



OTRI



## Laboratorio de Simulación Molecular

2024 Universidad Pablo de Olavide  
Ver la oferta en la web. [www.upo.es/UPOTec](http://www.upo.es/UPOTec)  
Contacta con la OTRI: [otri@upo.es](mailto: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/>