



OTRI



Laboratorio de Simulación Molecular

2026 Universidad Pablo de Olavide

Ver la oferta en la web. www.upo.es/UPOTec

Contacta con la OTRI: otri@upo.es

Sector

Química y materiales

Área Tecnológica

Tecnologías medioambientales y de recursos naturales , Tecnologías Químicas y de Materiales , Tecnologías de la información y de la Comunicación (Tic)

Descripción

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. Descargar Ficha del Laboratorio en pdf.

Necesidad o problema que resuelve

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 la procesos catalíticos

Aspectos innovadores

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.

Tipos de empresas interesadas

Industria química. Industria farmacéutica. Empresas biotecnológicas. Empresas del sector de la energía y medio ambiente. Administraciones con competencia en Medio Ambiente. Industria automovilística (vehículos de Hidrógeno). Centros/Unidades de investigación.

Nivel de desarrollo

En fase de investigación

Más información

La investigadora responsable del Laboratorio de Simulación Molecular, Sofía Calero, lleva una trayectoria científica en la que ha cosechado reconocidos premios y contratos a nivel español y europeo. En la actualidad lidera un proyecto internacional de gran envergadura financiado por el prestigioso programa Starting Grant de la Unión Europea: <http://www.upo.es/raspa/>
<http://www.youtube.com/watch?v=tVHoXQdF6jM>

Equipo de Investigación

Grupo Materiales Nanoestructurados con Aplicaciones Tecnológicas. Química física de fases condensadas e Interfases (FQM319)
<http://www.upo.es/raspa/>