((y_obs - mean(y_obs))^2)
R2_exp <- 1 - rss/tss
cat(sprintf("R2 del modelo exponencial (rendimiento): %.3f\n", R2_exp))

# 3) CURVA PARA GRAFICAR: malla de tiempos y predicción suave
tiempos_pred <- seq(
  min(df_fit$tiempo_min, na.rm = TRUE),
  max(df_fit$tiempo_min, na.rm = TRUE),
  length.out = 200
)

pred_curve <- data.frame(
  tiempo_min = tiempos_pred,
  rend_pred = predict(modelo, newdata = data.frame(tiempo_min = tiempos_pred))
)

# 4) (Re)CREAR RESUMEN por tiempo (promedio y SD) si no existe
# Usa solo datos de datos2 (segundo objetivo)
if (!exists("resumen_obj2")) {
  resumen_obj2 <- datos2 %>%
    group_by(tiempo_min) %>%
    summarise(
      promedio = mean(rendimiento_tpa_c_pureza_percentt, na.rm = TRUE),
      desv_est = sd(rendimiento_tpa_c_pureza_percent, na.rm = TRUE),
      .groups = "drop"
    ) %>%
    arrange(tiempo_min)
}

```

```

# 5) GRÁFICA FINAL:
# puntos reales + promedios + barras de error + curva exponencial
ggplot(resumen_obj2, aes(x = tiempo_min, y = promedio)) +
  # (a) Puntos reales individuales (datos2)
  geom_point(data = datos2,
             aes(x = tiempo_min, y = rendimiento_tpa_c_pureza_percent),
             color = "black", size = 2, alpha = 0.6, inherit.aes = FALSE) +
  # (b) Puntos promedio
  geom_point(size = 3, color = "#046C9A") +
  # (d) Barras de error ( $\pm 1$  SD)
  geom_errorbar(aes(ymin = promedio - desv_est, ymax = promedio + desv_est),
               width = 10) +
  # (e) Curva exponencial ajustada (línea roja)
  geom_line(data = pred_curve,
            aes(x = tiempo_min, y = rend_pred),
            color = "#A42820", linewidth = 1) +
  labs(title = "Rendimiento de TPA con pureza vs. Tiempo (con ajuste exponencial)",
       x = "Tiempo (min)",
       y = "Rendimiento (%)") +
  scale_y_continuous(limits = c(0, 8.5)) +
  theme_minimal() +
  theme(
    plot.title = element_text(hjust = 0.5) # centra el título
  )

resumen_obj2 <- resumen_obj2 %>%
  mutate(
    tasa_cambio = c(NA, diff(promedio) / diff(tiempo_min))
  )

print(resumen_obj2) #para ver el cambio en la tasa de crecimiento

#gráfica de la tasa de cambio
ggplot(resumen_obj2, aes(x = tiempo_min, y = tasa_cambio)) +
  geom_point(size = 3) +
  geom_line(group = 1) +
  labs(
    title = "Tasa de cambio del rendimiento en función del tiempo",
    x = "Tiempo (min)",
    y = "Tasa de cambio (%/min)"
  ) +
  scale_y_continuous(limits = c(0, 0.1)) +
  theme_minimal()

#para el grado de polimerización en función del tiempo
resumen_obj2 <- datos2 %>%

```

```

group_by(tiempo_min) %>%
summarise(
  promedio = mean(n, na.rm = TRUE),
  desv_est = sd(n, na.rm = TRUE),
  n = n()
)

ggplot(resumen_obj2, aes(x = tiempo_min, y = promedio)) +
  # Puntos reales individuales
  geom_point(data = datos2,
    aes(x = tiempo_min, y = n),
    color = "black", size = 2, alpha = 0.6) +
  # Puntos promedio
  geom_point(size = 3, color = "#046C9A") +
  # Línea con los promedios
  geom_line(group = 1, color = "#046C9A") +
  # Barras de error (desviación estándar)
  geom_errorbar(aes(ymin = promedio - desv_est, ymax = promedio + desv_est),
    width = 10) +
  labs(title = "Grado de polimerización vs. Tiempo",
    x = "Tiempo (min)",
    y = "Grado de polimerización promedio") +
  scale_y_continuous(limits = c(0, 3)) +
  scale_color_manual(values = c("#ECCBAE", "#046C9A", "#D69C4E")) +
  theme_minimal()+
  theme(
    plot.title = element_text(hjust = 0.5) # centra el título (1 o 2 líneas)
  )

```

#Para los datos de conversión

```
datos2["conversion_de_pet_percent"]=datos2["conversion_de_pet_percent"]*100
```

