

NADESforNATURE, Design and Validation of Natural Deep Eutectic Solvents as a safety and sustainable alternative to classical solvent for extraction of target vegetable molecules and reformulation of natural bioactive products

Objetivo del proyecto

El objetivo del proyecto NADESforNATURE es el desarrollo de disolventes eutécticos profundos a partir de productos naturales (NAatural Deep Eutectic Solvents) destinados a la extracción de múltiples biocompuestos de interés de fuentes vegetales, empleando técnicas computacionales y experimentales para su diseño, testeo y ajuste, y el apoyo de una PyME externa (Soria Natural S.A) a nivel de suministros y orientación en el campo. Por un lado, se busca el diseño de mezclas eutécticas capaces de extraer biocompuestos de especial interés en nutrición, medicina y farmacología; por otro, se busca conocer la idoneidad de los propios compuestos naturales como componentes de los NADES, a fin de aumentar su aprovechamiento y carácter renovable. Diversas técnicas computacionales permitirán probar numerosas combinaciones de potenciales compuestos, tanto en el rol de componente del DES como en el de especie a extraer; los esfuerzos experimentales se enfocarán en la preparación y caracterización de los DES más prometedores, comprobando no sólo su carácter extractivo sino también su impacto medioambiental y riesgos toxicológicos, así como su potencial escalado a un nivel más industrial.

Participantes del proyecto

Universidad de Burgos, www.ubu.es

Soria Natural S. A. www.sorianatural.es

SCAYLE, Supercomputación Castilla y León (España), www.scayle.es

Ejecución: 2023 a 2027.

Financiación del proyecto

Convocatoria de financiación que respalda el proyecto: Convocatoria 2009/00005/002/131 CONVOCATORIA PARA LA CONTRATACIÓN DE PERSONAL INVESTIGADOR POSTDOCTORAL ADSCRITO AL PROYECTO "Design and Validation of Natural Deep Eutectic Solvents as a safety and sustainable alternative to classical solvent for extraction of target vegetable molecules and

reformulation of natural bioactive products (NADESforNATURE)".

Funciones de SCAYLE

Modelización y predicción de propiedades de NADES, fundamentalmente con métodos de elevada demanda computacional como dinámica molecular o modelizado cuántico a gran escala.



NADES
Referencia BU047P23

Justificación del proyecto

La extracción de biomoléculas orgánicas de fuentes vegetales ha proporcionado a la industria alimentaria y farmacéutica de numerosas materias primas. Sin embargo, en numerosas ocasiones esta extracción hace uso de disolventes volátiles que presentan potenciales riesgos toxicológicos tanto para el ser humano como para el medio ambiente, así como suponer una importante fuente de gasto. Los NADES han aparecido recientemente como una alternativa carente de estos problemas, dada su baja volatilidad y su naturaleza renovable al proceder de fuentes naturales. Mediante el proyecto NADESforNATURE se busca establecer una metodología de diseño de NADES orientados a la extracción de biocompuestos de diversa naturaleza, evaluando por igual su eficiencia, toxicidad y seguridad medioambiental, usando en primera instancia múltiples técnicas computacionales para predecir numerosos candidatos. Los más prometedores se someterán a un análisis experimental a fin de comprobar su aplicabilidad y seguridad. La empresa Soria Natural S.A. como entidad externa colaboradora proporcionará apoyo orientativo dada su relevancia en tal mercado, así como muestras vegetales de diversa índole para los estudios experimentales.

Líder del proyecto

UBU-ICCRAM: ICCRAM (International Research Center in Critical Raw Materials for Advanced Industrial Technologies) es un centro de investigación de la Universidad de Burgos fundado en 2014 para el estudio de las materias primas críticas. La investigación científica se organiza en tres grupos de investigación y cinco líneas principales: grupo de Medio Ambiente, Sostenibilidad y Toxicología; grupo Modelado y Diseño de Materiales y grupo de Procesos Electroquímicos y Almacenamiento de Energía.

ICCRAM es miembro de numerosos proyectos europeos financiados bajo diferentes programas marco para la Investigación e Innovación como H2020 u Horizonte Europa. ICCRAM es, así mismo, líder en organizaciones interacionales como PROMETIA, European Innovation Partnership on Raw Materials (EIP-RAW MATERIALS), Nanosafety Clustery y Association of Nanotechnology Industries.

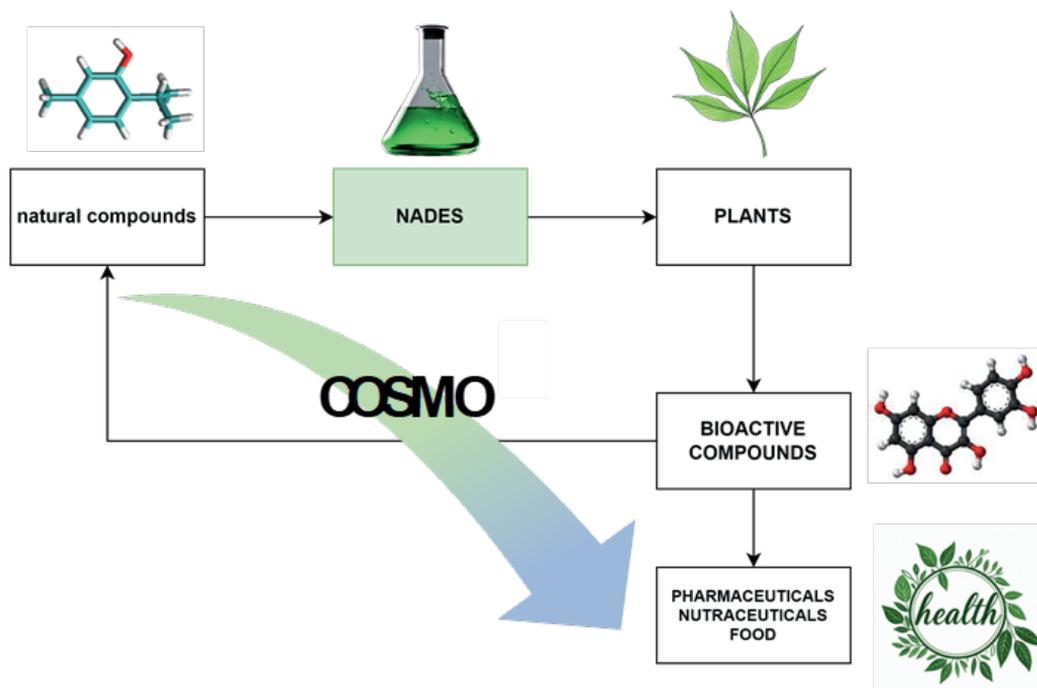


Diagrama esquemático del procedimiento computacional: usando compuestos naturales se diseñan NADES capaces de extraer de fuentes vegetales otros biocompuestos de interés, los cuales pueden ir destinados a la industria o al diseño de nuevos NADES, todo usando COSMO como principal herramienta computacional.