

**INVESTIGACIÓN
EN MARCHA. Evaluación de la actividad
investigadora.
TESIS DOCTORAL
CURSO 2025-26**

**DOCTORADO EN
MEDIO AMBIENTE Y SOSTENIBILIDAD**

UNIVERSIDAD MIGUEL HERNÁNDEZ DE ELCHE



**PROGRAMA DE DOCTORADO EN
MEDIO AMBIENTE Y SOSTENIBILIDAD**



Título provisional: Evaluación de instrumentación, desde “bajo-coste” hasta avanzada, para el estudio de procesos orientados a la comprensión de los problemas de Calidad del Aire y Contaminación Atmosférica en ambientes interiores y exteriores

Doctorando: Mila Ródenas García

Directora o director (es): Eduardo Yubero y Amalia Muñoz

Tutora o tutor: Nuria Galindo





Evaluación de técnicas
experimentales para la
determinación de contaminantes
con impacto en la Contaminación
Atmosférica y en la Calidad del Aire
(AQ), tanto en ambientes interiores
como exteriores.

Se plantean dos subtemas a desarrollar →

Objetivo del trabajo

Medidas de compuestos orgánicos volátiles (COVs) y composición de aerosoles usando instrumentación avanzada y sensores (LCS) para medidas de AQ.

Evaluar la calidad de los datos de distintos instrumentos y técnicas para la medida de COVs (y OVOCs: oxigenados).

Avanzar en la extracción de información obtenida a partir de instrumentación puntera (e.j. PTR-ToF-MS y CIMS)

Determinar linealidad y cuantificar interferencias con otros gases y en distintas condiciones ambientales.

Discutir la idoneidad e implicaciones del uso de las distintas técnicas en la determinación de COVs, en modelos químicos y en la evaluación de la calidad del aire.

Discutir las características de las técnicas en base a su tecnología y al propósito para el que son usadas.

Recomendaciones de uso

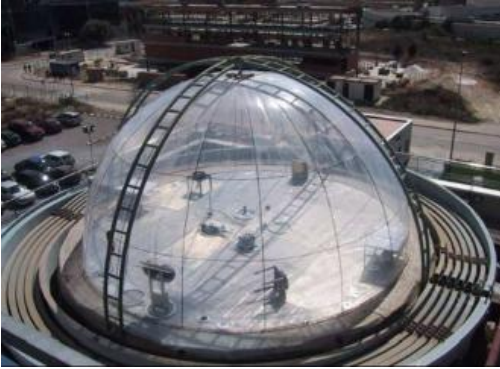
Evaluación de contaminantes ambientales procedentes de actividades antropogénicas

Identificación de emisiones procedentes de la quema de biomasa (BB) dependiendo de la fase de combustión y tipo de madera.

Estudio de la transformación de las emisiones en condiciones diurnas y nocturnas: fase gas y particulada y propiedades ópticas.

Discusión de implicaciones en la calidad del aire, la salud y el cambio climático.

Metodología: Recursos



Uso de las cámaras de simulación atmosférica EUPHORE y de instrumentación avanzada para la medida de contaminantes en fase gas y particulada.

Líneas experimentales:

- Sensores de bajo coste: evaluación de linealidad, respuesta dinámica, interferencias, etc.
- Medida de COVOs: comparación de sistemas on-line y off-line, incluyendo instrumentación estándar y avanzada.
- Quema de biomasa: caracterización química (fase gas/partícula) y óptica de emisiones y sus transformaciones. Condiciones: maderas, fase de combustión, envejecimiento diurno/nocturno.

Análisis de datos

- Tratamiento estadístico con Matlab. Métodos clásicos y avanzados, incluyendo análisis de clústeres, PCA, etc. Cálculo de factores de emisión.
- Relación composición química con propiedades ópticas.
- Revisión bibliográfica relacionada con los temas tratados.



Estado actual. Sensores de bajo coste

- ✓ **Campaña experimental** de intercomparación de LCS de CO₂ comerciales en EUPHORE realizada.