```

resumen_conv <- datos2 %>%
group_by(tiempo_min) %>%
summarise(
  promedio = mean(conversion_de_pet_percent, na.rm = TRUE),
  desv_est = sd(conversion_de_pet_percent, na.rm = TRUE),
  n = n(),
  .groups = "drop"
) %>%
arrange(tiempo_min)

```

```
print(resumen_conv)
```

#Conversión con el tiempo

```

ggplot(resumen_conv, aes(x = tiempo_min, y = promedio)) +
  # Puntos reales (mediciones)
  geom_point(data = datos2,
             aes(x = tiempo_min, y = conversion_de_pet_percent),
             color = "black", size = 2, alpha = 0.6) +
  # Puntos de promedio
  geom_point(size = 3, color = "#046C9A") +
  # Línea que une promedios
  geom_line(group = 1, color = "#046C9A") +
  # Barras de error ( $\pm 1$  SD)
  geom_errorbar(aes(ymin = promedio - desv_est, ymax = promedio + desv_est),
               width = 10) +
  labs(title = "Conversión de PET vs. Tiempo",
       x = "Tiempo (min)",
       y = "Conversión (%)") +
  scale_y_continuous(limits = c(0, 10)) +
  scale_color_manual(values = c("#ECCBAE", "#046C9A", "#D69C4E")) +
  theme_minimal() +
  theme(
    plot.title = element_text(hjust = 0.5) # centra el título (1 o 2 líneas)
  )

# Ajustar modelo no lineal tipo exponencial de saturación
modelo <- nls(
  conversion_de_pet_percent ~ Xmax * (1 - exp(-k * tiempo_min)),
  data = datos2,
  start = list(Xmax = max(datos2$conversion_de_pet_percent, na.rm = TRUE),
               k = 0.01) # valor inicial estimado
)

summary(modelo)

# Crear predicciones para graficar curva
tiempos_pred <- seq(
  min(datos2$tiempo_min, na.rm = TRUE),
  max(datos2$tiempo_min, na.rm = TRUE),
  length.out = 100
)

pred <- data.frame(
  tiempo_min = tiempos_pred,
  conversion_pred = predict(modelo, newdata = data.frame(tiempo_min = tiempos_pred))
)

# Graficar datos reales + curva ajustada
ggplot(datos2, aes(x = tiempo_min, y = conversion_de_pet_percent)) +

```

```

geom_point(color = "#046C9A", size = 2) + # puntos experimentales
geom_line(data = pred, aes(x = tiempo_min, y = conversion_pred), color = "#A42820",
size = 1) +
labs(
  title = "Conversión de PET vs. Tiempo",
  x = "Tiempo (min)",
  y = "Conversión (%)"
) +
theme_minimal()

```

#Se realiza una prueba Q para determinar si hay punto atípico en 240 minutos

```
library(broom)
```

0) Datos limpios (tiempo y conversión)

```

df <- datos2 %>%
  transmute(
    tiempo_min = as.numeric(tiempo_min),
    conv = as.numeric(conversion_de_pet_percent)
  ) %>%
  filter(is.finite(tiempo_min), is.finite(conv))

```

```
#install.packages("outliers")
```

```
library(outliers)
```

Aisla valores de 240

```
valores_240 <- c(df$conv[13:15])
```

Aplicar prueba Q de Dixon al valor sospechoso

```
resultado_q <- dixon.test(valores_240)
```

```
print(resultado_q)
```

#Al reconocerse como dato atípico, se quita de los valores

```
df <- df[-14, ]
```

```
stopifnot(nrow(df) >= 5) # por seguridad
```

1) Ajustes de modelos: se analizaron varios, aunque se terminó utilizando el exponencial

1a) Exponencial de saturación: $conv = X_{max} * (1 - \exp(-k * t))$

```
start_Xmax <- max(df$conv, na.rm = TRUE)
```

```
start_k <- 0.01
```

```

mod_exp <- nls(
  conv ~ Xmax * (1 - exp(-k * tiempo_min)),
  data = df,

```

```

start = list(Xmax = start_Xmax, k = start_k),
control = nls.control(maxiter = 200, warnOnly = TRUE)
)

# 1b) Potencial: conv = a * t^b (t > 0; si t=0 no sirve)
df_pos <- df %>% filter(tiempo_min > 0, conv > 0)
coefs_log <- coef(lm(log(conv) ~ log(tiempo_min), data = df_pos))
start_a <- exp(coefs_log[1]); start_b <- coefs_log[2]
mod_pot <- nls(
  conv ~ a * tiempo_min^b,
  data = df_pos,
  start = list(a = as.numeric(start_a), b = as.numeric(start_b)),
  control = nls.control(maxiter = 200, warnOnly = TRUE)
)

