



MINISTERIO
DE CIENCIA
E INNOVACIÓN

**SUBPROGRAMA RAMON Y CAJAL
CONVOCATORIA 2008**

Nombre: NAVARRO LOPEZ, MARIA VICTORIA

Referencia: RYC-2008-03674

Area: Tecnología Química

Número de orden: 1 **Correo electrónico:** navarro@icb.csic.es

Título:

Limpieza de gases contaminantes emitidos en procesos de generación de energía en fuentes móviles y estacionarias

Resumen de la Memoria:

En la actualidad existe una creciente preocupación por la protección del medio ambiente. Este factor choca frontalmente con la creciente demanda energética de la sociedad, ya que son muchos los procesos necesarios de generación de energía que emiten gases contaminantes, desde plantas térmicas hasta automóviles. Entre los contaminantes se encuentran los compuestos orgánicos volátiles, un grupo muy extenso de sustancias que afectan directamente a la salud humana por sus propiedades carcinogénicas (Hidrocarburos Aromáticos Policíclicos, PAH) o relacionadas con el incremento del smog fotoquímico, la reducción del ozono estratosférico o la producción de ozono troposférico (Hidrocarburos, HC, emitidos en el arranque en frío de vehículos). La línea de investigación que propongo tiene como objetivo principal la limpieza de los gases contaminantes que se emiten en generación de energía, tanto por fuentes móviles como estacionarias. El proceso que propongo es la adsorción sobre materiales porosos con sistemas adaptados a los contaminantes atmosféricos y sus condiciones de emisión, de temperatura y concentración. Para realizar este estudio planteo el uso de tres técnicas complementarias: • simulación molecular del proceso de adsorción para estudiar la influencia de las distintas propiedades del sólido y realizar el diseño del sólido con propiedades óptimas de capacidad de adsorción y características de difusión de las moléculas de gas en su interior • modelado teórico de isothermas y curvas de ruptura del proceso de adsorción y curvas de desorción, en la partícula y en el reactor, que permita conocer la influencia de las distintas variables de proceso y realizar un diseño óptimo de reactor • experimentación en equilibrio para obtener isothermas de adsorción y en sistemas dinámicos para obtener curvas de ruptura de adsorción y curvas de desorción, que permitan ajustar los métodos matemáticos, tanto de simulación molecular como del modelado teórico del sistema, para posteriormente reproducir el proceso en diversas condiciones. De esta manera se desarrollará una tecnología química avanzada para la limpieza de gases contaminantes emitidos en procesos de generación de energía en fuentes estacionarias y móviles reduciendo su impacto sobre la salud y el medio ambiente como marca la línea del Plan Nacional de Investigación, Desarrollo e Innovación de energía y mitigación del cambio climático.

Resumen del Curriculum Vitae:

Finalicé mis estudios en Ciencias Químicas en el año 1999 en la especialidad de Química Técnica. Ese mismo año comencé a trabajar en mi Tesis Doctoral en Ciencias Químicas que defendí en el año 2003. Este trabajo, de título "Materiales carbonosos para el control de contaminantes orgánicos atmosféricos: diseño y rendimiento" se desarrolló bajo la dirección de la Prof. Ana M^a Mastral y el Dr. Ramón Murillo del grupo de Investigaciones Medioambientales del Departamento de Energía y Medio Ambiente del Instituto de Carboquímica – CSIC. Este trabajo supuso la valorización de neumático fuera de uso y carbón de bajo rango para la producción de carbones activados y su aplicación en la retención de Hidrocarburos Aromáticos Policíclicos emitidos en procesos de generación de energía. Además, durante este periodo también participé activamente en otros proyectos de investigación que se estaban llevando a cabo dentro del Grupo de Investigación. En Octubre del 2003 comencé mi actividad post doctoral y en Enero de 2004 comencé una estancia para completar mi formación en el área de adsorción de compuestos sobre materiales porosos incorporándome al grupo del Prof. Nigel Seaton de la University of Edinburgh con una beca del programa Europa de CAI-DGA que enlacé con una beca FPU post doctoral del Ministerio de Educación y Ciencia. El proyecto se tituló: "Modelado de la adsorción de compuestos orgánicos Volátiles sobre materiales nanoporosos mediante técnicas de simulación molecular". En este proyecto desarrollé, con métodos Monte Carlo de simulación molecular, estudios sobre la evolución de la microporosidad con la activación física de carbones activados y un código capaz de simular el proceso de adsorción de moléculas complejas en carbones activados. En Abril de 2006 enlacé esta etapa post doctoral con un contrato como experta en simulación molecular dentro del 6^o Programa Marco Marie Curie Transfer of Knowledge para trabajar en el grupo del Prof. John Simmie de la National University of Ireland Galway. El trabajo se enmarcó dentro del proyecto "Burnquest. Creación de un centro químico de primer nivel mundial". Con este grupo incorporé conocimientos de química cuántica para optimización de estructuras moleculares y conceptos relacionados. Por último, desde Enero de 2007 me reincorporé al Grupo de Investigaciones Medioambientales del Instituto de Carboquímica – CSIC dirigido por la Prof. Ana M^a Mastral con un contrato Juan de la Cierva. Actualmente mi investigación se centra en el control de contaminantes orgánicos atmosféricos en procesos de generación de energía de forma experimental y con herramientas de modelado y simulación molecular, participando en diversos proyectos y dirigiendo dos proyectos fin de carrera, actualmente en curso. Resumiendo, mi participación activa en 12 proyectos de investigación dentro del área de tecnología química ha dado lugar a 41 artículos publicados en su mayoría en revistas internacionales con un alto índice de impacto dentro del 25 % de las revistas con mayor índice de impacto de mis áreas de trabajo. Además, mi trabajo ha dado también lugar a 46 contribuciones en congresos nacionales e internacionales.



