



XXII

# Congreso Chileno de Ingeniería Química

Innovación para la sustentabilidad

## LIBRO DE RESÚMENES



Escuela de  
**Ingeniería  
Química**



COLEGIO  
DE INGENIEROS  
DE CHILE A.G.

## ÍNDICE

---

PRESENTACIÓN.....	3
COMITÉ ORGANIZADOR .....	4
COMITÉ CIENTÍFICO.....	5
PLENARIAS.....	13
KEYNOTE.....	14
PATROCINADORES Y AUSPICIADORES.....	16
ÁREA TEMÁTICA .....	17
INNOVACIÓN PARA LA SUSTENTABILIDAD .....	17
MEDIO AMBIENTE, ENERGÍA Y RECURSOS HÍDRICOS .....	72
TECNOLOGÍAS PARA LA INDUSTRIA MINERA.....	152
BIOTECNOLOGÍA E INDUSTRIA DE ALIMENTOS .....	186
GALERÍA IMÁGENES .....	251
FOTOGRAFÍA OFICIAL.....	260

## PRESENTACIÓN

---

### Presidente del Comité Organizador

Entre el **27 y el 30 de octubre de 2025**, la **Pontificia Universidad Católica de Valparaíso** fue el punto de encuentro de una comunidad diversa de investigadoras, investigadores, profesionales y estudiantes, unidos por la pasión, la innovación y el compromiso con el progreso, en el marco del **XXII Congreso Chileno de Ingeniería Química**. Dos años después de la versión anterior, realizada en la Universidad de Santiago de Chile, esta nueva cita buscó ir más allá de un evento científico y tecnológico: es un espacio donde dialogan la creatividad, la experiencia y la excelencia, reuniendo tanto a figuras consolidadas como a nuevas generaciones, bajo un objetivo común: *“impulsar y transformar nuestra disciplina en beneficio de la sociedad”*.

El programa contempló **84 presentaciones orales, 173 pósteres, 4 conferencias plenarias, 8 charlas magistrales y más de 270 participantes**. Cada sesión no solo ofrece la oportunidad de compartir avances recientes y resultados de investigación, sino también de reflexionar sobre el papel de la ingeniería química y las áreas afines frente a los retos globales. Al explorar nuevas fronteras y adentrarnos en la frontera del conocimiento, recordamos la misión que nos une: *“convertir los desafíos en oportunidades mediante la ciencia y la innovación”*. Celebramos no solo el conocimiento generado, sino también la colaboración y la fraternidad que caracterizan a nuestra comunidad académica. Con cada exposición y cada diálogo, se refuerzan los lazos entre disciplinas y se construyen los cimientos para las generaciones venideras.

La **ingeniería química** asume un papel estratégico en la transformación hacia la sostenibilidad y el bienestar de la humanidad. En un escenario donde los recursos son limitados y los impactos ambientales demandan atención inmediata, nuestra disciplina se proyecta como motor de cambio hacia prácticas más responsables, innovadoras y respetuosas con el entorno. La capacidad de integrar principios sostenibles no solo responde a las demandas actuales, sino que también contribuye a dejar un legado positivo para el futuro. La sostenibilidad, en este contexto, no es solo un ideal, sino un compromiso firme con la responsabilidad ambiental y con la construcción de un porvenir en que el desarrollo humano conviva en equilibrio con la preservación del planeta.



*Dr. Carlos Carlesi Jara  
Director Escuela de Ingeniería Química  
Pontificia Universidad Católica de Valparaíso*

## COMITÉ ORGANIZADOR

---



Presidente  
Dr. Carlos Carlesi J.



Director Ejecutivo  
Dr. Samuel Carrasco H.



Directora Comité Científico  
Dra. Suleivys Nuñez G.



Director de Vinculación  
Dr. Ernesto Pino C.



Directora de Logística  
Dra. Dreidy Vásquez S.



Director de Finanzas  
Dr. Marcelo León M.



Delegado Relaciones Empresas  
Sr. Jorge Salgado S.



Dr. Erwin Plett  
Presidente de especialidad  
de Ingeniería Química y Biotecnología  
del Colegio de Ingenieros

## COMITÉ CIENTÍFICO

---



Directora

**Comité Científico**

Dra. Suleivys Nuñez González.

Pontificia Universidad Católica de Valparaíso

### Innovación para la sustentabilidad



Dra. Dreidy Vásquez Sandoval

Pontificia Universidad Católica de Valparaíso



Ing. Nicolas Ateaga

Pontificia Universidad Católica de Valparaíso



Dra. Tania Sandoval

Universidad Técnica Federico Santa María



Dr. Julio Romero

Universidad de Santiago de Chile

## COMITÉ CIENTÍFICO

---

### Innovación para la sustentabilidad



Dr. Romel Jimenez  
Universidad de Concepción



Dra. Maria Elena Lienqueo  
Universidad de Chile



Dra. Elodie Blanco  
Pontificia Universidad Católica de Chile



Dra. Mónica Rubilar  
Universidad de La Frontera

## COMITÉ CIENTÍFICO

---

### Medio Ambiente, energía y recursos hídricos



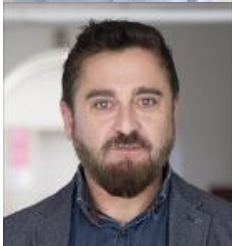
Dra. Lorena Wilson  
Pontificia Universidad Católica de Valparaíso