Condiciones: 400-3500 ppm CO₂ y 0-80% HR

38 LCS de CO₂ testados frente a referencia

Análisis sobre:

Linealidad y repetibilidad entre sensores

Dependencia de la HR

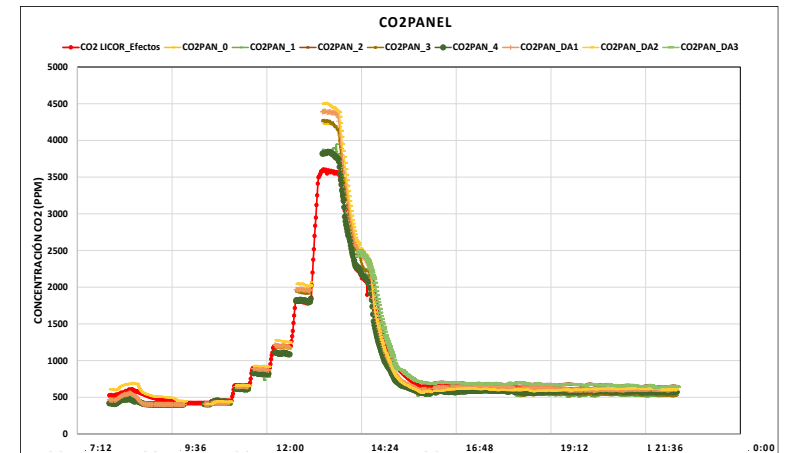
Posibles interferencias de otros gases

- ✓ **Avance:** resultados integrados como capítulo de tesis. Hay un artículo casi finalizado pero a discutir si es factible su envío porque son sensores muy estables y el interés después del periodo COVID es mucho menor.



- ✓ **Otros:**

- Medidas con sensores de PM_{2.5} en quemas de paja de arroz
- Miembro grupos de trabajo (WG) en COST Action Net4CleanAir (limpiadores aire en interior). Actividad en este periodo dentro de WG1 (literatura) y WG2 (soluciones para eliminar partículas)



Estado actual. Evaluación de instrumentación: COVOs

- ✓ **Campaña experimental** internacional de intercomparación de instrumentos en EUPHORE realizada: Simulación condiciones urbanas y semiurbanas:

Mezcla sintética de carbonilos

Productos de fotooxidaciones de COVOs biogénicos y antropogénicos

Productos de ozonólisis de COVOs biogénicos

13 COVOs testeados, 7 instrumentos on-line y cartuchos para análisis off-line

Estudio de interferencias a distintas humedades relativas y en presencia de NOx y carbonilos de cadena corta

- ✓ **Avance:** Análisis finalizado, integrado como capítulo de tesis, finalizando borrador de artículo

OTROS

- ✓ Artículo: Atmospheric Simulation Chambers in the ACTRIS Research Infrastructure. Fuchs et al., 2026. Atm. Meas. Tech. 10.5194/amt-19-4165-2026
- ✓ Artículo: Toluene photo-oxidation and secondary organic aerosol formation: EUROCHAMP-2020 multi-chamber experiments. Urici et al., 2025. J. Atm. Chemistry, 10.1007/s10874-025-09485-2
- ✓ Artículo: Pesticide human exposure reduction optimizing spray application technologies: ζ -cyhalothrin measurements in bio- and artificial-samples. Ferragud et al., 2025, Env. Tech & Innovation, 10.1016/j.eti.2025.104407
- ✓ Reuniones y redacción propuestas proyectos de ACTRIS: ATMO-SERV y ACTRIS-NEXT (HORIZON-INFRA) sobre SERVICIOS Y AVANCES EN INVESTIGACIÓN EN QUÍMICA ATMOSFÉRICA Y DINÁMICA. Concedidos en 2026
- ✓ Asistencia a workshops regulares organizados por los grupos Ci-Gas (gases) y CAIS-ECAC (aerosoles) de ACTRIS sobre prácticas de QA/QC, instrumentación, etc
- ✓ Curso: Calidad del aire en España: Nuevos retos asociados a la implementación de la Directiva (UE) 2024/2881. UJI. Online, Junio 2026.
- ✓ Curso: Retos y herramientas avanzadas para la predicción, monitorización y gestión de la calidad del aire. SENTIATECH. Online, Mayo 2026.

✓ **Campaña** realizada con la siguiente estrategia experimental:

Maderas y diesel

Fases de combustión

Oxidación día - noche

✓ **Artículo:**

Chemical and optical properties of biomass burning emissions and their atmospheric aging: A comprehensive chamber study. Ródenas et al., 2025.