MINISTERIO
DE CIENCIA
E INNOVACIÓN

SUBPROGRAMA RAMON Y CAJAL CONVOCATORIA 2008

Nombre: DE LA PEÑA OSHEA, VÍCTOR ANTONIO

Referencia: RYC-2008-02069

Area: Tecnología Química

Número de orden: 2 **Correo electrónico:** victor.delapena@imdea.org

Título:

Desarrollo de materiales catalíticos activos en la reducción de CO₂ con agua en condiciones suaves. Eliminación y revalorización del CO₂

Resumen de la Memoria:

Durante los últimos años se ha producido un incremento casi exponencial de emisiones de dióxido de carbono a la atmósfera, fruto de un modelo energético no sostenible basado en combustibles fósiles. Este incremento del CO₂ atmosférico es el principal responsable del calentamiento global debido al efecto invernadero. La entrada en vigor del Protocolo de Kyoto puso de manifiesto la necesidad de reducir las emisiones antropogénicas de CO₂ [1]. Las vías naturales de fijación del dióxido de carbono (plantas o en océanos), no resultan suficientes para eliminar la gran cantidad de CO₂ producida. Otras alternativas como la utilización de fuentes de energía renovables y del hidrógeno como vector energético, resultan insuficientes para paliar el calentamiento global. Actualmente, se están llevando a cabo grandes esfuerzos para desarrollar procesos de reducción de CO₂, que permitan su transformación en productos de alto valor añadido. En los últimos años, se han realizado múltiples estudios desarrollando diferentes métodos [2]. Una de las vías que suscita más interés es la reducción fotocatalítica de CO₂ en medio acuoso en condiciones suaves [3]. El trabajo de investigación propuesto se basa en el desarrollo de nuevos materiales catalíticos basados en óxidos semiconductores modificados, activos para la reducción fotocatalítica del CO₂ con agua en condiciones suaves para obtener productos de alto valor añadido. Con el fin de lograr este objetivo principal, se plantean otros objetivos parciales: i) Diseño y síntesis de sistemas catalíticos basados en óxidos semiconductores. Las propiedades fotocatalíticas de estos sistemas los convierten en materiales potencialmente activos en la fotoreducción de CO₂. Uno de los objetivos del proyecto es estudiar la influencia de estos sistemas en la conversión de CO₂ y en la selectividad. Posteriormente, se estudiará el efecto de la modificación en la estructura de los semiconductores. a) Dopaje con metales de transición (Fe, Co, ...), b) Uso de átomos no metálicos (N, F, ...), c) Anclaje de fotorreceptores moleculares (derivados de merbromina, ftalocianina, ...) [4]. ii) Estudio de propiedades catalíticas en condiciones suaves, de los sistemas propuestos, en la reducción de CO₂ para la producción de productos de alto valor añadido. Se pondrá en marcha el sistema para llevar a cabo las medidas de actividad. Se optimizará el proceso de reacción, con el fin de mejorar el rendimiento y selectividad del proceso. Las reacciones se llevarán a cabo en un reactor de fase líquida, aunque no se descarta realizar estudios en fase gas. iii) Con el objetivo de relacionar la estructura y reactividad de estos materiales, se prestará una gran atención a la caracterización por medio de distintas técnicas in-situ y operando. Además, el conjunto de los resultados obtenidos se completará con estudios computacionales, con el fin de determinar cómo afectan las propiedades electrónicas de los dopantes a las propiedades de los catalizadores en reacción. Durante esta etapa, se buscarán estrategias alternativas en la síntesis del catalizador con el fin de optimizar los sistemas iniciales. De esta forma, se buscará una mejora del catalizador y se conectará con la etapa i) lo que implica la autoconsistencia de este proyecto. I.P.M. Cox et al Nature 408 (2000) 1842. H. Arakawa et al. Chem. Rev. 101 (2001) 9533. A.J. Esswein Chem. Rev. 107 (2007) 40224. E.W. McFarland, Nature 421 (2003) 616

Resumen del Curriculum Vitae:

El candidato se licenció en CC. Químicas en la Universidad Autónoma de Madrid (UAM). Realizó la Tesina de Licenciatura en dicha universidad. En Octubre del 2000 obtuvo la beca de la Fundación REPSOL-YPF que le permitió alcanzar el grado de Doctor en CC. Químicas por la UAM (2003). Su trabajo de tesis, realizado en el Instituto Catálisis y Petroleoquímica (ICP-CSIC), se centró en el estudio de diversos sistemas catalíticos en el proceso Fischer-Tropsch. Así, adquirió gran experiencia en diferentes técnicas de caracterización y en el diseño de microreactores para reacciones en fase gas y líquida. El Dr. de la Peña realizó una estancia posdoctoral en el ICP-CSIC, desarrollando nuevos sistemas catalíticos. Por un lado, se estudiaron catalizadores para la eliminación de compuestos orgánicos volátiles, en colaboración con la Universidad del País Vasco. Esta colaboración permanece activa actualmente, con la incorporación del Instituto KTH (Suecia). Por otra parte, realizó estudios teóricos de gran interés en Catálisis Homogénea y Heterogénea, especialmente en epoxidación de alquenos. Durante el 2004, el candidato contribuyó con su trabajo dentro del mundo empresarial, formando parte del Departamento de I+D de Futuro Tecnológico Español S. L. Estas actividades dieron lugar a un modelo de utilidad que mereció la acreditación de la ENTIDAD NACIONAL DE ACREDITACIÓN. Desde Diciembre del 2004 hasta Diciembre de 2007, disfrutó de un contrato Juan de la Cierva en la Universidad de Barcelona (UB). La investigación principal del candidato se centró en la optimización de nuevos sistemas catalíticos para la transformación selectiva de productos derivados de la biomasa para la obtención de hidrógeno. Por otra parte, durante su contrato Juan de la Cierva, el Dr. de la Peña estableció colaboraciones con diferentes grupos de la UB y de otros países, en una eficiente simbiosis entre científicos de diferentes ámbitos, dando lugar a investigaciones de alto carácter multidisciplinar. Además, el candidato ha realizado actividades docentes, destacando su participación en el Programa Oficial de Postgrado de la UB ("MÁSTER EN NANOCIENCIA Y NANOTECNOLOGIA"), en el cual impartió la asignatura "Nanocatálisis". La implicación del candidato, desde el punto de vista pedagógico, se ha mostrado en la dirección de un Máster Experimental de Licenciatura. El Dr. de la Peña ha colaborado y realizado estancias en distintos centros, llevando a cabo trabajos de investigación de marcado carácter multidisciplinar. En la actualidad, ocupa una plaza de Investigador Posdoctoral Senior en el Instituto Madrileño de Estudios Avanzados en Energía. (IMDEA ENERGÍA). Durante su carrera científica, el candidato ha publicado un gran número de artículos (24 aceptados, 3 enviados y 2 en preparación) en revistas científicas de alto prestigio (ej. Angew. Chemie. Int. Ed., Adv. Material, Appl. Cata. B: Environmental, J. Mater. Chem...), en la mayoría como primer autor (15). Estos resultados han sido, además, presentados en numerosos congresos, con ocho comunicaciones orales. Además, el candidato es autor de un modelo de utilidad. El curriculum vitae del solicitante refleja su demostrada experiencia adquirida durante todos estos años de formación y colaboración con investigadores en diferentes campos. La sólida trayectoria profesional del candidato avala, sin lugar a dudas, la viabilidad de la línea de investigación propuesta.



