

**Contacto:**

Oficina de Transferencia de Resultados de Investigación  
Edificio Josefa Amara (nº44). 2ª planta.  
Universidad Pablo de Olavide  
otri@upo.es  
Tlfno: 954 34 86 78 / 954 34 90 90  
[www.upo.es/otri](http://www.upo.es/otri)

# Laboratorio de Simulación Molecular

# Laboratorio de Simulación Molecular

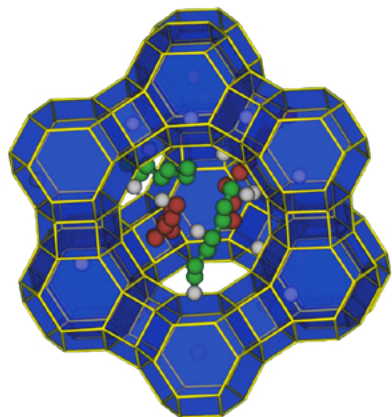
## Presentación

Investigadores del Laboratorio de Simulación Molecular de la Universidad Pablo de Olavide reproducen las propiedades de adsorción, difusión y catálisis en materiales de interés industrial y tecnológico mediante técnicas avanzadas de simulación molecular para diseñar nuevos materiales más baratos y eficientes en procesos tales como la captura de gases de efecto invernadero; la eliminación de contaminantes procedentes de emisiones industriales; almacenamiento de hidrógeno; catálisis de petróleo para obtener compuestos menos contaminantes y de mayor valor; o separación de isómeros quirales orientada a la producción de fármacos.

## Servicios científico-tecnológicos que se ofrecen

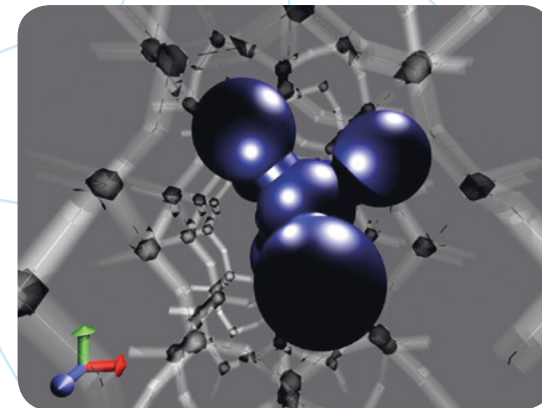
Testado de materiales mediante simulación molecular para reproducir sus comportamientos experimentales en adsorción, difusión y catálisis y proponer/diseñar nuevas estructuras que funcionarían mejor en procesos industriales específicos. En concreto los expertos trabajan simulación molecular de:

- Materiales con aplicaciones en captura de gases de efecto invernadero y en eliminación de contaminantes de origen industrial en aire, agua y suelo
- Separación de enantiómeros utilizando tamices moleculares
- Materiales capaces de almacenar y captar hidrógeno
- Materiales implicados en los procesos catalíticos



## Aspectos Innovadores/Ventajas competitivas

- La simulación molecular de materiales evita hacer repeticiones de experimentos ahorrando tiempo y dinero.
- Los investigadores trabajan con materiales porosos cristalinos como las zeolitas y los MOFs. Las zeolitas, son un conjunto de materiales cristalinos con poros muy pequeños empleados a nivel industrial gracias a su gran estabilidad y a su capacidad de adsorción, separación de los gases, catálisis e intercambio de iones. Existen más de cien estructuras zeolíticas entre naturales y sintéticas y se pueden clasificar en función del poro, de la orientación y de los tipos de canales y cavidades que presenten. Por tanto, según sus características, interesan más o menos a las empresas. Por otro lado están los MOFs (siglas de metal-organic frameworks), una nueva clase de materiales nanoporosos con muy buena estabilidad, grandes volúmenes de poro y cavidades bien definidas y moldeables. Su diversidad y versatilidad los están convirtiendo en un nuevo referente a la hora de trabajar con la captura de gases.
- Los miembros del Laboratorio de Simulación Molecular poseen conocimientos en química, física, ingeniería, ciencias ambientales y biología, aportando nuevos puntos de vista para el diseño de materiales adsorbentes, analizando los existentes y ofreciendo nuevas posibilidades.



## Responsable científico

**Prof.<sup>a</sup> Sofía Calero.** *Sistemas Físicos, Químicos y Naturales*

<http://www.upo.es/raspa/>