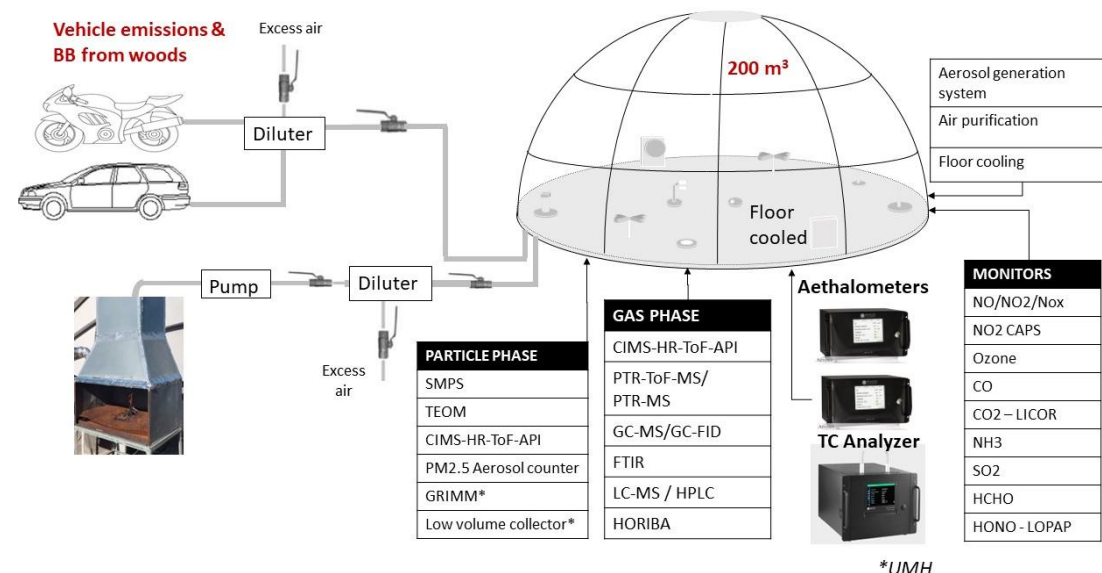
Atm. Environment, <https://doi.org/10.1016/j.atmosenv.2025.121592>

Estudio **propiedades ópticas y composición química de aerosoles.**

✓ **Avance:** Análisis de la fase gaseosa y evaluación de resultados. Integrado como capítulo de tesis.

✓ **Congresos y otros sobre quema de biomasa:**

- EAC, Sept 2025, Lecce (Italia): Un oral y un poster como primera autora. Coautora en 2 orales y un póster
- ACTRIS España (Abril 2026, Granada): Autora póster.
- ACTRIS Science Conference (Abril 2026, Oslo). Oral ponencia y coautora en 3 posters y un oral.
- RICTA (Julio 2026, Valladolid): Coautora en oral (no asisto)
- PM2026 (Particolato Atmosferico, Mayo, Italia) Coautora en poster y oral (no asisto)
- Artículo: Mechanism Development and Evaluation of the Gas-Phase Photooxidation of Guaiacol: Insights from a Chamber Study. Evans et al., 2025. ACS ES&T Air



Continuación Estado actual. Quema de biomasa

- ✓ **Campaña-1** (ENEA-Italia, 2024) con estufas: maderas y pellet. Propiedades químicas
Análisis de datos avanzada. *Artículo en proceso.*
- ✓ **Campaña-2** (UNG-Eslovenia, 2026) con estufa y diesel. Propiedades ópticas
Análisis de datos en proceso.

