

Córdoba, 15 de agosto del 2025

Sra. Decana de la
Facultad de Ciencias Químicas
Dra. Silvia CORREA
S _____ / _____ D

Tengo el agrado de dirigirme a usted y por su intermedio al
HCD de la Facultad de Ciencias Químicas, a fin de solicitar la autorización
pertinente para el dictado del Curso de Doctorado de formación específica
titulado “*Sistemas basados en mezclas eutécticas. Fundamentos y aplicaciones*”.

A tal efecto adjunto toda la documentación requerida.

A la espera de una respuesta favorable y con el visto bueno
del Consejo Departamental.

Sin otro particular, saluda atentamente.



Dr. Jorge G. Uranga

CURSO DE DOCTORADO

Sistemas basados en mezclas eutécticas. Fundamentos y aplicaciones

OBJETIVOS Y ALCANCE DEL CURSO

Las mezclas eutécticas de solventes (DES) han emergido como una alternativa sostenible a los solventes convencionales para aplicaciones tecnológicas e industriales. Estos solventes presentan numerosas ventajas entre las cuales se destacan: su origen renovable, biocompatibilidad, reciclabilidad, fácil preparación, bajo costo, baja presión de vapor y amplia estabilidad térmica. Adicionalmente, la variación en la composición de estas mezclas permite modular sus propiedades mediante metodologías conocidas como ingeniería de solventes.

Más allá de su auge, la comprensión de las aplicaciones actuales y el diseño de potenciales usos requiere un conocimiento de estos líquidos a nivel molecular. Por este motivo, el objetivo de este curso es comprender en detalle la teoría detrás de estas mezclas y explorar sus características y aplicaciones.

En este curso se introducirán los principios fundamentales que rigen la formación y las propiedades únicas de los DES y sus versiones de origen natural (NADES), desde su composición molecular hasta sus características fisicoquímicas. Se analizará el diseño y preparación de estos materiales líquidos, como así también diversas aplicaciones de las mezclas eutécticas, mostrando los últimos avances en el área. Se describirán diferentes aplicaciones químicas y biotecnológicas asistidas por estos solventes. El contenido del curso también incluye el estudio de fundamentos de nuevos materiales basados en DES (eutectogéles) y sus principales aplicaciones.

Finalmente, se discutirán casos desarrollados tanto en la academia como en la industria. Para lograr esto, se contará con la participación de investigadores nacionales e internacionales expertos en el área.

DESTINADO A

Egresados universitarios cursando carreras de posgrado o con interés por alguna de las múltiples aplicaciones de las mezclas eutécticas.

Profesionales, técnicos y analistas de laboratorios que recién comienzan a trabajar en el desarrollo de química de flujo continuo o que en un futuro deban utilizarla.

Para el personal del laboratorio de empresas e institutos de investigación interesados en iniciarse o profundizar conocimientos en las potencialidades de estas mezclas.

PROGRAMA

1. Introducción a los DES.

- a) Principios básicos: definición, propiedades fisicoquímicas, preparación. Componentes, caracterizaciones y clasificación.
- b) Mezclas de origen natural (NADES), solventes hidrofílicos e hidrofóbicos, terapéuticos (THEDES), solventes responsivos (RDES) a gases, temperatura y pH.
- c) Ventajas y limitaciones de los NADES. Aspectos prácticos en el diseño y síntesis de DES.

2. Aplicaciones de DES

- a) Captura de gases de efecto invernadero y otros contaminantes ambientales. NADES como esponjas de CO₂ y I₂. Ventajas y desventajas de estos materiales.
- b) Almacenamiento de energía. Materiales de recubrimiento de DSSC. Integración a materiales basados en Perovskite. Efecto en la permeación de la luz y resistencia.
- c) Recuperación de Materias Primas Críticas (CRMs). Sistemas hidrofóbicos extractivos para recuperación de REEs. Aplicaciones en la recuperación de Litio.
- d) Síntesis de nanomateriales. NPs metálicas. Efecto en tamaño, estabilización y oxidación. Utilidad como catalizadores de procesos.
- e) Electroquímica y Electrosíntesis en DES. Ventana de potencial, efecto iónico y catalítico. Ejemplos.
- f) Aplicaciones no académicas de NADES. Aplicaciones Green Tech en Agricultura, Alimentos y Cosmética.

3. Aplicación en Síntesis Orgánica y Catálisis

- a) NADES como medio de reacción. Ventajas de los NADES en reacciones orgánicas. Reacciones multicomponente. Reacciones de oxidación y reducción. Reacciones de ciclización. Ejemplos relevantes en Química Medicinal y diseño de nuevos fármacos.
- b) NADES como medio y catalizador. Principales mecanismos de catálisis. NADES ácidos. Agentes deshidratantes. Reacciones de adición y condensación. Reacciones de hidrólisis: degradación de biomasa, saponificación, biodiesel. NADES como reactivo.

4. Aplicaciones para el desarrollo de materiales

- a) Geles iónicos blandos: Síntesis, caracterización y aplicaciones. Eutectogeles e ionogels.
- b) Influencia del uso de DES en procesamiento y propiedades de materiales
- c) Aplicaciones de NADES en el área de los alimentos. Sistemas de extracción y desarrollo de materiales de recubrimiento

5. Herramientas computacionales en el estudio de DES a nivel molecular

- a) Modelado molecular cuántico. Bases teóricas. Optimización de componentes de un DES. Análisis de interacciones moleculares. Energía de formación. Procesos de transferencia de carga. Propiedades termodinámicas. Interacciones DES-soluto. Efecto de co-solvente.
- b) Simulaciones computacionales. Bases teóricas. Propiedades físicas: densidad, capacidad calorífica, tensión superficial y viscosidad. Ordenamiento molecular. función de distribución radial (RDF), función de distribución espacial (SDF) y factor de estructura (Sq). Difusión de componentes. Desplazamiento cuadrático medio (MSD) y coeficiente de difusión (D). Dinámica de un soluto y co-solvente en un DES.
- c) Modelos de predicción. Predicción de propiedades físicas y solubilidad.

