

- TÍTULO:** *QUÍMICA COMPUTACIONAL APLICADA AL DISEÑO RACIONAL, CARACTERIZACIÓN Y APLICACIÓN DE NUEVOS DISOLVENTES EUTÉCTICOS Y NANOMATERIALES SOSTENIBLES Y SEGUROS*
- AUTORA:** DÑA. NURIA AGUILAR CUESTA
- PROGRAMA DE DOCTORADO:** *QUÍMICA AVANZADA*
- ACTO Y FECHA DE LECTURA:** EL ACTO PÚBLICO DE DEFENSA DE TESIS SE DESARROLLARÁ EL DÍA 23 DE ENERO DE 2026, A LAS 11:00 HORAS, DE MANERA PRESENCIAL EN EL SALÓN DE ACTOS DE LA FACULTAD DE HUMANIDADES Y COMUNICACIÓN DE LA UNIVERSIDAD DE BURGOS
- DIRECTORES:** DR. D. SANTIAGO APARICIO MARTÍNEZ
DR. D. ALFREDO BOL ARREBA
- TRIBUNAL:** DR. D. GREGORIO JOSÉ GARCÍA MORENO
DRA. DÑA. BEATRIZ GINER PARACHE
DR. D. JORGE FERNANDO BRANDÃO PEREIRA
- RESUMEN:** Esta tesis doctoral ilustra cómo la química computacional, haciendo uso de las metodologías de modelización multiescala, se posiciona como una herramienta fundamental y necesaria para el diseño y desarrollo de nuevos materiales y procesos que sean seguros y sostenibles.
- El diseño in silico de nuevos materiales facilita el tratamiento de grandes volúmenes de datos y la optimización de recursos, orientando el proceso de síntesis hacia el material más seguro y sostenible para cada aplicación.
- La modelización multiescala permite predecir la estructura, propiedades y perfil toxicológico de materiales avanzados desde su escala atómica hasta la escala macroscópica.
- En esta tesis doctoral se presentan los resultados obtenidos a lo largo de cuatro años de investigación del diseño racional, caracterización, aplicación y evaluación de la seguridad de dos tipos de nuevos materiales: disolventes eutécticos y nanomateriales complejos.
- Los disolventes eutécticos se presentan como una alternativa a los disolventes orgánicos convencionales para aplicaciones cruciales como la captura de dióxido de carbono o la descontaminación de aguas. Los nanomateriales, por su parte, tienen una aplicación potencial en todas las áreas de la ciencia de materiales, por lo que su seguridad debe ser evaluada y garantizada.

PALABRAS CLAVE: *Química computacional; modelización multiescala; disolventes eutécticos; nanomateriales; materiales seguros y sostenibles por diseño.*

KEY WORDS: *Computational chemistry; multiscale modelling; deep eutectic solvents; nanomaterials; safe and sustainable by design materials.*