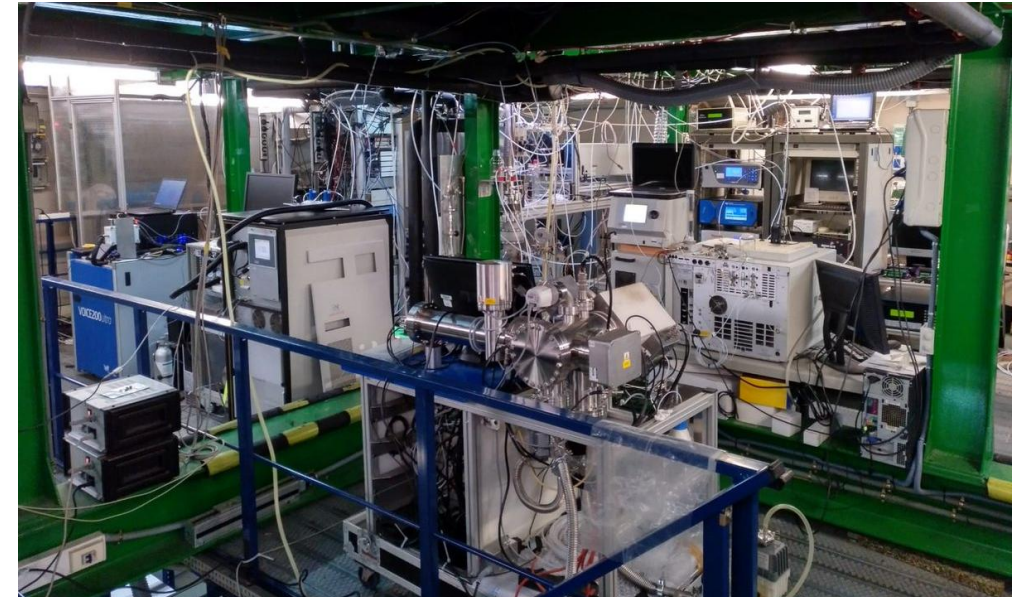
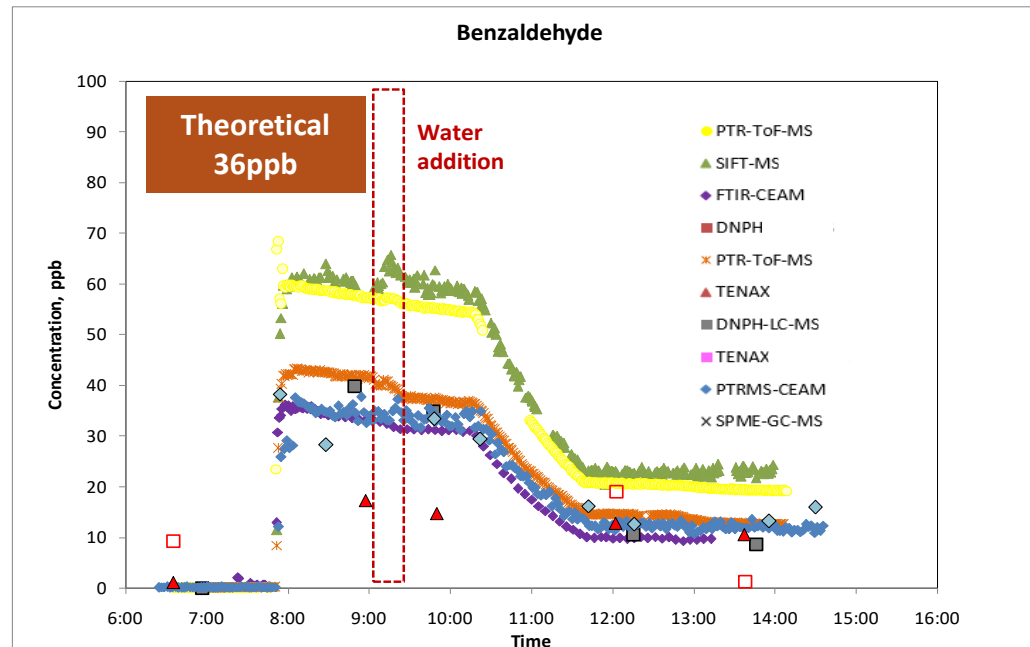


Congresos y otros:

