

# Modelización teórica de disolventes eutécticos para el diseño de procesos de separación sostenibles

## Objetivo del proyecto

*Se basa en el estudio combinado teórico-experimental de una gran variedad de disolventes eutécticos de bajo punto de fusión (deep eutectic solvents) para el diseño de procesos de separación sostenibles, fundamentalmente, captura de CO<sub>2</sub>. En el proyecto se considera un conjunto de estructuras iniciales que se someten a un modelado a nivel molecular (estudios DFT y MD) utilizando un enfoque 'in silico', utilizando recursos computacionales, y posteriormente, las combinaciones más adecuadas se sintetizan y caracterizan en el laboratorio junto con un amplio estudio de la capacidad de dichos disolventes para capturar CO<sub>2</sub>.*

## Participantes del proyecto

Universidad de Burgos, [www.ubu.es](http://www.ubu.es)

SCAYLE, Supercomputación Castilla y León, [www.scayle.es](http://www.scayle.es)

## Periodo de ejecución

Junio del año **2018** a septiembre del **2020**.

## Financiación del proyecto

Subvenciones destinadas al apoyo de los Grupos de Investigación Reconocidos de las Universidades públicas de Castilla y León. Junta de Castilla y León.

## Funciones de SCAYLE

El acceso a las infraestructuras de SCAYLE dota de los recursos computacionales necesarios para poder realizar los cálculos DFT y MD.

## Justificación del proyecto

En el proyecto se propone buscar nuevos sistemas formados por disolventes eutécticos de bajo punto de fusión para el diseño de procesos de separación sostenibles, fundamentalmente, de captura de CO<sub>2</sub>. Se lleva a cabo un diseño y caracterización de las estructuras moleculares más adecuadas desde un punto de vista microscópico, para posteriormente implementar estos sistemas a una escala más

grande y realizar el análisis de sus propiedades macroscópicas. Estos disolventes pueden encontrar aplicaciones en varias ramas de la industria, no solamente en la captura de CO<sub>2</sub>, sino también, por ejemplo, como vehículos adecuados para la administración de fármacos en la industria farmacéutica, para mejorar la solubilidad de compuestos poco solubles en agua, etc.

## Líder del proyecto

**UNIVERSIDAD DE BIRGOS.** El grupo de investigación está formado por los profesores Santiago Aparicio (IP) y Rafael Alcalde, junto con los estudiantes de doctorado Alberto Gutiérrez, Sara Rozas y Nuria Aguilar. El grupo lidera la parte computacional del proyecto y se ocupa de buscar disolventes eutécticos para el diseño de procesos de separación sostenibles y estudiar sus propiedades termodinámicas, a través de cálculos mecanocuánticos, y de analizar sus propiedades dinámicas a través de simulaciones MD, MC, KMC.