

- TÍTULO:** *IN-SILICO DESIGN OF DEEP EUTECTIC SOLVENTS FOR GAS SEPARATION AND ENERGY-RELATED OPERATIONS.*
- AUTORA:** DÑA. SARA ROZAS AZCONA
- PROGRAMA DE DOCTORADO:** QUÍMICA AVANZADA
- ACTO Y FECHA DE LECTURA:** EL ACTO PÚBLICO DE DEFENSA DE TESIS SE DESARROLLARÁ EL DÍA 22 DE MARZO DE 2024, A LAS 11:00 HORAS, DE MANERA PRESENCIAL, EN EL SALÓN DE ACTOS DE LA FACULTAD DE CIENCIAS DE LA SALUD (UNIVERSIDAD DE BURGOS).
- DIRECTORES:** D. SANTIAGO APARICIO MARTÍNEZ
D. ALFREDO BOL ARREBA
- TRIBUNAL:** D. PEDRO ÁNGEL MARCOS VILLA
D. GREGORIO JOSÉ GARCÍA MORENO
DÑA. MARÍA JOSÉ LÓPEZ SANTODOMINGO
DÑA. JULIA CONTRERAS GARCÍA
D. JOSÉ LUIS TRENZADO DIEPA
- RESUMEN:** En esta tesis doctoral se realiza una exhaustiva evaluación de nuevos materiales y disolventes sostenibles utilizando métodos computacionales. El objetivo principal es abordar las preocupaciones ambientales relacionadas con el dióxido de carbono mediante el diseño in-silico de materiales específicos. El estudio emplea modelos computacionales multiescala para obtener conocimientos fundamentales sobre las relaciones entre la estructura, composición, propiedad y rendimiento de los materiales. La investigación explora disolventes eutécticos de bajo punto de fusión compuestos por sustancias orgánicas naturales para abordar desafíos asociados con las emisiones de dióxido de carbono. Una perspectiva holística sobre el ciclo del carbono, que incluye estudios experimentales de la recombinación de carbono a hidrocarburos, aporta conocimientos valiosos al desarrollo de la química verde y a los avances tecnológicos sostenibles. En general, los hallazgos allanan el camino para la integración de disolventes eutécticos de bajo punto de fusión en procesos industriales convencionales, promoviendo un futuro más sostenible para la producción química.
- PALABRAS CLAVE:** Disolventes Eutécticos de Bajo Punto de Fusión, Dióxido de Carbono, Estrategias de Captura y Conversión de CO₂, Teoría Funcional de la Densidad, Dinámica Molecular.
- KEYWORDS:** Deep Eutectic Solvents, Carbon Dioxide, Carbon Capture and Conversion Strategies, Density Functional Theory, Molecular Dynamics.