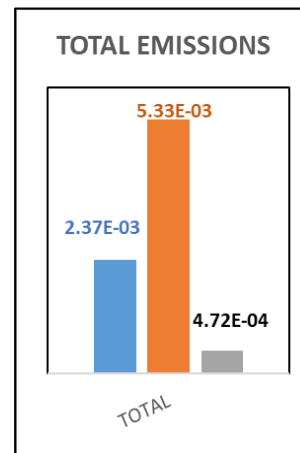
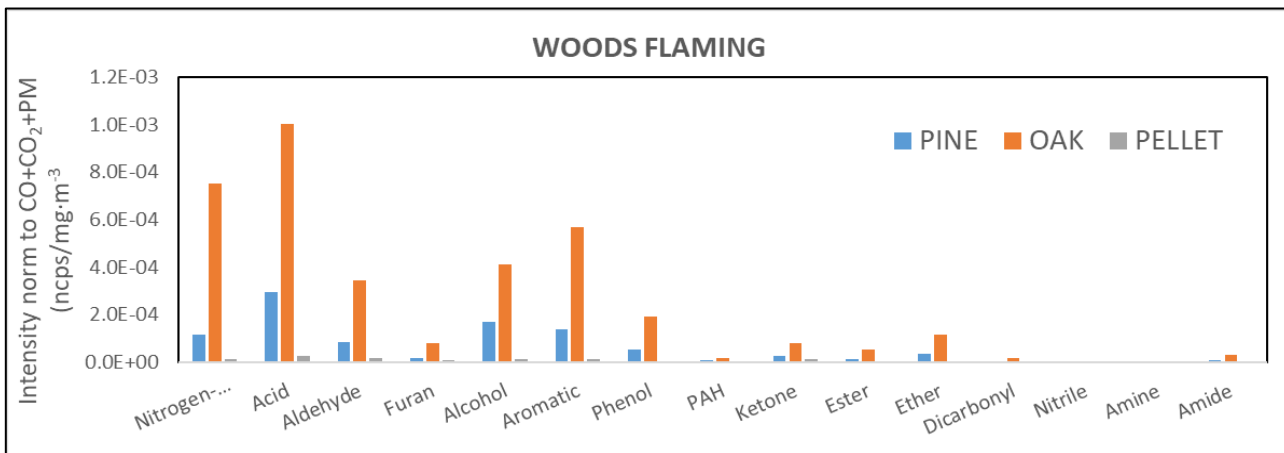
- **Proyecto ATMOBE.** Parte equipo investigador (Understanding the atmospheric chemistry of BB emissions). MICIN PID2022-142366OB-I00.2023-26.
- EAC, Sept 2025, Lecce (Italia): Una ponencia oral como primera autora.
- Proyectos ACTRIS, ATMO-ACCESS, Net4CleanAir: informes, asistencia a reuniones, asistencia a webinars
- Artículo: Atmospheric Simulation Chambers in the ACTRIS Research Infrastructure. Fuchs et al., 2026. *Atm. Meas. Tech.* 10.5194/amt-19-4165-2026
- Miembro equipo investigación proyecto IRISCC (HE). Realización de campaña experimental con UNG sobre propiedades ópticas aerosoles en quema de biomasa.
- ACTRIS WEEK (comunidad científica de ACTRIS: Infraestructura Europea de Investigación de Aerosoles, Nubes y Gases Traza). Online, Oct. 2026.

Resultados: Intercomparación COVOs

- Las cámaras EUPHORE permitieron intercomparar técnicas on-line y off-line en condiciones ambientales controladas.
- Los instrumentos PTR-ToF-MS mostraron buena concordancia en las tendencias temporales. PTR-MS y FTIR presentaron peor ajuste en mezclas complejas, especialmente en ozonólisis.
- La RH afectó de forma dependiente del compuesto y del instrumento → necesidad de calibraciones en condiciones RH representativas.
- Las técnicas off-line funcionaron bien en inyecciones directas, pero empeoraron en mezclas complejas, destacando la importancia de la calibración específica, el control del almacenamiento y la selección de la técnica según el compuesto.
- → **Uso PTR-ToF-MS en experimentos de BB. Énfasis en calibración.**

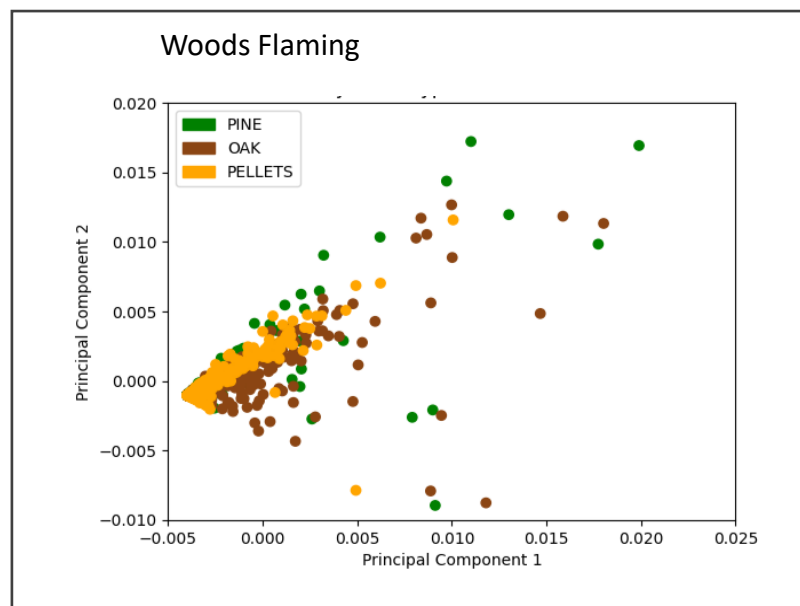
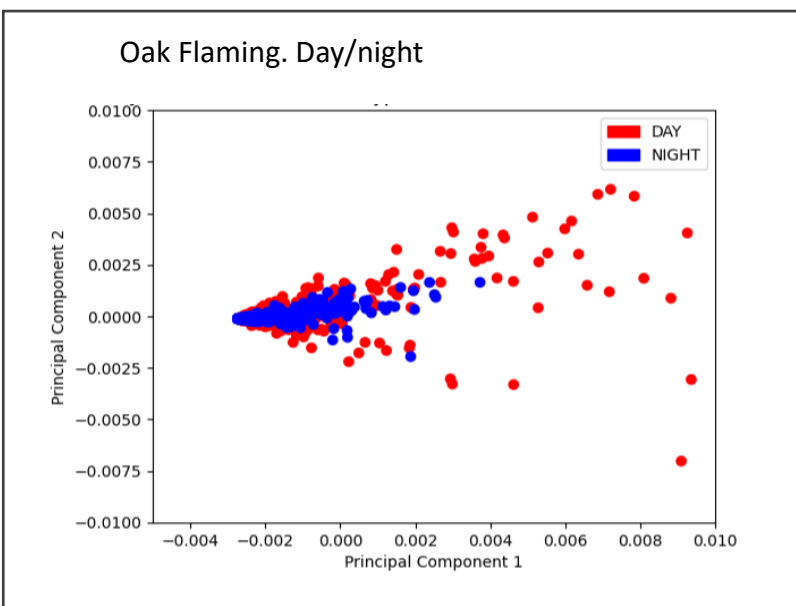


