

# NADESforPFAS, Design and Validation of Natural Deep Eutectic Solvents for the removal of per- and polyfluoroalkyl substances from contaminated waters

## Objetivo del proyecto

*El objetivo del proyecto NADESforPFAS es el desarrollo de disolventes eutécticos profundos a partir de productos naturales (Natural Deep Eutectic Solvents) destinados a la extracción de compuestos per- y polifluoroalquilados, comúnmente conocidos como PFAS, del suministro de agua, en el cual actúan como contaminantes persistentes desde los años 40. Por un lado, se pretende desarrollar una nueva tecnología de extracción basada en NADES, una alternativa más sostenible, barata y segura a los disolventes volátiles tradicionales, de carácter renovable dado su origen vegetal, y de gran versatilidad a través del ajuste de componentes y composición. Por otro, se plantea un elevado uso de métodos computacionales in-silico para el diseño y testeo masivo de múltiples componentes naturales y eutécticos, con el fin de probar miles de combinaciones y seleccionar las más aptas en términos de rendimiento, seguridad y sostenibilidad, las cuales serán probadas experimentalmente tanto como disolventes para extracción de varios PFAS de muestras de agua, como su toxicidad a nivel humano y medioambiental, además de su potencial escalado de cara a un uso industrial.*

## Participantes del proyecto

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

Western Michigan University (WMICH), <https://wmich.edu/>

Departamento de química de la Federal Fluminense University (UFF), <https://quimica.uff.br/>

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

**Ejecución:** 2023 a 2026.

## Financiación del proyecto

Convocatoria 2009/00004/002/271: Convocatoria para la selección de personal investigador adscrito al proyecto diseño y validación de disolventes eutécticos naturales para la eliminación de compuestos per- y polyfluoroalkylados en aguas contaminadas.



Referencia PID2022-142405OB-I00

## 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 interancionales como PROMETIA, *European Innovation Partnership on Raw Materials* (EIP-RAW MATERIALS), *Nanosafety Clustery* y *Association of Nanotechnology Industries*.

## Funciones de SCAYLE

Caléndula, aporta en el desarrollo de la investigación la modelización y predicción de propiedades de NADES, fundamentalmente con métodos de elevada demanda computacional como dinámica molecular o modelizado cuántico a gran escala, así como simulaciones del fenómeno de extracción en agua por dinámica molecular.

## Justificación del proyecto

Desde la aparición de los primeros polímeros y plásticos basados en flúor, tan comunes en productos con superficies anti adherentes para el hogar, como en muchos campos de la química dada su gran inercia frente a la corrosión, los contaminantes conocidos como PFAS, derivados de la fabricación y degradación de estos materiales, han plagado la totalidad del suministro de agua desde los años hace casi 80 años. Sus riesgos y potenciales efectos dañinos en la salud humana ya se conocían desde hace décadas -cáncer, problemas de desarrollo, daño hepático, baja fertilidad, disminución de efectividad de vacunas-, y sin embargo la legislación vigente no ha logrado

evitar la liberación al medio ambiente de más de 47000 toneladas solo en EE.UU. durante el último medio siglo. Su inercia química los hace prácticamente imposibles de biodegradar, y sus efectos bioacumulativos ya están haciendo saltar las alarmas sobre la necesidad de un proceso de eliminación eficaz y una legislación restrictiva. El proyecto NADESforPFAS propone el uso de disolventes eutécticos profundos basados en componentes naturales (NADES) como una alternativa renovable, versátil, barata y segura frente a los tradicionales disolventes orgánicos, a menudo con problemas de toxicidad humana y medioambiental, así como altas volatilidades y orígenes fósiles que hacen de ellos un producto no renovable. El proyecto se basa en el desarrollo de una metodología sistemática de diseño y validación de estos disolventes eutécticos a nivel técnico, sanitario y ecológico simultáneamente, con un fuerte componente computacional para el testeo preliminar de miles de combinaciones, y una posterior validación experimental de la efectividad y toxicidad de los candidatos más prometedores a fin de obtener disolventes eficaces y seguros para la eliminación de PFAS del agua.

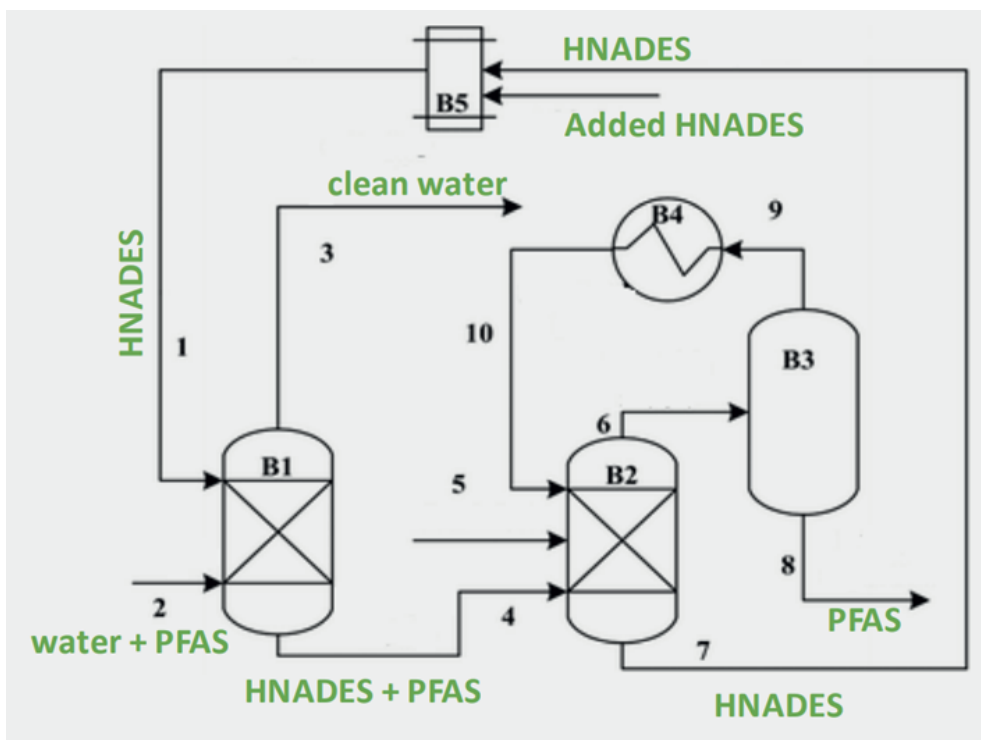


Diagrama de flujo propuesto para la extracción continua a nivel industrial de PFAS del agua via hydrophobic NADES (HNADES), incluyendo las distintas corrientes y las etapas de extracción (B1), separación del PFAS (B2, B3 y B4) y reincorporación del HNADES (B5) al sistema.