# 1c) Cúbico: conv ~ t + t^2 + t^3
mod_cub <- lm(conv ~ poly(tiempo_min, 3, raw = TRUE), data = df)

# 2) Métricas comparativas
metrics <- function(model, data, y_obs, y_hat) {
  n <- length(y_obs)
  p <- length(coef(model))
  rss <- sum((y_obs - y_hat)^2)
  tss <- sum((y_obs - mean(y_obs))^2)
  r2 <- 1 - rss / tss
  rmse <- sqrt(rss / n)
  tibble(R2 = r2, RMSE = rmse,
    AIC = AIC(model), BIC = BIC(model),
    n = n, p = p)
}

# Predicciones en malla común
t_seq <- seq(min(df$tiempo_min), max(df$tiempo_min), length.out = 200)
pred_exp <- predict(mod_exp, newdata = data.frame(tiempo_min = t_seq))
pred_pot <- predict(mod_pot, newdata = data.frame(tiempo_min = t_seq))
pred_cub <- predict(mod_cub, newdata = data.frame(tiempo_min = t_seq))

# Predicciones en los puntos observados (para métricas)
yhat_exp_obs <- predict(mod_exp, newdata = df)

yhat_pot_obs <- predict(mod_pot, newdata = df %>% mutate(tiempo_min =
  ifelse(tiempo_min <= 0, NA, tiempo_min)))
yhat_cub_obs <- predict(mod_cub, newdata = df)

resumen <- bind_rows(
  metrics(mod_exp, df, df$conv, yhat_exp_obs) %>% mutate(modelo = "Exponencial"),

```

```

  metrics(mod_pot, df_pos, df_pos$conv, predict(mod_pot, newdata = df_pos)) %>%
mutate(modelo = "Potencial"),
  metrics(mod_cub, df, df$conv, yhat_cub_obs) %>% mutate(modelo = "Cúbico")
) %>%
  select(modelo, R2, RMSE, AIC, BIC, n, p)

print(resumen)

```

```

# 3) Elegir "mejor" modelo
# (usa criterio = "R2" para mayor; o "AIC" / "BIC" para menor)
criterio <- "R2" # opciones: "R2", "AIC", "BIC"
if (criterio == "R2") {
  best_row <- resumen %>% slice_max(R2, n = 1)
} else if (criterio == "AIC") {
  best_row <- resumen %>% slice_min(AIC, n = 1)
} else if (criterio == "BIC") {
  best_row <- resumen %>% slice_min(BIC, n = 1)
}
best_model <- best_row$modelo[1]
message("Mejor modelo (según ", criterio, "): ", best_model)
# a pesar de que el cúbico da mejor R2, el exponencial tiene más validez teórica

```

```

# 4) Dataframe para graficar las tres curvas
curvas <- bind_rows(
  tibble(tiempo_min = t_seq, y = pred_exp, modelo = "Exponencial"),
  tibble(tiempo_min = t_seq, y = pred_pot, modelo = "Potencial"),
  tibble(tiempo_min = t_seq, y = pred_cub, modelo = "Cúbico")
)

```

```

# 5) Gráfico: puntos + modelo con mayor R2 sólido + demás punteado
ggplot(df, aes(x = tiempo_min, y = conv)) +
  geom_point(color = "black", size = 2, alpha = 0.7) +
  geom_line(data = curvas %>% filter(modelo != best_model),
    aes(y = y, color = modelo), linetype = "dashed", linewidth = 0.9) +
  geom_line(data = curvas %>% filter(modelo == best_model),
    aes(y = y, color = modelo), linewidth = 1.2) +
  scale_color_manual(values = c("Exponencial" = "#0072B2",
    "Potencial" = "#009E73",
    "Cúbico" = "#D55E00")) +
  labs(title = "Conversión de PET vs. Tiempo: comparación de modelos",
    x = "Tiempo (min)", y = "Conversión (%)", color = "Modelo") +
  scale_y_continuous(limits = c(0, 8.5)) +
  theme_minimal()

```

```

# --- Modelo exponencial para conversión ---
modelo_conv <- nls(

```

```

conv ~ Cmax * (1 - exp(-k * tiempo_min)),
data = df, # usa tu df con las 15 observaciones de conversión
start = list(Cmax = max(df$conv, na.rm = TRUE), k = 0.01)
)

# Predicciones para la curva ajustada
tiempos_pred <- seq(
  min(df$tiempo_min, na.rm = TRUE),
  max(df$tiempo_min, na.rm = TRUE),
  length.out = 100
)

pred_curve_conv <- data.frame(
  tiempo_min = tiempos_pred,
  conv_pred = predict(modelo_conv, newdata = data.frame(tiempo_min = tiempos_pred))
)