Estudio de la composición química de los aerosoles según la oxidación de las emisiones y tipo de madera



Análisis composición aerosoles:

- Distintos contaminantes dependiendo de la madera quemada
- Eficiencia combustión:
Pellet ~ flaming (>0.95) > smoldering
EFs: >> roble ; << pellet

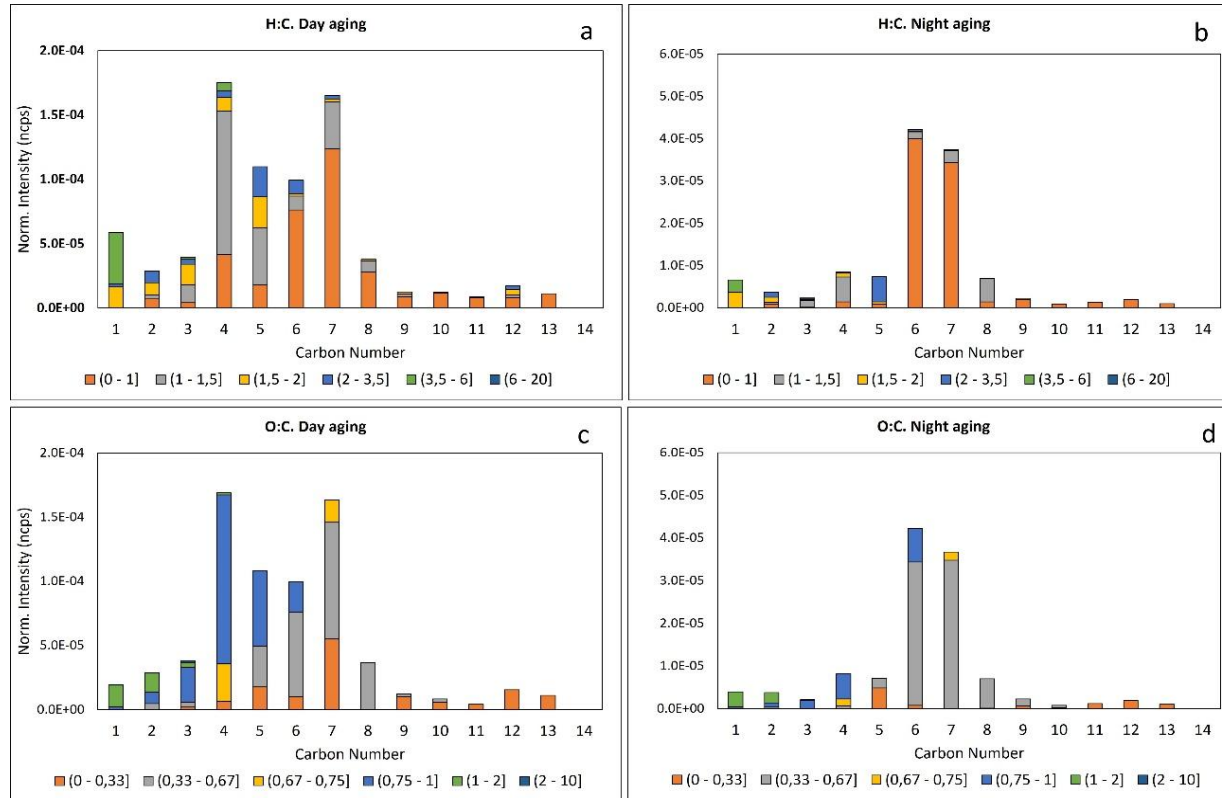


Análisis PCA:

- Mayor variabilidad en la composición de aerosoles envejecidos en condiciones diurnas
- Diferencia en emisiones de distintas maderas
- Mayor espectro de contaminantes durante la fotooxidación

Resultados. Quema de biomasa

Estudio de la composición química de los aerosoles según la oxidación de las emisiones



Oxidación diurna

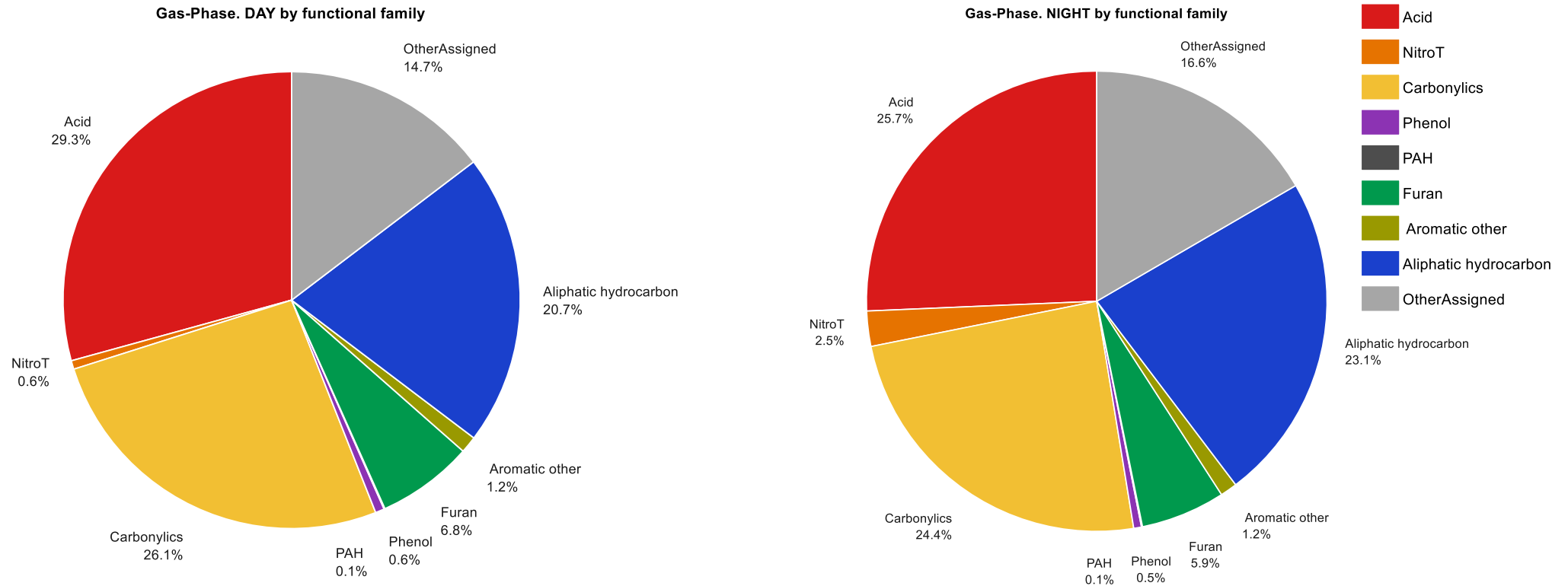
- Mayores O:C & H:C ratios → compuestos más oxidados y funcionalizados.
- Rango más amplio de Carbonos → mayor fragmentación y química más compleja.
- Compuestos diversos, dominados por orgánicos oxigenados (alcoholes, ácidos, aldehídos, cetonas, etc.).

Oxidación nocturna

- Ratios O:C y H:C más bajos → menor oxidación y transformación limitada.
- Rango más estrecho de número de carbonos.
- Formación notable de compuestos nitro, incluyendo nitroaromáticos.

