# Utilización de adsorbentes para beneficio de la sociedad

Seguramente ha oído hablar del término «absorción», pero ¿está familiarizado con el concepto de «adsorción»? En la Universidad de Notre Dame en Indiana, EE. UU., el Dr. Yamil Colón, ingeniero químico y biomolecular, se dedica al estudio de este importante proceso químico. Su trabajo podría tener un gran impacto en la investigación de la salud, el cambio climático, el medio ambiente y la escasez de agua, lo que podría ser muy beneficioso para la sociedad.





Dr. Yamil Colón

Profesor ayudante doctor de Ingeniería Química y Biomolecular, Facultad de Ingeniería, Universidad de Notre Dame, EE. UU.

#### Campos de investigación

Ingeniería Química y Biomolecular, Descubrimiento y Diseño Computacional de Materiales

#### Proyecto de investigación

Modelización de la adsorción de gases en materiales sólidos para encontrar nuevos materiales adsorbentes

#### **Financiadores**

Fundación Nacional para la Ciencia de EE. UU. (US National Science Foundation - NSF), Departamento de Energía de EE. UU. (US Department of Energy - DOE), Fondo de Investigación del Petróleo de la Sociedad Química Americana (American Chemical Society Petroleum Research Fund)

Este trabajo ha sido financiado por la Fundación Nacional para la Ciencia de EE. UÜ. (National Science Foundation) con la beca NSF CAREER CBET-2143346. El contenido es responsabilidad exclusiva de los autores y no representan necesariamente las opiniones oficiales de la NSF.

Hable como un...

## ingeniero químico y biomolecular

**sorción:** un tipo de proceso en el cual las partículas son transferidas hacia otro material.

#### Aprendizaje activo (AL): un

caso especial de aprendizaje automático en el cual un algoritmo puede elegir los datos de los que desea aprender y cuestionar una fuente de información.

Adsorción: proceso mediante el cual las partículas son transferidas a la superficie de otro material.

prendizaje automático AM): sistemas informáticos que pueden aprender y adaptarse sin requerir instrucciones explicitas de los humanos.

Poroso: que contiene pequeños espacios o agujeros por los cuales pueden pasar líquidos o gases.

Agua potable: agua adecuada para el consumo humano.

Escasez: estado de falta o carencia.

Sorbente: sustancia capaz de recoger moléculas de otra sustancia mediante adsorción o absorción.

Proceso de sorción: proceso en el cual una sustancia se adhiere a otra.

unque suenen parecido, la absorción y la adsorción son dos conceptos distintos. Ambos son procesos de sorción, en los cuales una sustancia se adhiere a otra. Sin embargo, se diferencian en que en la absorción las partículas se transfieren hacia otro material, mientras que, en la adsorción, las partículas se adhieren a la superficie de otro material.

La adsorción permite capturar y separar moléculas. «La adsorción es un proceso común en nuestro día a día», explica el Dr. Yamil Colón, de la Facultad de Ingeniería de la Universidad

de Notre Dame. «Ocurre en diversos entornos industriales y biológicos, como la administración de fármacos, la producción de energía o la captura de agua, por mencionar algunos ejemplos», prosigue. Un caso cotidiano de adsorción es el uso de pequeños paquetes de gel de sílice que se encuentran comúnmente en los envases de aparatos electrónicos, zapatos o alimentos. El gel de sílice adsorbe la humedad, evitando que estos artículos se dañen por efecto de la misma.

#### ¿Por qué es importante la adsorción?

La adsorción va más allá de simplemente

capturar agua; sorprendentemente, también puede utilizarse en el diagnóstico y resolución de problemas de salud. «En el ámbito de la salud, los nuevos adsorbentes pueden ser de gran ayuda en diagnósticos y tratamientos», explica Yamil. Por ejemplo, los dispositivos nasales electrónicos, comúnmente conocidos como eNose, utilizan la adsorción para analizar las moléculas presentes en el aliento exhalado de una persona y detectar compuestos relacionados con enfermedades. «Además, existen adsorbentes capaces de retener y liberar moléculas de interés, como fármacos, lo que puede tener un impacto significativo», agrega Yamil.



#### ¿De qué manera los adsorbentes pueden ser beneficiosos para el medio ambiente?

Los materiales adsorbentes también pueden tener un gran impacto ambiental. En primer lugar, como los sorbentes pueden separar moléculas entre sí, encontrar nuevos sorbentes que puedan hacerlo de la forma más eficiente posible reducirá la energía necesaria para cada separación. «Esto se traduce directamente en un menor uso de combustibles fósiles», sostiene Yamil.