# Cálculo de promedios y desviación estándar por tiempo
resumen_conv <- df %>%
  group_by(tiempo_min) %>%
  summarise(
    promedio = mean(conv, na.rm = TRUE),
    desv_est = sd(conv, na.rm = TRUE),
    .groups = "drop"
  )

# Gráfico conversión con regresión exponencial
ggplot(resumen_conv, aes(x = tiempo_min, y = promedio)) +
  # (a) Puntos reales individuales
  geom_point(data = df,
    aes(x = tiempo_min, y = conv),
    color = "black", size = 2, alpha = 0.6, inherit.aes = FALSE) +
  # (b) Puntos promedio
  geom_point(size = 3, color = "#046C9A") +
  # (d) Barras de error ( $\pm 1$  SD)
  geom_errorbar(aes(ymin = promedio - desv_est, ymax = promedio + desv_est),
    width = 10) +
  # (e) Curva exponencial ajustada
  geom_line(data = pred_curve_conv,
    aes(x = tiempo_min, y = conv_pred),
    color = "#A42820", linewidth = 1) +
  labs(title = "Conversión de PET vs. Tiempo (con ajuste exponencial)",
    x = "Tiempo (min)",
    y = "Conversión (%)") +
  scale_y_continuous(limits = c(0, 8)) +
  theme_minimal() +
  theme(

```

```

    plot.title = element_text(hjust = 0.5) # centra el título
  )

tasa_real <- df %>%
  arrange(tiempo_min) %>%
  group_by(tiempo_min) %>%
  summarise(conv = mean(conv), .groups = "drop") %>% # promedio por tiempo (por si
hay triplicados)
  mutate(
    tasa = c(NA, diff(conv) / diff(tiempo_min)) #  $\Delta y / \Delta x$  = cambio en conv / cambio en
tiempo
  )