MINISTERIO
DE CIENCIA
E INNOVACIÓN

**SUBPROGRAMA RAMON Y CAJAL
CONVOCATORIA 2008**

Nombre: DÍAZ MARTÍN, MARÍA ELENA

Referencia: RYC-2008-02021

Area: Tecnología Química

Número de orden: 3 **Correo electrónico:** e.diaz@usal.es

Título:

TRANSFERENCIA DE MASA EN SISTEMAS GAS-LÍQUIDO: OPTIMIZACIÓN DE APLICACIONES DE DINÁMICA DE FLUIDOS COMPUTACIONAL (CFD)

Resumen de la Memoria:

La transferencia de masa en columnas de burbujas, íntimamente relacionada con la hidrodinámica, se describe mediante el coeficiente volumétrico de transferencia de masa ($k_L a$), cuya determinación precisa es crucial. Los valores de $k_L a$ dependen de la geometría de la columna, de las condiciones operacionales y de las propiedades de la fase líquida, factores que dificultan el desarrollo de modelos generales de predicción de $k_L a$. La tensión superficial y la viscosidad del líquido tienen gran influencia en la hidrodinámica y, en concreto, en los fenómenos de coalescencia y ruptura de burbujas. Cuantificar esta influencia es fundamental, especialmente en procesos biotecnológicos donde altas viscosidades y la existencia de surfactantes son habituales. Por otro lado, la dinámica de fluidos computacional (CFD) se ha convertido en una herramienta fundamental para predecir el comportamiento de múltiples procesos ingenieriles, entre ellos los desarrollados en columnas de burbujas. En este contexto, se proponen los siguientes objetivos de estudio: • Influencia de la variación de las propiedades del líquido (tensión superficial y viscosidad) en los valores experimentales de $k_L a$. • Modelado ab initio del proceso de transferencia de masa: resolución del sistema acoplado de ecuaciones diferenciales de transferencia utilizando CFD. Como resultado se obtendrán predicciones teóricas de $k_L a$. • Validación de los resultados teóricos de $k_L a$ usando resultados experimentales: actualización, racionalización y optimización del software de CFD. En concreto, se optimizarán: o Modelo de transferencia de masa más adecuado para la determinación del $k_L a$ en función de las características hidrodinámicas del sistema. o Comportamiento de las ecuaciones de predicción de $k_L a$ frente al cambio de escala. La solicitante tiene experiencia y conocimientos en el trabajo experimental con columnas de burbujas (a través de su participación en varios proyectos de investigación) así como en la aplicación de CFD al modelado de los procesos hidrodinámicos y de transferencia de masa que tienen lugar en estos equipos (a través de contratos de colaboración establecidos con la empresa ANÁLISIS-DSC, especialista en el código comercial ANSYS-CFX).

Resumen del Curriculum Vitae:

Soy licenciada en Ingeniería Química por la Universidad de Salamanca (1999). Inmediatamente después trabajé durante un año bajo la dirección del profesor Miguel A. Galán en el Departamento de Ingeniería Química de la Universidad de Salamanca. A continuación, una estancia de cuatro años en la University of Alabama in Huntsville (EE.UU.), me llevó a completar los estudios correspondientes al Master of Science in Engineering (MSc(Eng)) en 2003 así como el Ph.D. en Ingeniería Mecánica con concentración en Ingeniería Química en 2004, dirigidos ambos por el profesor Ramon L. Cerro. Durante este tiempo se llevaron a cabo estudios de los fenómenos físico-químicos e hidrodinámicos que tienen lugar en la fabricación de recubrimientos nanotecnológicos tipo Langmuir-Blodgett. El alto nivel académico mantenido durante este periodo fue reconocido con la obtención de dos premios: el premio de excelencia académica y membresía vitalicia en la asociación Omega Chi Epsilon en el año 2002 y el premio el mejor estudiante graduado durante el año 2003. Finalizado el doctorado me reincorporé al grupo de investigación dirigido por el profesor Miguel A. Galán anteriormente mencionado con un contrato de investigación inicialmente (2004-2005) y con un contrato Juan de la Cierva a posteriori. Durante este último periodo, mi investigación se ha centrado en el estudio de la hidrodinámica y de los fenómenos de transferencia de masa en columnas de burbujas tanto desde el punto de vista experimental como teórico (estudios basados en CFD), así como en la continuación del estudio de los procesos hidrodinámicos que tienen lugar durante la deposición de recubrimientos tipo Langmuir-Blodgett. Los trabajos de investigación realizados durante la obtención del grado de Ph.D. y periodo posdoctoral han resultado en la publicación de once artículos (diez como primer autor), todos ellos en revistas de alto índice de impacto, además de un artículo en proceso de revisión y dos artículos en preparación y la participación en 16 congresos (15 de ellos internacionales). Adicionalmente se han publicado 2 capítulos de libro, uno de ellos en el libro "Chemical Engineering: Trends and Developments" (como primer autor) en el que han participado varias de las figuras más relevantes a nivel mundial en la Ingeniería Química. Soy investigadora colaboradora en cuatro proyectos de investigación (dos de ellos vigentes), investigadora principal en un proyecto de investigación vigente y co-investigadora principal en dos contratos de asesoría en temas ingenieriles y uno de realización de análisis con la empresa ANÁLISIS-DSC. Actualmente co-dirijo una tesis doctoral y doce proyectos fin de carrera, además de haber dirigido un trabajo de grado y cuatro proyectos ya defendidos. Poseo la evaluación positiva de la ANECA como Profesor Ayudante Doctor. Mi experiencia docente fue alcanzada en EE.UU. como "teaching assistant" en la Universidad de Alabama en Huntsville. Durante dos semestres y 20 horas semanales de trabajo docente se impartió un laboratorio de materiales del cual era responsable y se colaboró activamente en la docencia de dos cursos de Ingeniería Química. Adicionalmente, durante el periodo disfrutado de Juan de la Cierva y posteriormente de Profesor Ayudante Doctor en la Universidad de Salamanca se han impartido diferentes clases de Ingeniería Química sumando un total de 54 créditos impartidos.