La adsorción también puede ser de gran ayuda en la captura de carbono, ya que los nuevos sorbentes pueden capturar carbono directamente del aire y de las corrientes de gas. La captura de carbono consiste en atrapar y almacenar el dióxido de carbono producido por la quema de combustibles fósiles u otros procesos antes de que afecte a la atmósfera. Esta técnica puede contribuir a mitigar los efectos del calentamiento global. Además, algunos materiales adsorbentes tienen la capacidad de capturar agua de la atmósfera. Esta capacidad de capturar y producir agua potable puede marcar una gran diferencia en áreas con frecuentes sequías y escasez de fuentes de agua. «Los nuevos materiales adsorbentes también pueden emplearse para eliminar contaminantes de corrientes de agua contaminadas», explica Yamil.

#### ¿En qué está trabajando Yamil?

Yamil lidera un grupo de investigación que se enfoca en estudiar las interacciones entre diferentes tipos de gases y los materiales a los que se adhieren (o adsorben). Su objetivo es comprender mejor el proceso de adsorción y descubrir nuevos materiales adsorbentes.

### ¿Por qué es importante identificar nuevos adsorbentes?

Para que la adsorción sea útil en cuestiones sanitarias y medioambientales, los científicos deben desarrollar nuevos materiales adsorbentes que sean más eficientes en términos de energía. «La identificación de nuevos adsorbentes es esencial para avanzar tecnológicamente en áreas como la salud, el cambio climático y la escasez de agua», explica Yamil. «La adsorción puede ser utilizada para enfrentar los desafíos actuales relacionados con la captura de carbono y la seguridad del agua, pero necesitamos

nuevos adsorbentes que puedan cumplir con las demandas de rendimiento en términos de capacidad y eficiencia energética.», concluye.

#### Comprender el proceso de adsorción

Otro de los objetivos del grupo de investigación es lograr una mejor comprensión de lo que sucede durante la adsorción. Para ello, el equipo de Yamil tiene como propósito crear un modelo universal de adsorción de gases que prediga con exactitud la cantidad de gas que se adsorbe en un material. «Este modelo será una herramienta técnica crucial para avanzar en el ámbito de la administración de fármacos, la producción de energía, el almacenamiento de energía, la captura de agua atmosférica y las tecnologías de captura de carbono», afirma Yamil.

# ¿Cómo realiza el equipo esta investigación?

Yamil y su equipo emplean la ciencia de datos, la mecánica estadística y potentes herramientas de modelización computacional y aprendizaje automático (ML) para profundizar en el estudio de la adsorción y descubrir y diseñar nuevos materiales porosos.

El equipo busca materiales porosos debido a que los poros proporcionan superficie para la adsorción dentro del material y pueden almacenar cantidades significativas de gas. «Además, las interacciones en los poros pueden adaptarse para atraer ciertos gases en lugar de otros, lo que permite utilizarlos como plataforma para realizar separaciones», agrega Yamil. Es aquí donde las herramientas de modelización molecular entran en juego. Los científicos utilizan modelos moleculares, conocidos como simulaciones moleculares, para analizar cómo funcionan. También encajan las moléculas, lo que les permite comprender mejor sus funciones, procesos y vías. «Las simulaciones moleculares nos ayudan a caracterizar y diseñar las interacciones que ocurren en los poros, con aplicaciones en almacenamiento de hidrógeno, almacenamiento de metano, captura de agua y separación de gases», explica Yamil.

Posteriormente, el equipo combina estas simulaciones moleculares con algoritmos de aprendizaje activo (AL). Estos algoritmos permiten a los investigadores desarrollar modelos que

describan un espacio completo de adsorción, incluso con una cantidad limitada de datos de ese espacio. «El aprendizaje activo dirige nuestras simulaciones moleculares hacia las condiciones más relevantes, como temperatura, presión y composición, para desarrollar modelos precisos que describan un proceso de adsorción específico», aclara Yamil.

#### ¿Qué tiene de nuevo esta técnica?

La novedad de esta técnica radica en que las simulaciones moleculares utilizadas para describir la adsorción suelen requerir una gran cantidad de datos. Realizar simulaciones de múltiples moléculas en diversas condiciones, como temperaturas, presiones y otros factores de funcionamiento, puede ser un proceso que consuma muchos recursos. Es por eso que la idea del grupo de investigación de combinar estas simulaciones moleculares con algoritmos de aprendizaje activo (AL) resulta sumamente importante.

«Hemos demostrado que la combinación de AL con nuestras simulaciones moleculares puede ayudarnos a reducir la cantidad de simulaciones necesarias para obtener las propiedades que buscamos, como la temperatura, la presión y las composiciones», asegura Yamil.