# Gráfico de la tasa de cambio de la conversión
ggplot(tasa_real, aes(x = tiempo_min, y = tasa)) +
  geom_point(size = 3) +
  geom_line(group = 1) +
  labs(title = "Tasa de cambio real de conversión de PET",
    x = "Tiempo (min)",
    y = "Tasa de cambio (%/min)") +
  scale_y_continuous(limits = c(0, 0.05)) +
  theme_minimal() +
  theme(
    plot.title = element_text(hjust = 0.5)
  )

```

I. Evidencia fotográfica

Figura 26. PET previo para triturar



Nota. Aquí se observa el PET antes de que se fuera a reducir su tamaño por la licuadora casera. (Elaboración propia).

Figura 27. PET luego de la tritución



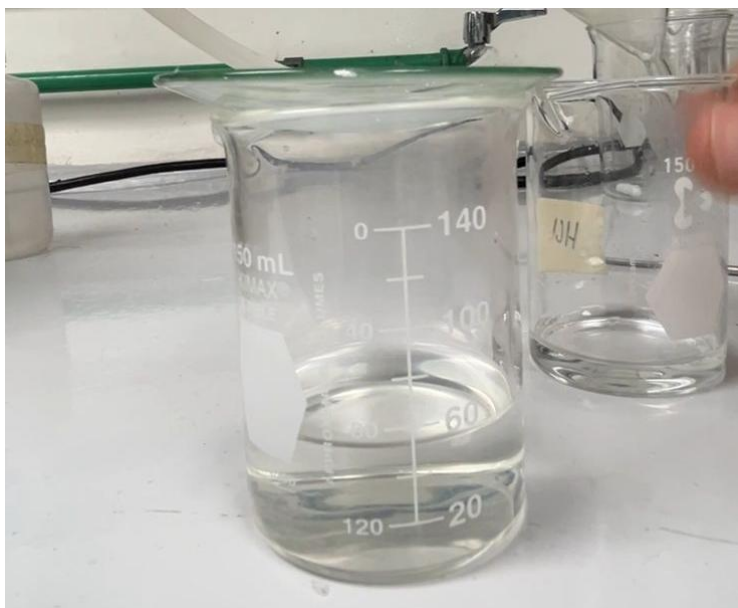
Nota. Aquí se observa el PET luego de ser licuado; de este se llevó a cabo el análisis granulométrico. (Elaboración propia).

Figura 28. Sistema empleado para llevar a cabo al reacción a tiempos prolongados



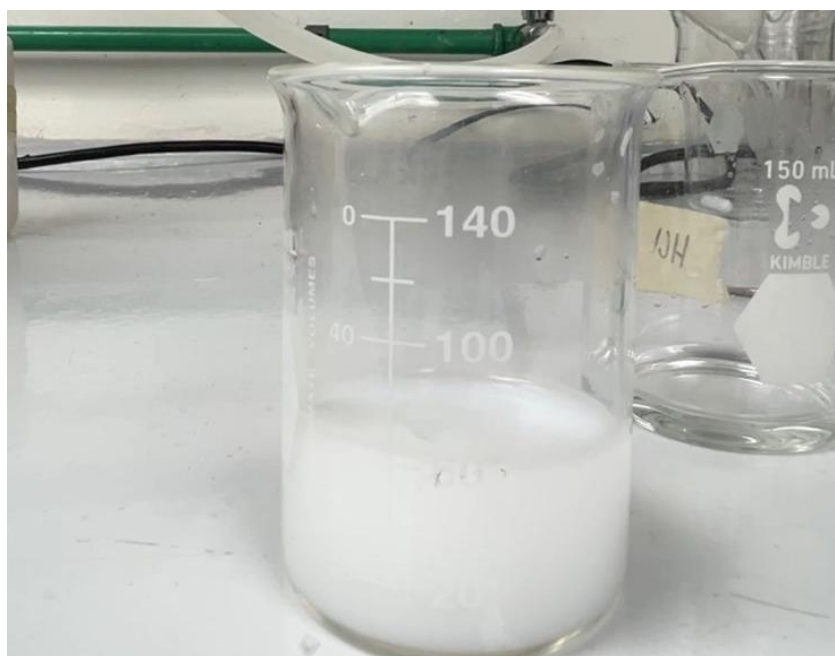
Nota. Para las reacciones prolongadas (2, 3 y 4 horas) el baño maría con agua resultaba en la evaporación de esta, por lo que se implementó un recubrimiento con papel aluminio para evitar esto. (Elaboración propia).

Figura 29. Fase líquida después de la hidrólisis alcalina de PET



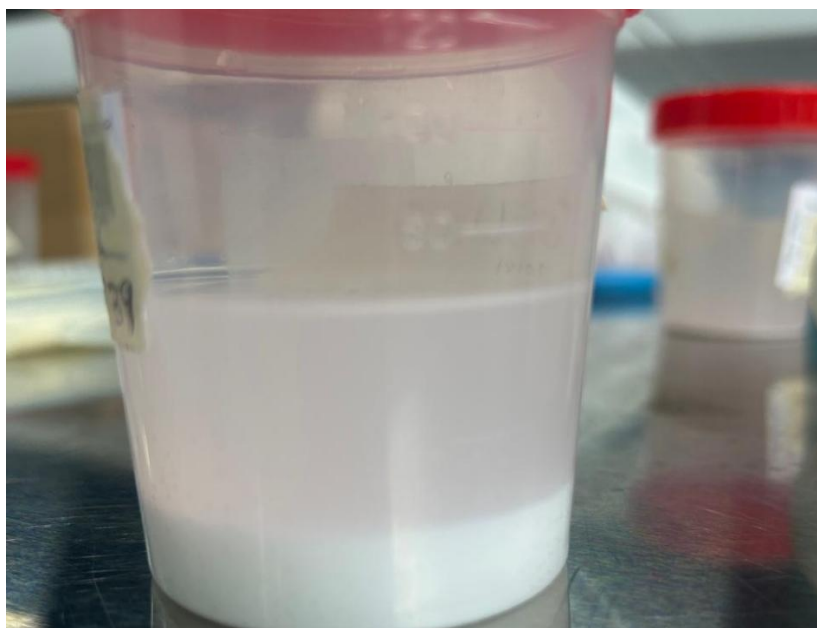
Nota. En la imagen se observa la fase líquida después de la reacción, previo a añadir HCl para llevarlo a pH 2 y precipitar el TPA resultante. (Elaboración propia).

Figura 30. TPA precipitado después de la hidrólisis alcalina de PET



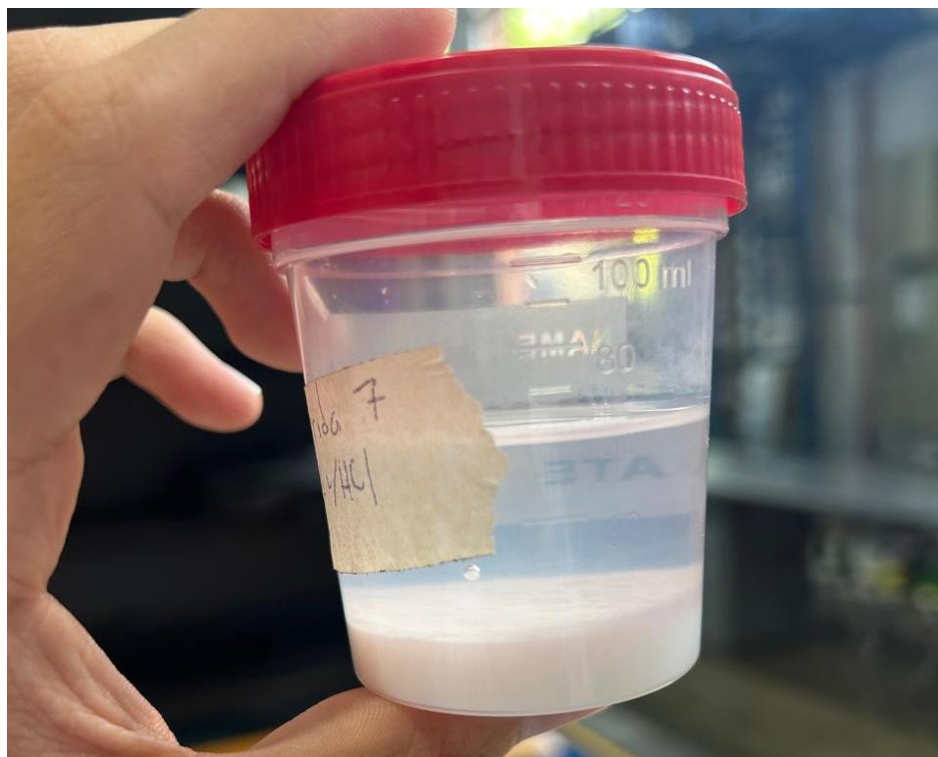
Nota. En la imagen se observa la fase líquida después de la reacción, luego de añadir HCl para llevarlo a pH 2; se observa los sólidos suspendidos blancos que es el TPA. (Elaboración propia).

Figura 31. Resultado de la reacción de la hidrólisis alcalina de PET sin sedimentar