MINISTERIO
DE CIENCIA
E INNOVACIÓN

**SUBPROGRAMA RAMON Y CAJAL
CONVOCATORIA 2008**

Nombre: GOMEZ DIAZ, DIEGO

Referencia: RYC-2008-02467

Area: Tecnología Química

Número de orden: 4 **Correo electrónico:** eqnaval@usc.es

Título:

SEPARACIÓN Y ELIMINACIÓN SELECTIVA DE GASES CONTAMINANTES (GASES ÁCIDOS Y COV_s) MEDIANTE SISTEMAS MIXTOS GAS-MEMBRANA-LÍQUIDO

Resumen de la Memoria:

Se pretende desarrollar equipos que permitan la separación selectiva de distintos gases contaminantes, tanto gases ácidos como compuestos orgánicos volátiles (COVs). Para ello se apuesta por avanzar en los sistemas gas-líquido mediante la introducción de una membrana entre ambas fases con el fin de conseguir una separación previa antes del bien conocido proceso de absorción. La adecuada elección de la membrana respecto a su naturaleza hidrofóbica, así como el tamaño de poro permitirá conseguir una separación de los compuestos orgánicos volátiles respecto a compuestos gaseosos inorgánicos (por ejemplo CO₂, SO₂, SH₂, N₂, O₂, etc). Dicha primera separación permite que los gases ácidos que en muchos casos son altamente contaminantes, y que atraviesan la membrana correspondiente, pueden ser tratados mediante absorción física o química, según el interés o uso futuro de dichos gases. En el presente proyecto se pretende diseñar un equipo que integre ambas separaciones. Paralelo en un primer momento con un equipo a escala laboratorio se probará la eficacia del equipo empleando membranas comerciales de tipo polimérica y distintas fases líquidas (compatibles con las membranas) que permitan procesos de absorción selectiva (tanto física como química). En una segunda parte se pretenden desarrollar membranas, principalmente de tipo inorgánico y probablemente de carácter zeolítico, con características adecuadas para las separaciones objetivo y probarlas en el equipo a nivel laboratorio. Por último, se pretende desarrollar un equipo a escala planta piloto para ser aplicado a corrientes reales entrando en contacto con industrias interesadas en este tipo de procesos de eliminación de gases. Se pretende pues, combinar la alta selectividad en la separación que aportan los métodos tradicionales con la flexibilidad, modularidad y aspecto compacto de los módulos de membranas. Si a estas características se le suma la selectividad del módulo de membrana, conseguida mediante la elección adecuada del tipo de membrana, se pueden conseguir separaciones de muy alto grado.

Resumen del Curriculum Vitae:

Doctor en Ciencias Químicas (Programa Ingeniería Química y Ambiental) con la memoria titulada "Procesos de transferencia de materia gas-líquido en medios homogéneos, heterogéneos y microheterogéneos" obteniendo la máxima calificación. Dicha investigación se incluye dentro del proyecto de investigación "Aprovechamiento de emisiones gaseosas para la producción de carbonato cálcico" (Ministerio de Educación y Ciencia). Durante el periodo predoctoral disfruté de becas concedidas por la Xunta de Galicia y la Universidad de Santiago de Compostela (USC). También realicé estancias de investigación en la Universidad de Vigo. Posteriormente me incorporé durante 5 meses al departamento de Ingeniería Química de la Universidad de Vigo como profesor invitado, impartiendo una asignatura de la titulación de Ingeniería Industrial. En el año 2004 retorno a la USC con un contrato posdoctoral de la propia Universidad con el fin de continuar mi trabajo en el tema de mi tesis dentro del proyecto "Nuevas técnicas para la eliminación de gases contaminantes" (Xunta de Galicia). A inicios del 2005 me incorporo al departamento de Ingeniería Química de la Universidad Complutense de Madrid por la concesión de un contrato "Juan de la Cierva" al proyecto de investigación "Epoxidación regioselectiva de diolefinas mediante sistemas heterogéneos para la obtención de productos de química fina". Ya en el año 2006 retorno a la USC con un contrato de profesor sustituto para posteriormente iniciar una etapa como investigador "Isidro Parga Pondal" (programa de contratación de investigadores de la Xunta de Galicia). A lo largo de este tiempo he realizado distintas estancias de investigación, además del periodo incluido en la etapa en la UCM bajo el contrato "Juan de la Cierva". Básicamente he realizado estancias de investigación en la Universidad de Vigo, principalmente en el grupo de Química Coloidal, y posteriormente en la Universidad do Minho en Portugal en el departamento de Ingeniería Biológica. Durante mi carrera investigadora he publicado un total de 43 artículos, de los cuales 30 están publicados en revistas incluidas en el JCR. Un 85% de los artículos están publicados en revistas del primer tercio de su sección del JCR. Cabe señalar que 8 artículos más están siendo revisados en revistas del JCR. Las revistas que más he utilizado para difundir el trabajo que he publicado a lo largo de este tiempo han sido: Chemical Engineering Journal, Chemical Engineering Science, Journal of Chemical and Engineering Data, Journal of Chemical Technology and Biotechnology. Soy co-autor de una patente sobre el uso de disoluciones de glucosamina para la eliminación o separación de dióxido de carbono como opción a las aminas comúnmente utilizadas y que elimina riesgos y contaminación respecto a las convencionales. He co-dirigido la tesis doctoral "Transferencia de materia gas-líquido. Efecto de contaminantes superficiales" que ha obtenido para máxima calificación, y en la actualidad co-dirijo otra tesis que a finales del año 2007 se depositará. He co-dirigido 2 proyectos fin de carrera, dos tesis de licenciatura en química y dos TIT del Diploma de Estudios Avanzados. Soy censor habitual de las revistas: Chemical Engineering Journal, Journal of Chemical and Engineering Data, European Food Research and Technology y Canadian Journal of Chemical Engineering.



Nombre: **CASTANO SANCHEZ, PEDRO**

Referencia: RYC-2008-03119

Area: Tecnología Química

Número de orden: 5 Correo electrónico: p.castano@tudelft.nl

Título:

Rutas para la Producción de (Bio-) Combustibles y Productos Químicos Basado en Óptimos Catalizadores, Modelos Matemáticos y Herramientas para el Alto-Rendimiento

Resumen de la Memoria:

En la actualidad el mercado de los combustibles ha de hacer frente a un vasto número de retos gracias a las restricciones en su composición y en la emisión de contaminantes, al tiempo de un esfuerzo por alcanzar el desarrollo sostenible. La futura utilización de biocombustibles presenta los mismos dilemas que la de los fósiles en términos de utilización de las fracciones destiladas, eliminación de contaminantes y optimización en el uso de las materias primas en base a un dinámico mercado. Los aspectos tecnológicos que podrían prolongar nuestra actual forma de vida están relacionados con el diseño de catalizadores y reactores que permita intensificar la producción, mejorar la selectividad (reduciendo la emisión de contaminantes) e incrementar la estabilidad de los procesos. La innovación en el área de la ingeniería catalítica requiere un entendimiento del proceso desde la nano- a la macro-escala. Por tanto, el objetivo implica la participación de diferentes disciplinas incluyendo desde la química de superficies (preparación, funcionalización and caracterización) hasta el modelado de los fenómenos termodinámicos, cinéticos, hidrodinámicos y de transporte. Durante su carrera académica, el solicitante ha fortalecido sus conocimientos en procesos clave del mercado de combustibles; hidroprocesado y craqueo catalítico. Los proyectos en donde el solicitante ha estado inmerso pueden resumirse en: (i) valorización de desechos y excedentes, (ii) eliminación de contaminantes, (iii) intensificación en el rendimiento de reactores químicos y (iv) mejora de la selectividad de las reacciones a productos de alto valor añadido. El solicitante proyecta innovar en el tratamiento de combustibles y desechos orgánicos (plásticos y bio-residuos) basándose en cuatro pilares: (i) nuevos catalizadores basados en metales nobles y/o soportes con selectividad de forma, (ii) modelos que incluyan fenómenos cinéticos, de desactivación, hidrodinámicos y de transporte, (iii) microreactores para aumentar el rendimiento experimental y (iv) técnicas espectroscópicas aplicadas al seguimiento de los mecanismos de reacción. El solicitante utilizaría su propia experiencia así como el esfuerzo colaborador con otras entidades y grupos para abordar los anteriores retos.

Resumen del Curriculum Vitae:

Pedro Castaño se graduó en Ingeniería Química por la UPV (Universidad del País Vasco, Bilbao, España) en 2002. Antes de ello (2000 y 2001), realizó dos estancias en el departamento de Ingeniería Química del MIT (Massachusetts Institute of Technology, Cambridge, EEUU) donde se inició en investigación. En Septiembre del 2002 el candidato defendió su proyecto de fin de carrera titulado "Craqueo Térmico y Catalítico de Plásticos Disueltos en Aceite de Ciclo Ligero sobre catalizadores de HZSM-5" en la UPV y poco después comenzó sus actividades de Doctorado en el departamento de Ingeniería Química de la misma universidad. Durante su Doctorado realizó dos estancias en CREC-UWO (Chemical Reactor Engineering Centre, University of Western Ontario, London, Canada) y en ICP-CSIC (Instituto de Catálisis y Petroleoquímica, Consejo Superior de Investigaciones Científicas, Madrid, España) con el objetivo de fortalecer sus aptitudes en el modelado y en la preparación de catalizadores respectivamente. El candidato recibió el título de Doctor con el trabajo denominado "Hidro craqueo de Aromáticos Ligeros a n-Alcanos C2+. Variables de Proceso y Modelado Cinético" en julio del 2006. Cinco meses más tarde (enero 2007), comenzó como postdoctoral researcher en TUDelft (Technische Universiteit Delft, Holanda) dentro del departamento de Ingeniería Catalítica. Actualmente el candidato está contratado por el consorcio académico-industrial (Shell Global Solutions, Albemarle Corp. y TUDelft) con el nombre de "High-Throughput Multiparallel Three-Phase Microreactors for Kinetic Modelling of Diesel Ultra-Deep Hydrodesulphurization". En los pasados años, Pedro Castaño ha progresado en el aprendizaje de las etapas integrantes del desarrollo de catalizadores heterogéneos, esto es, preparación (síntesis de zeolitas, impregnación metálica, etc), caracterización (XPS, TEM, isothermas de adsorción-desorción de N₂, CO, H₂, NH₃, análisis calorimétrico-termogravimétrico, etc), análisis (cromatografía de gases, espectrometría de masas, conductimetría, etc) y medida de actividad catalítica en reactores de lecho fluidizado, fijo, slurry y trickle. El análisis e interpretación de estas grandes cantidades de datos ha sido realizada utilizando Matlab, Origin, SigmaPlot y Excel para finalmente modelar la el reactor-catalizador usando Matlab.



MINISTERIO
DE CIENCIA
E INNOVACIÓN

**SUBPROGRAMA RAMON Y CAJAL
CONVOCATORIA 2008**

Nombre: PALOMO CARMONA, JOSE MIGUEL

Referencia: RYC-2008-02087

Area: Tecnología Química

Número de orden: 6 **Correo electrónico:** josempalomo@icp.csic.es

Título:

Ingeniería de catalizadores de una lipasa termorresistente para el desarrollo de procesos químicos altamente selectivos

Resumen de la Memoria:

Las Enzimas en Tecnología Química. A pesar de sus excelentes propiedades catalíticas (actividad en condiciones suaves, selectividad, etc) las enzimas presentan también importantes limitaciones para su aplicación industrial en procesos químicos. Así pues, el desarrollo de métodos muy sencillos de purificación, de inmovilización y de estabilización de enzimas industriales debe facilitar la preparación de catalizadores enzimáticos inmovilizados que sean muy activos y muy estables y por tanto útiles para su implantación industrial. Por otro lado muchos procesos, pe., reacciones asimétricas catalizadas por lipasas, precisan también una cuidadosa ingeniería de la reacción: es necesario transformar selectivamente muy altas concentraciones de sustratos que se deben solubilizar en presencia de moderadas o altas concentraciones de codisolventes orgánicos. En este proyecto se abordará la preparación de nuevos y mejores catalizadores inmovilizados de una lipasa termorresistente procedente de *Bacillus thermocatenulatus* (BTL). Con estos nuevos catalizadores inmovilizados intentaremos desarrollar procesos químicos altamente selectivos: reacciones de resolución de meclas racémicas, hidrólisis regioselectivas y procesos asimétricos de interés en química fina y farmacéutica. Intentamos que tanto los Catalizadores Como los Procesos sean fácilmente escalables a nivel industrial Las principales sub-líneas de investigación son las siguientes: a.- Métodos muy sencillos de purificación b.- Rigidificación de diferentes regiones de la enzima por unión covalente multipuntual. c.- Estudios cristalográficos de la estructura cerrada y abierta de la enzima. d.- Modificación química dirigida (con polímeros y oligopéptidos) de las zonas implicadas en el mecanismo de apertura y cierre: estabilización de la estructura abierta (catalizadores muy activos) y modulación de la apertura (catalizadores más selectivos). e.- Ingeniería de Procesos Enzimáticos Enantioselectivos y Asimétricos: búsqueda de soluciones de compromiso (pH, temperatura, codisolventes, etc.) que nos permitan obtener simultáneamente altas concentraciones de sustrato, elevadas conversiones, buena actividad, estabilidad y selectividad del catalizador enzimático, estabilidad de sustratos y productos, etc.