# ¿Qué más hace el equipo del proyecto?

El grupo de investigación también otorga una gran importancia a la divulgación y educación, para que personas ajenas al grupo puedan conocer su trabajo. «Esto incluye el diseño de cursos para aumentar la alfabetización en aprendizaje automático; recibir a profesores de STEM de enseñanza media en nuestro campus para crear materiales didácticos sobre probabilidad y estadística; y traducir al español materiales didácticos de enseñanza media para compartirlos con la comunidad local y en Puerto Rico», explica Yamil.

Además, Yamil y su equipo tienen como objetivo desarrollar modelos más complejos que les permitan estudiar lo que ocurre con el material adsorbente a medida que se produce la adsorción.

# Acerca de la ingeniería química y biomolecular

i le apasionan la química, la física, la biología y las matemáticas, y tiene un interés en aprender cómo funcionan las cosas a pequeña escala, debería pensar en realizar una carrera en ingeniería química y biomolecular. Los ingenieros resuelven algunos de los problemas más urgentes del mundo aplicando técnicas de ingeniería, bioquímica, biología celular y química orgánica a nivel molecular. Trabajan en una amplia variedad de temas, desde el desarrollo de energías sostenibles y la reducción del uso de combustibles fósiles, hasta el avance de nuevas tecnologías para investigar nuestro cerebro y comprender cómo las enfermedades afectan nuestro organismo.

El deseo de ayudar a los demás es fundamental para trabajar en este campo, ya que la investigación puede tener un impacto significativo en miles de vidas. «Lo más gratificante de la investigación en este campo es la perspectiva de desarrollar tecnologías de gran impacto social mejorando los conocimientos científicos fundamentales», afirma Yamil. Por ejemplo, a medida que nuestro mundo enfrenta los desafíos del cambio climático, los ingenieros químicos y biomoleculares se esfuerzan por encontrar nuevas formas de suministrar agua dulce a comunidades con escasez de recursos y crear métodos de transporte que sean amigables con el medio ambiente.

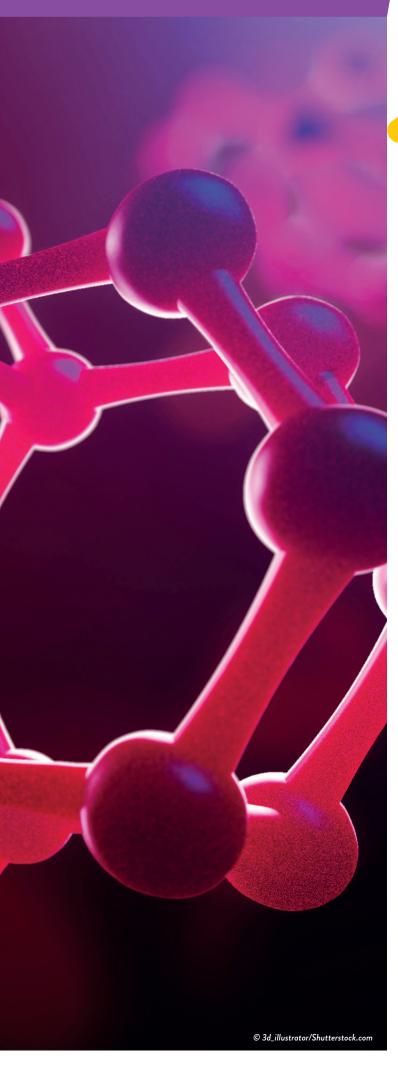
La próxima generación de ingenieros químicos y biomoleculares también tendrá una amplia gama de oportunidades y preguntas de investigación gracias al uso de herramientas de aprendizaje automático e inteligencia artificial. «Dos áreas destacadas de oportunidad son la reducción de las escalas temporales y longitudinales en investigaciones multiescala y el desarrollo de nuevas formas de aprovechar los algoritmos en entornos experimentales y de procesamiento», destaca Yamil. ¡Es un momento apasionante para estudiar la carrera de ingeniería química y biomolecular!