Nota. Se observa un caso después de la precipitación del TPA donde no sedimentaba por completo, por lo que se ve turbidez en la fase líquida. (Elaboración propia).

Figura 32. Resultado de la reacción de la hidrólisis alcalina de PET sedimentada



Nota. Se observa un caso después de la precipitación del TPA donde se lograba la sedimentación por completo, por lo que la fase líquida se ve transparente. (Elaboración propia).

Figura 33. Preparación de prueba a centrifugar en tubo Eppendorf



Nota. Se observa uno de los tubos Eppendorf utilizados para llevar a cabo la centrifugación antes de que se llevara a cabo. Se utilizaron, en promedio, 6 de estos para centrifugar cada muestra. (Elaboración propia).

Figura 34. Resultado de la centrifugación del TPA para remover la fase líquida ácida



Nota. Se observa la separación llevada a cabo entre la fase líquida ácida y el TPA sólido, después de centrifugar a 3300 rpm por 15 minutos. Después de esto, se removería el sobrenadante con una pipeta Pasteur, se lavaría el tubo con agua y se colocaría la mezcla en un recipiente para secar. (Elaboración propia).

Figura 35. Secado de muestras de TPA y PET sólido sin reaccionar



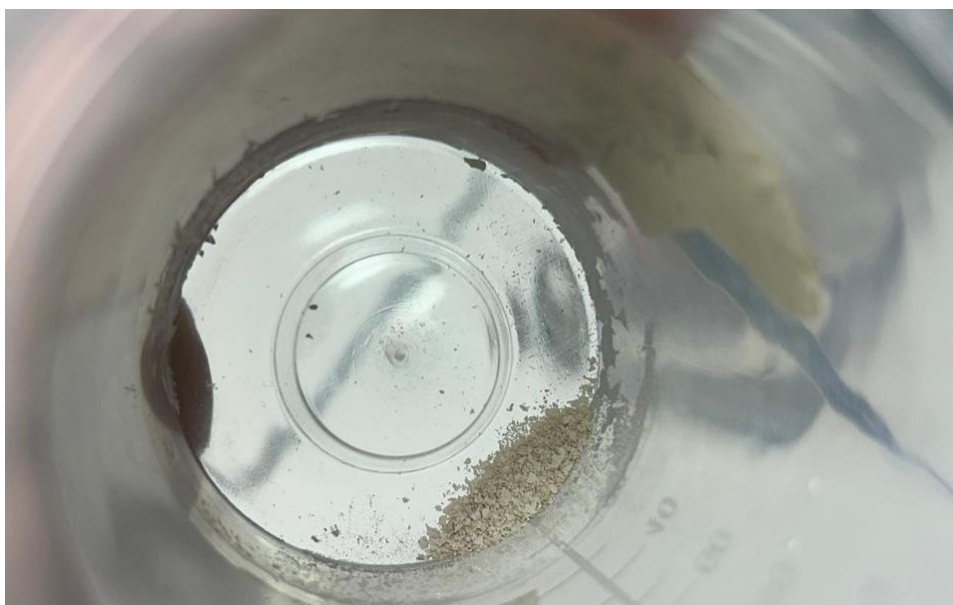
Nota. Se observa la parte de adentro del secador utilizado para secar las muestras de TPA obtenidas y mezcladas con agua, así como el PET resultante de la reacción que no reaccionó. (Elaboración propia).

Figura 36. TPA obtenido luego del secado



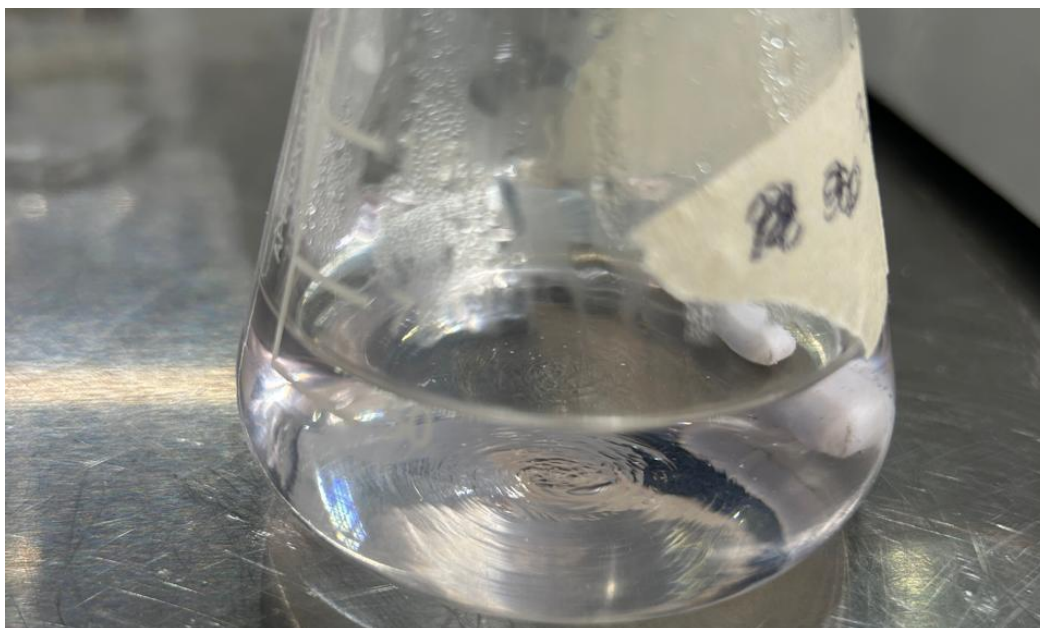
Nota. Aquí se observa el TPA seco después de pasar 48 horas en el secador. (Elaboración propia).

Figura 37. TPA seco triturado para la titulación



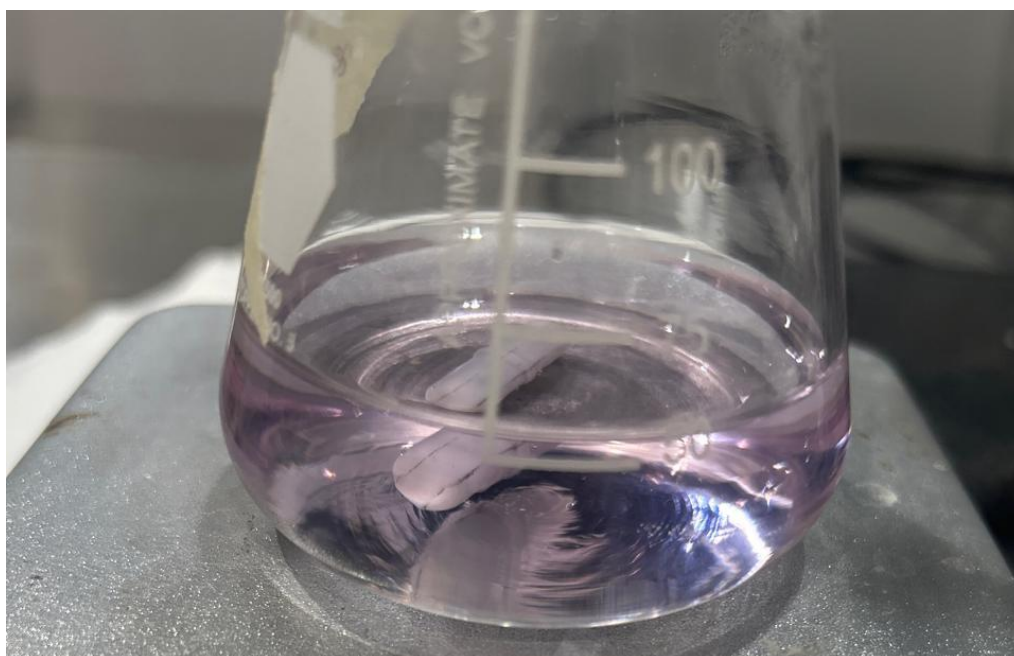
Nota. El TPA obtenido del secador, previo a ingresar al Erlenmeyer para su titulación, se machacó con la espátula analítica usada para reducir su tamaño y facilitar su manipulación y dilución. (Elaboración propia).