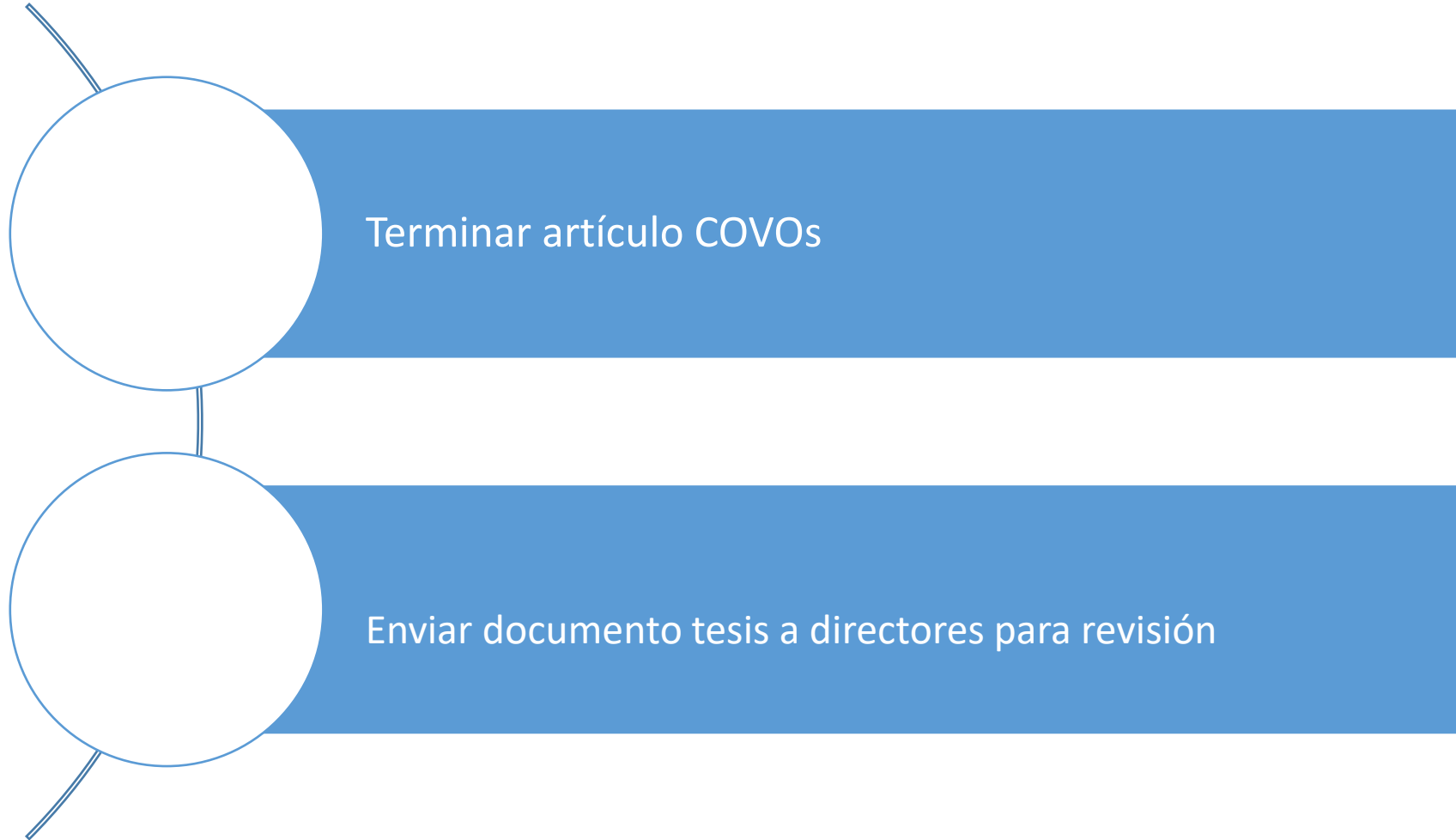
Resultados. Quema de biomasa

Fase gas (PTR-ToF-MS): oxidación en condiciones diurnas y nocturnas



- La fase gas está dominada por COVOs (comp. carbonílicos: propanal/acetaldehído/acetona, ácidos) e hidrocarburos alifáticos.
- En condiciones diurnas predominan más los productos oxigenados, especialmente aldehídos y ácidos.
- En condiciones nocturnas aumenta la contribución de hidrocarburos alifáticos y compuestos menos oxidados.
- Mayor % de NitroT en condiciones nocturnas
- → Cambios en las rutas de oxidación de las emisiones de quema de biomasa.

Trabajo pendiente



GRACIAS!!