DURACIÓN

40 h. Cinco días de 9:00 a 18:00

LUGAR

Teóricos: Sala de conferencias Edificio Integrador Prácticos: --

FECHA: del 2 al 7 de noviembre de 2025

	Lunes	Martes	Miércoles	Jueves	Viernes
Mañana	M. Teórico Tema 1	M. Teórico Tema 2	M. Teórico Tema 3	M. Teórico Tema 4	M. Teórico Tema 5
Tarde	M. Teórico Tema 1	M. Teórico Tema 2	M. Teórico Tema 3	M. Teórico Temas 4 y 5	Discusión integradora de problemas científicos

DIRECTOR: Prof. Matteo Bonomo (Prof. Asociado Universidad la Sapienza, Roma)

COORDINADORES: Dr. Jorge G. Uranga (Investigador Adjunto INFIQC-CONICET) y

Dr. Agustín Gonzalez (Investigador Adjunto IPQA-CONICET)

COLABORADORES NACIONALES (modalidad presencial):

Dr. Guillermo Copello (Inv. Independiente (IQUIMEFA-CONICET, UBA)

Dr. Javier Bardagi (Prof. Adjunto FCQ-UNC, Inv. Adjunto INFIQC-CONICET)

Dr. Pablo Mercadal (Prof. Asistente FCA-UNC, Becario Posdoctoral IPQA-CONICET)

Dr. José Luis Borioni (Prof. Asistente FCQ-UNC, Inv. Asistente INFIQC-CONICET)

Dra. Paula Uberman (Prof. Adjunta FCQ-UNC, Inv. Adjunta INFIQC-CONICET)

Dra. Cynthia Rivela Fretes (Prof. Asistente FCQ-UNC, Inv. Asistente INFIQC-CONICET)

COLABORADORES INTERNACIONALES:

Dr. Matteo Bonomo (Universidad La Sapienza, Roma, Italia)

Dr. Matias Picchio (POLYMAT, Universidad del País Vasco, España)

Dr. Federico Gomez (CTO, Bioeutectics, Oklahoma, USA)

Dr. Joaquin Arata Badano (Becario postdoctoral, Universidad Tor Vergara, Roma)

EVALUACIÓN

Examen integrador al finalizar el curso.

REFERENCIAS

- (1) Deep Eutectic Solvents 1st Edition - November 27, 2024 Imprint: Elsevier Editors: Mohammad Jawaaid, Indra Bahadur, Prashant Singh, Jamal Akhter Siddique Language: English Paperback ISBN: 9780443219627 eBook ISBN: 9780443219634
- (2) Deep Eutectic Solvents, Principles, Applications and toxicity. Copyright © 2022 by Nova Science Publishers, Inc. <https://doi.org/10.52305/IWUI3187>
- (3) Deep Eutectic Solvents: A Review of Fundamentals and Applications. *Chem. Rev.* 2021, 121, 3, 1232–1285.
- (4) Deep Eutectic Solvents (DESS) and Their Applications. *Chem. Rev.* 2014, 114, 11060–11082
- (5) Green and sustainable solvents of the future: Deep eutectic solvents. *Journal of Molecular Liquids*, 379, 2023, 121676.

- (6) Can the microscopic and macroscopic transport phenomena in deep eutectic solvents be reconciled? *Phys. Chem. Chem. Phys.*, 2021, 23, 22854.
- (7) Perspectives and guidelines on thermodynamic modelling of deep eutectic solvents. *Journal of Molecular Liquids* 298 (2020) 112183.
- (8) Theoretical investigation on the structure and physicochemical properties of choline chloride-based deep eutectic solvents. *Journal of Molecular Liquids* 366 (2022) 120243.
- (9) Ab initio molecular dynamics simulations of SO₂ solvation in choline chloride/glycerol deep eutectic solvent. *Fluid Phase Equilibria* 448 (2017) 59e68.
- (10) Computational insights into deep eutectic solvent design: Modeling interactions and thermodynamic feasibility using choline chloride & glycerol. *Chemical Engineering Journal Advances* 16 (2023) 100564.
- (11) Microstructure of Deep Eutectic Solvents: Current Understanding and Challenges. 2020 *124* (47), 10601-10616.
- (12) Mercadal PA, González A, Beloqui A, Tomé LC, Mecerreyes D, Calderón M, Picchio ML. Eutectogels: The multifaceted soft ionic materials of tomorrow. *JACS Au*. 4(10):3744–3758. doi:10.1021/jacsau.4c00677.
- (13) Tomé LC, Porcarelli L, Bara JE, Forsyth M, Mecerreyes D. Emerging iongel materials towards applications in energy and bioelectronics. *Mater Horiz*. 8(9):3239–3265. doi:10.1039/D1MH01263K.
- (14) Tomé LC, Mecerreyes D. Emerging Ionic Soft Materials Based on Deep Eutectic Solvents. *J Phys Chem B*. 124(39):8465–8478. doi:10.1021/acs.jpcc.0c04769.
- (15) Abranches DO, Coutinho JAP. Everything You Wanted to Know about Deep Eutectic Solvents but Were Afraid to Be Told. *Annu Rev Chem Biomol Eng*. 14(1):141–163. doi:10.1146/annurev-chembioeng-101121-085323.