Figura 38. Titulación del TPA previo a llegar al punto de viraje



Nota. TPA siendo titulado en agua previo a llegar al punto de viraje. Se observa el agitador magnético usado. (Elaboración propia).

Figura 39. Titulación del TPA pasado el punto de viraje



Nota. TPA en agua al terminar la titulación, pues la coloración rosada indica que se llegó al punto de viraje. (Elaboración propia).

XIII. Glosario

Ácido tereftálico (TPA): compuesto aromático dicarboxílico ($C_6H_4(COOH)_2$), principal monómero en la fabricación de poliésteres como el PET.

ANOVA (Análisis de Varianza): prueba estadística que compara medias entre dos o más grupos evaluando si la variación observada entre tratamientos es mayor que la variación debida al error experimental. Permite identificar efectos principales e interacciones de factores en diseños experimentales.

Balance de energía: herramienta de ingeniería que cuantifica la energía que entra, sale o se transforma en un sistema. Incluye calor, trabajo, y en algunos casos términos de energía cinética y potencial.

Balance de masa: principio de conservación que indica que la masa total que entra a un sistema debe ser igual a la que sale más la acumulada.

BHET (Tereftalato de bis(2-hidroxietilo)): intermediario en la síntesis de PET, obtenido por esterificación del ácido tereftálico con etilenglicol.

Cristalinidad: grado de orden estructural en un polímero, relacionado con sus propiedades mecánicas, térmicas y ópticas.

Desviación estándar (s): medida estadística que expresa la dispersión de un conjunto de datos respecto a su promedio.

Etilenglicol (EG): alcohol bivalente ($HO-CH_2-CH_2-OH$), utilizado en la síntesis de PET y otros polímeros.

FTIR (Espectroscopía Infrarroja con Transformada de Fourier): técnica de caracterización que permite identificar grupos funcionales en un compuesto mediante la absorción de radiación infrarroja.