Resumen del Curriculum Vitae:

JOSE MIGUEL PALOMO CARMONA Nacido en Málaga, España (1976) Títulos Académicos Doctorado en Química, Universidad Autónoma de Madrid, 2003 Master en Química, Universidad Autónoma de Madrid, 2002 Licenciado en Química, Universidad Autónoma de Madrid, 1999 Actividad investigadora inicial Dep. Biocatálisis. Instituto de Catálisis. Consejo Superior de Investigaciones Científicas. CSIC. 1999-2003 Situación Profesional en Institutos de investigación Investigador científico contratado I3P (CSIC), 2006- Investigador Postdoctoral, Instituto Max Planck, 2004-2006 Investigador Postdoctoral, (CSIC), 2003 Becario predoctoral (CSIC), 1999-2003 Estancias como Investigador invitado Dep. Química Farmacéutica. Universidad de Pavia (Pavia, Italia), 2007 Escuela de ingeniería bioquímica. Facultad de ingeniería de Valparaíso (Chile), 2003 Miembro Asociación Americana para el avance de la ciencia, programa de excelencia en ciencia. Áreas científicas de interés (Un total de 70 publicaciones, 2 patentes) Ingeniería de enzimas (purificación, inmovilización, modificación, estabilización de enzimas) Biotransformaciones enzimáticas: a. Química fina (síntesis de péptidos y antibióticos, catálisis enzimática asimétrica, etc.) c. Química analítica (enzimas). Preparación de péptidos y proteínas semisintéticas Publicaciones y libros recientes seleccionados Autor invitado a *Immobilized Enzymes and Cells*, 2nd edition (Humana Press, NJ, USA), March 2006 *Nature Protocols* (Novel protocols for immobilization-stabilization of enzymes) 2, 1022, 2007 *Adv. Synth. Catal.* (modulation of enantioselectivity of lipases) 349, 1119, 2007. *Adv. Synth. Catal.* (Regioselective hydrolysis of carbohydrates by lipases) 349, 1969, 2007. Otros méritos- Premio beca postdoctoral EMBO, long term fellowship; - Participación en 20 congresos internacionales; - Participación en 12 proyectos o contratos de investigación Conferencias invitadas en distintos centros internacionales; - Factor h=18 (Scopus)



MINISTERIO
DE CIENCIA
E INNOVACIÓN

**SUBPROGRAMA RAMON Y CAJAL
CONVOCATORIA 2008**

Nombre: MARTINEZ HUERTA, MARIA VICTORIA

Referencia: RYC-2008-02356

Area: Tecnología Química

Número de orden: 7 **Correo electrónico:** mmartinez@icp.csic.es

Título:

Desarrollo de nuevos electrocatalizadores con aplicación en pilas de combustible regenerativas en una unidad para almacenamiento y producción de energía limpia

Resumen de la Memoria:

Los actuales problemas medioambientales y de abastecimiento energético que tienen lugar a nivel mundial, podrían solucionarse mediante el uso general de fuentes de energía renovables, tales como la solar y la eólica. Sin embargo, estas fuentes de energía son intermitentes, y los costes de las baterías locales conectadas a estos sistemas son realmente altos cuando se requieren capacidades de almacenamiento elevadas. Una prometedora alternativa sería el almacenamiento de energía a través del hidrógeno usando la tecnología de pilas de combustible regenerativas en una unidad (URFC). Una URFC es una celda electroquímica capaz de trabajar como una pila de combustible y como un electrolizador, de tal forma que solamente uno de los modos sería operativo en el tiempo. El hidrógeno se generaría mediante la electrolisis del agua utilizando fuentes de energía renovables. El H₂ y O₂ obtenidos se almacenarían o utilizarían directamente en una pila de combustible para la obtención de electricidad, calor y agua. Estos sistemas utilizan electrolito de membrana polimérica. La experiencia y el conocimiento adquirido por la candidata en pilas de combustible de membrana polimérica van a ser fundamentales para el desarrollo de estos sistemas, teniendo en cuenta que los materiales y la tecnología necesaria para las URFCs son similares a los de las PEMFCs. En un diseño típico de una URFC cada electrodo está siempre en contacto con el mismo gas, hidrógeno u oxígeno, y la polaridad de la celda cambiará cuando el sistema cambie de modo de operación. En esta configuración será, por tanto, necesario trabajar con electrocatalizadores bifuncionales. El principal problema de estos sistemas se plantea con el electrodo de oxígeno, y concretamente en la obtención de electrocatalizadores bifuncionales capaces de reducir el oxígeno y oxidar el agua con alta eficiencia, y que sean resistentes a la corrosión anódica que tiene lugar durante la electrolisis del agua. El principal objetivo de esta línea de investigación es, por tanto, el desarrollo de electrodos de oxígeno bifuncionales que sean capaces de hacer de las pilas URFC sistemas técnica y económicamente más competitivos. Para este propósito se desarrollarán y optimizarán nuevos electrocatalizadores bifuncionales basados en nanopartículas metálicas, donde un preciso control de las propiedades físicas y químicas será esencial para el control de sus propiedades electrocatalíticas. A su vez, se ensayarán nuevos métodos de fabricación de las MEAs que favorezcan la difusión de reactantes y productos, y donde un especial control de la gestión del agua será fundamental. La actividad de los electrodos preparados se evaluará en una monocelda PEM URFC, tanto en el modo de pila de combustible como en el modo de electrolizador, estudiando diferentes condiciones de reacción, cargas metálicas y evaluando la estabilidad de los electrocatalizadores.

Resumen del Curriculum Vitae:

La candidata es doctora en Ciencias Químicas por la Universidad Autónoma de Madrid, y tras realizar un Master en Ciencia y Tecnología de Polímeros, ha desarrollado su actividad investigadora en cinco centros de investigación, incluyendo el Instituto de Catálisis y Petroleoquímica (CSIC), la Universidad de Ciencia y Tecnología de Hong Kong, el Instituto de Química-Física "Rocasolano" (CSIC), la Universidad de La Laguna y el Instituto de Química Orgánica (CSIC). La candidata ha trabajado en tres líneas de investigación diferentes, pero complementarias, que le han permitido adquirir la experiencia y know-how necesarios para desarrollar la memoria aquí propuesta. Las líneas en las que ha participado son las siguientes: 1) Síntesis asimétrica y su aplicación en la preparación de materiales mesoporosos, trabajo realizado en su mayor parte en colaboración con la Universidad de Michigan (EEUU) para la realización de la Memoria de Licenciatura (1996), obteniendo la máxima calificación, 2) desarrollo de procesos industriales catalíticos, donde trabajó principalmente en el estudio de catalizadores para la deshidrogenación oxidativa de etano en colaboración con la Universidad de Lehigh (EEUU) para la obtención de la Tesis doctoral (2001), obteniendo la máxima calificación, y 3) pilas de combustible y tecnología del hidrógeno desde 2002, mediante dos contratos postdoctorales (I3P y Juan de la Cierva) especializándose en el estudio de electrocatalizadores para pilas de combustible de membrana polimérica. La candidata ha participado activamente en el desarrollo de un total de 16 proyectos de investigación, y es co-inventora de dos patentes españolas y una solicitud de patente internacional PCT enmarcadas dentro del área de pilas de combustible. Su labor investigadora ha dado lugar a un total de 25 comunicaciones a congresos en su mayoría internacionales, y 27 publicaciones científicas, un 75% de las cuales están publicadas en revistas del primer tercio de su sección del JCR de entre las que destacan: Journal of Catalysis, Chemistry of Materials, Applied Catalysis B: Environmental, Carbon, Applied Catalysis A: General, Catalysis Today o Journal of Organic Chemistry, presentando un índice h de 9. De entre estas publicaciones destacan 5 artículos que han sido TOP25 Hottest Articles del Scindirect en los últimos años. Además, ha co-dirigido una tesis doctoral para el estudio de electrocatalizadores en la oxidación del metanol mediante la funcionalización del soporte (2007), obteniendo la máxima calificación, y actualmente es co-directora de otra tesis doctoral en el Instituto de Catálisis y Petroleoquímica, para el estudio de catalizadores ternarios para pilas de combustible de membrana polimérica, cuyo DEA fue presentado el pasado mes de noviembre. Destacar que la candidata colabora habitualmente como "referee" o evaluadora en varias revistas científicas internacionales dentro del área de tecnología química (Applied Catalysis B: Environmental, Catalysis Today, Materials Chemistry and Physics, Electrochemistry Communications).



MINISTERIO
DE CIENCIA
E INNOVACIÓN

**SUBPROGRAMA RAMON Y CAJAL
CONVOCATORIA 2008**

Nombre: ESTEVE NÚÑEZ, ABRAHAM

Referencia: RYC-2008-03376

Area: Tecnología Química

Número de orden: 8 **Correo electrónico:** estevena@inta.es

Título:

Producción de electricidad e hidrógeno a partir de aguas residuales, mediante el uso de células de combustible microbianas

Resumen de la Memoria:

El uso de los combustibles fósiles, especialmente el petróleo y el gas, ha disparado una crisis energética global, despertando el interés por obtener formas de energía renovables con mínimo impacto sobre el medio ambiente. Otro de los problemas de la sociedad actual es la enorme y creciente producción de residuos y la necesidad de tratarlos de forma eficiente. La finalidad de este proyecto es intentar ofrecer una solución biotecnológica para ambas necesidades, aprovechar la energía química contenida en los residuos y convertirla directamente en electricidad, y finalmente en hidrógeno, mediante una innovadora tecnología basada en el uso de células de combustible operadas por microorganismos. El concepto de energía renovable se ha visto recientemente alterado con el descubrimiento de las bacterias del género *Geobacter*. Estos microorganismos naturales son capaces de oxidar la materia orgánica, y transferir los electrones directamente sobre materiales conductores como el grafito, en células de combustibles microbianas (MFC) donde es posible generar electricidad útil. Recientemente, estas MFC han sido adaptadas, haciendo anaerobia la cámara del cátodo, y convertidas en Bioelectrochemically Assisted Microbial Reactors (BEAMR) con el propósito de generar hidrógeno en el cátodo a partir de la reducción de protones. Estos novedosos dispositivos bioelectroquímicos pueden utilizar distintos tipos de combustible, que van desde compuestos sencillos como el acetato o la glucosa hasta mezclas complejas. El objetivo de esta propuesta es utilizar *Geobacter* como catalizador biológico en dispositivos MFC y BEAMR, con el propósito de transformar la materia orgánica de aguas residuales en electricidad e hidrógeno. Uno de los atractivos de esta tecnología es convertir al residuo en el propio generador de la energía empleada en su tratamiento. Asimismo, sería interesante poder sustituir el clásico tratamiento metanogénico de aguas residuales, por uno bioelectroquímico que generara hidrógeno, un vector energético sin impacto negativo en el medio ambiente.

Resumen del Curriculum Vitae:

Abraham Esteve Núñez (Murcia, 1972) es Licenciado en Bioquímica por la Universidad de Murcia (1995) y Doctor en Bioquímica (Premio Extraordinario) por la Universidad de Granada (2000). Su carrera científica ha sido desarrollada en 6 instituciones de reconocido prestigio, ubicadas en cuatro países diferentes. Su actividad científica comenzó como becario Erasmus en la Universidad de Utrecht (Holanda). Su proyecto de tesis doctoral fue realizado en la Estación Experimental del Zaidín (CSIC), donde estudió la biodegradación anaerobia del nitroaromático explosivo 2,4,6-trinitrotolueno (TNT) por bacterias, y es coautor de la patente que explota el tratamiento en biorreactores. Financiado por una ESF fellowship realizó una estancia en el Dept. de Microbiología de la Universidad de Konstanz (Alemania), donde profundizó en las biodegradación anaerobia de xenobióticos nitroaromáticos. Realizó una estancia postdoctoral en el Environmental Biotechnology Center de la Universidad de Massachusetts (Amherst, 2001-2005) financiada en sus dos primeros años por una beca postdoctoral (MEC). Este centro es el reconocido líder mundial en la investigación de *Geobacter*, el microorganismo propuesto para generar electricidad en las células de combustible microbianas (MFC) descritas en su propuesta de trabajo como RyC. En su postdoc, optimizó el cultivo de este microorganismo en biorreactores operando en condiciones estanco y continuo; profundizó en distintas propiedades como catalizador redox como reductor de metales, y participó activamente en la modelización in silico del metabolismo redox de *Geobacter* en colaboración con la empresa Genomatica (San Diego, US); actividades que fueron enteramente financiadas por el Departamento de Energía estadounidense (DOE, US). Asimismo, ha desarrollado y patentado, como primer autor, una tecnología basada en espectroscopía fluorescencia que permite estudiar in vivo la interacción redox entre la bacteria y aquellas superficies que puedan aceptar electrones de esta bacteria. Tras su incorporación al Centro de Astrobiología (2005) ha empezado una línea de investigación, que ya ha generado dos publicaciones, destinada a utilizar *Geobacter* para producir electricidad e hidrógeno a partir de residuos orgánicos, en células microbianas de combustible (MFC). Su producción científica ha quedado reflejada en 20 artículos publicados (y otros 3 más enviados) en revistas internacionales de alto impacto, 4 capítulos de libro. La transferencia tecnológica de su trabajo queda demostrada por la obtención de dos patentes. En el ámbito académico tiene experiencia como único responsable y docente de la asignatura Biorreactores de quinto curso de la licenciatura de Biotecnología en la Universidad Francisco de Vitoria. También ha participado activamente en cursos de postgrados organizados por la Universidad Complutense de Madrid, la Universidad Autónoma de Barcelona y la Internacional Antonio Machado (Baeza). En la actualidad es IP de proyectos solicitados al Plan Nacional I+D+i, y al Séptimo programa Marco. En los últimos años ha sido invitado como conferenciante en centros internacionales de reconocido prestigio, participa en procesos de revisión para revistas especializadas, y como evaluador de proyectos para la National Science Foundation (US), Fundação para a Ciência e a Tecnologia (Portugal) y la Fundación BBVA (España).