# **De la escuela a la** ingeniería química y biomolecular

- Cuando tenga más de 16 años, en la escuela recibirá clases de química, física, matemáticas y biología. Puede optar por una carrera universitaria en ingeniería química, química, ingeniería biomolecular, bioquímica o ingeniería biomédica. Estos cursos tendrán un plan de estudios básico, pero Yamil sugiere también tomar clases avanzadas de probabilidad y estadística, si es posible.
- Aunque las clases de ciencias y matemáticas son importantes, Yamil también recomienda encarecidamente tomar cursos orientados a mejorar las habilidades de comunicación oral, visual y escrita. «Pueden ser cursos como teatro o escritura creativa», explica. Estas clases le proporcionarán las habilidades necesarias para explicar sus descubrimientos científicos a los demás, de modo que su trabajo pueda ser utilizado y aplicado en diferentes campos.
- Durante su licenciatura, intente adquirir experiencia profesional en este campo. Busque empleo o hágase voluntario como becario o asistente de investigación en un laboratorio. Pregunte a sus profesores si conocen algún lugar donde pueda obtener experiencia práctica.
- Para trabajar en el campo de la investigación en ingeniería química y biomolecular, deberá realizar un doctorado después de completar la licenciatura. Yamil, por ejemplo, completó su doctorado en la Northwestern University antes de unirse al cuerpo docente de Notre Dame.
- Lea este artículo para conocer cómo Yamil llegó a donde está hoy: www.nd.edu/stories/from-here-to-there

# **Explore las carreras de** ingeniería química y biomolecular

- La Institución de Ingenieros Químicos (Chemical Engineers) tiene una página excelente sobre ingeniería química dirigida a futuros estudiantes, que incluye entrevistas del tipo «Conozca al ingeniero» (Meet the Engineer), preguntas frecuentes e información sobre cómo elegir el programa universitario adecuado. También ofrece una lista de todas las titulaciones de ingeniería química acreditadas en todo el mundo: www.icheme.org/education/whynotchemeng
- Visite el sitio web del grupo de investigación de Yamil (www.computationalnano.org), donde encontrará grabaciones interesantes e informativas de seminarios web y presentaciones que le darán una idea de cómo es trabajar en ingeniería química y biomolecular.
- La Facultad de Ingeniería de la Universidad de Notre Dame organiza el Engineering Exploration High School Camp. Este campamento de un día introduce a estudiantes de los grados 10 a 12 a una amplia gama de temas de ingeniería a través de actividades prácticas: engineering.nd.edu/news/firstengineering-explorationsummer-camp-for-area-high-schoolstudents
- Visite el sitio web de The Chemical Engineer para obtener noticias e información sobre empleos en ingeniería química, bioquímica y de procesos: www.thechemicalengineer.com
- Según Indeed.com, el salario medio anual en Estados Unidos para un ingeniero químico o ingeniero biomolecular ronda los 94 000 USD.





# ¿Quién o qué le inspiró para convertirse en científico?

Mis padres me inspiraron para ser científico. Mi mamá era profesora de ciencias en un instituto y mi papá trabajaba como editor digital en una cadena de televisión local de Puerto Rico. Pude ver y experimentar la ciencia y la ingeniería a través de sus profesiones.

## ¿Qué experiencias le han formado como científico?

Las experiencias que me han moldeado se remontan a mis profesores y mentores del instituto, que siempre me brindaron su apoyo. Su pasión por la ciencia y su calidad como seres humanos han sido profundamente influyentes. También me enseñaron que se puede hacer lo que a uno le parece genial y, al mismo tiempo, buscar respuestas a las necesidades tecnológicas de la sociedad.

#### ¿Qué significa para usted haber sido galardonado con el premio CAREER (Faculty Early Career Development Program) de la NSF?

Recibir el premio CAREER de la NSF es un voto de confianza de la comunidad científica a la importancia de las ideas que estamos explorando y de nuestros esfuerzos de divulgación. También es un reconocimiento al arduo trabajo de los miembros de mi grupo, quienes han puesto una gran cantidad de esfuerzo para hacer posible lo que hacemos.

# ¿De qué otros logros se siente especialmente orgulloso?

Me enorgullece haber sido invitado al Simposio Japan-America Frontiers of Engineering de la Academia Nacional de Ingeniería en 2023. Creo firmemente que enfrentar los desafíos científicos actuales requiere colaboración internacional, y esta conferencia será fundamental para establecer una red de colaboradores que nos permita lograr precisamente eso.

#### ¿Cuáles son sus ambiciones para el futuro?

Mi ambición es liderar equipos internacionales y esfuerzos de investigación para abordar los desafíos técnicos más apremiantes de la sociedad, al tiempo que educo y guío a la próxima generación de investigadores.

#### Los mejores consejos de Yamil

- 1. Involúcrese en distintos tipos de investigación para descubrir lo que le gusta y lo que no.
- Busque enriquecer su aprendizaje con clases fuera de su especialidad; le ayudarán a apreciar diferentes perspectivas y puntos de vista. Ese tipo de aprendizaje puede ser inestimable y fuente de enfoques nuevos y creativos.