Grado de polimerización: número promedio de unidades repetitivas en una cadena polimérica.

Hidrólisis alcalina: reacción de depolimerización del PET en medio básico, que produce tereftalato disódico y etilenglicol.

Peso molecular promedio: cociente entre la masa total de todas las moléculas y el número de moléculas presentes en una muestra de polímero.

PET (Tereftalato de polietileno): poliéster termoplástico producido por policondensación de ácido tereftálico y etilenglicol, ampliamente usado en envases, fibras y películas.

Policondensación: mecanismo de polimerización por etapas en el que monómeros reaccionan formando enlaces con liberación de pequeñas moléculas (como H_2O); el grado de polimerización crece gradualmente según la conversión y la estequiometría.

Polímero: macromolécula constituida por la repetición de muchas unidades estructurales (monómeros) enlazadas covalentemente; sus propiedades dependen de la composición química, arquitectura (lineal, ramificada, reticulada), peso molecular y cristalinidad. Los polímeros pueden formarse por adición (en cadena) o por policondensación (por etapas).

Pureza del TPA: relación entre la masa de TPA obtenido y la masa total de muestra analizada, que permite evaluar la calidad del producto.

Q-Test (Prueba Q de Dixon): método estadístico para identificar y descartar valores atípicos en un conjunto pequeño de datos.

Razón beneficio/costo (B/C): indicador económico que se obtiene dividiendo los beneficios de un proceso sobre sus costos; valores >1 indican viabilidad.

Saponificación: reacción de un éster con una base fuerte que conduce a la formación de una sal carboxilato y un alcohol.

Transesterificación: reacción en la que un éster reacciona con un alcohol para producir un nuevo éster y alcohol.