MINISTERIO
DE CIENCIA
E INNOVACIÓN

**SUBPROGRAMA RAMON Y CAJAL
CONVOCATORIA 2008**

Nombre: GONZÁLEZ DE PRADO, BEGOÑA

Referencia: RYC-2008-02388

Area: Tecnología Química

Número de orden: 9 **Correo electrónico:** BGP@UVIGO.ES

Título:

Los líquidos iónicos y sus aplicaciones industriales

Resumen de la Memoria:

La investigación realizada en los últimos años en líquidos iónicos ha experimentado un notable impulso, siendo considerada por la U.S. Environmental Protection Agency uno de los campos de investigación prioritarios del siglo XXI. Una de las aplicaciones más importantes de los líquidos iónicos es su empleo como agentes de separación en procesos de extracción. El objetivo principal de la línea actual de investigación, es el estudio de los líquidos iónicos y su aplicación a procesos de extracción líquido-líquido como agentes de separación de bajo impacto ambiental. Con este fin, se realizará la síntesis de diversos compuestos, variando los radicales del catión y considerando diferentes aniones, realizándose la determinación de las propiedades físicas (densidad, viscosidad, índice de refracción, etc.) para caracterizar los compuestos y analizar la evolución de dichas propiedades para cada familia. Posteriormente, se realizará el estudio de las propiedades físicas mencionadas de las mezclas (líquido iónico+mezcla de interés industrial) y de los equilibrios líquido-líquido y líquido-vapor. En función de estos resultados, se elegirán los agentes separadores adecuados para sustituir a los disolventes, de elevado impacto ambiental, utilizados en la actualidad en algunos procesos de extracción, y se pondrá a punto un proceso continuo de extracción líquido-líquido con recuperación del líquido iónico por destilación a vacío. Los datos experimentales obtenidos en el proceso de extracción y recuperación del líquido iónico se contrastarán con los calculados mediante programas de simulación desarrollados previamente. Con estos se conseguirá una amplia base de datos experimentales de propiedades físicas que será esencial a la hora de determinar parámetros de correlación para las ecuaciones NRTL y UNIQUAC, pero sobre todo será fundamental para la creación de una nueva matriz de parámetros para la ampliación de los métodos de predicción basados en la contribución de grupos UNIFAC y ASOG y sus modificaciones.

Resumen del Curriculum Vitae:

En el año 2000 comienza mi carrera investigadora con mi incorporación al grupo de investigación Procesos de Separación Avanzada de la Universidad de Vigo, bajo la dirección del Catedrático D. José Tojo Suárez y la Profesora titular Dña. Ángeles Domínguez Santiago, realizando tareas de investigación en la determinación experimental de propiedades físicas y del equilibrio entre fases de mezclas multicomponentes y la puesta a punto y ampliación de programas de predicción mediante métodos basados en contribución de grupos. Defendí mi Tesis Doctoral en la Universidad de Vigo obteniendo una calificación de sobresaliente cum laudem y el Premio Extraordinario de Doctorado en Química en el Área de Tecnología adjudicado por la Universidad de Vigo en el curso 2004-2005. Durante estos años he estado financiada por el Ministerio de Educación y Ciencia (MEC) con una beca predoctoral de FPI, beca que me ha permitido realizar labores de docencia en la Universidad de Vigo. Después de la realización de la tesis doctoral empecé una nueva línea de investigación enfocada al estudio de los líquidos iónicos y su utilización como agentes de separación. Para el desarrollo de esta nueva línea de investigación se compaginó el trabajo en el Laboratorio de Separación Avanzada con estancias en centros extranjeros junto a investigadores de reconocido prestigio. Realicé mi primera estancia posdoctoral en el Laboratory of Separation and Reaction Engineering (LSRE) de la Universidad de Porto, bajo la supervisión de la Dra. Eugenia Macedo, doctora con una reconocida experiencia en el tratamiento de disoluciones de sales, tanto desde el punto de vista experimental como en el desarrollo de modelos termodinámicos. Motivada por la destacada experiencia de los doctores Marcelo Castier y Marcio Cardoso en la predicción de propiedades físicas de disoluciones electrolíticas así como en simulación de procesos de separación avanzada, disfruté de una segunda estancia en la Universidad Federal de Río de Janeiro. Tras mi vuelta de la estancia en Brasil, y gracias a la concesión de una beca posdoctoral (MEC) he continuado hasta finales de Diciembre de 2007 mi estancia posdoctoral con la Dra. Macedo en la Universidad de Porto. Actualmente estoy disfrutando desde finales de 2007 de un contrato con la Universidad de Vigo dentro del Programa Ángeles Alvariño de la Xunta de Galicia, que me permite ampliar mi experiencia investigadora en la separación de mezclas utilizando líquidos iónicos mediante equilibrio líquido-líquido, además de terminar el trabajo empezado con la Dra. Macedo en la Universidad de Porto. En estos casi 8 años mi labor investigadora ha estado ligada a 4 proyectos nacionales y 1 autonómico, dando lugar a la participación en la publicación de un capítulo de un libro y en 10 congresos, 9 internacionales y 1 nacional, 7 de ellos como comunicación póster y otros 3 como comunicación oral. Por último, soy coautora de 23 artículos en revistas internacionales, de las cuales existen unas 87 citas en la literatura, donde todas excepto una se encuentran en el primer tercio de mayor índice de impacto de su área de conocimiento. Añadir que, además de los artículos ya citados, 2 artículos están siendo evaluados en revistas del JCR.