Dr. Yunesky Masip  
Pontificia Universidad Católica de Valparaíso



Dr. Hector Jorquera  
Pontificia Universidad Católica de Chile



Dr. Claudio Gomez Fuentes  
Universidad de Magallanes

## COMITÉ CIENTÍFICO

---

### Medio Ambiente, energía y recursos hídricos



Dr. Gastón Merlet  
Universidad de Concepción



Dr. Eduardo Villarroel  
Universidad de Las Américas



Dra. Eva Andrea Soto Acevedo  
Universidad de Playa Ancha



Dr. Raydel Manrique  
Universidad Tecnológica Metropolitana



## COMITÉ CIENTÍFICO

---

### Tecnologías para la Industria minera



Dr. Jaime Morales Saavedra  
Pontificia Universidad Católica de Valparaíso



Dr. Pedro Robles  
Pontificia Universidad Católica de Valparaíso



Dr. Gonzalo Quezada  
Universidad del Bío-Bío



Dra. Martha Claros  
Universidad Técnica Federico Santa María

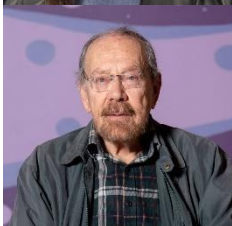
## COMITÉ CIENTÍFICO

---

### Tecnologías para la Industria minera



Dra. Pía Hernández  
Universidad de Antofagasta



Dr. Igor Wilkomirsky  
Universidad de Concepción



Dra. Rossana Sepulveda  
Universidad de Atacama

## COMITÉ CIENTÍFICO

---

### Biotecnología e industria de alimentos



Dra. Constanza Cárdenas  
Pontificia Universidad Católica de Valparaíso



Dra. Fanny Guzmán  
Pontificia Universidad Católica de Valparaíso



Dr. José Luis Campos  
Universidad Adolfo Ibáñez



Dr. Cesar Huiliñir  
Universidad de los Andes



Dr. Sergio Almonacid  
Universidad Técnica Federico Santa María

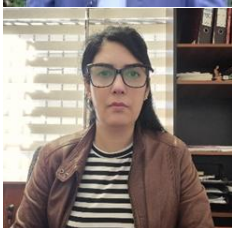
## COMITÉ CIENTÍFICO

---

### Biotecnología e industria de alimentos



Dr. Pedro Valencia  
Pontificia Universidad Católica de Valparaíso



Dra. Jhosané Pagés  
Universidad de Santiago de Chile



Dra. Maria José Larrazabal  
Universidad de Antofagasta



Dra. Nadia Guajardo  
Pontificia Universidad Católica de Chile

## PLENARIAS

---



Sr. Ermann Balde  
“Sector energético de la Región de Valparaíso: oportunidades y desafíos para el futuro”  
Seremi de Energía



Dr. Erwin Plett  
“Nueva industria química sustentable en Chile: la economía del hidrógeno”  
Presidente de especialidad de Ingeniería Química y Biotecnología  
del Colegio de Ingenieros



Dr. Mario Marchese  
“Combustibles Carbono Neutrales, el caso del hidrógeno y sus derivados”  
CIP Molecule Technologies



Dr. Manuel Díaz  
“La Petroquímica en Chile”  
Asociación Petroquímica y Química Latinoamericana

## KEYNOTE

---



Dra. Lidia Auret  
“Computer Vision and Machine Learning for Flotation: Literature Overview, Challenges, and Prospects”  
Universidad de Stellenbosch



Dr. Alex Berg  
“De la Academia a la Empresa: Un camino desafiante y enriquecedor”  
Centro de tecnología e innovación, Universidad de Concepción



Dr. José Zagal  
“Predictores de reactividad de materiales avanzados para el cátodo de oxígeno de celdas a combustible H<sub>2</sub>/O<sub>2</sub>”  
Universidad de Santiago de Chile



Sr. Javier Swinburn  
“Más allá del combustible”  
Gerente de Filiales de Energía de Copec

## KEYNOTE

---



Dra. Katherine Ferrada  
“Minería y Sustentabilidad”  
Angloamerica



Ing. Fabián Ramirez  
“Innovación en minería secundaria”  
Key Process



Dra. Claudia Altamirano  
“Biotecnología y Producción de Biofármacos”  
Pontificia Universidad Católica de Valparaíso



Dra. Catalina Garrido  
“Emprendiendo en biotecnología: la historia de Liva Company”  
Co-fundadora & Directora Liva Company. Scale Up Entrepreneur by  
Endeavor

## PATROCINADORES Y AUSPICIADORES

---



DATANALYSIS



INTERQUIMICA  
www.interquimica.cl

ARQUIMED  
INNOVACION



ANPHOTEROL®  
SOLUCIÓN EFICAZ PARA DETENER EL AVANCE DE QUEMADURAS QUÍMICAS



VIMARONI  
INSUMOS Y EQUIPOS DE LABORATORIO



## ÁREA TEMÁTICA

INNOVACIÓN PARA LA SUSTENTABILIDAD



## El Mecanismo de interacción entre nanoplasticos y productos farmacéuticos y de cuidado personal

Bárbara García Sánchez<sup>1,2</sup>, Diego Cortés Arriagada<sup>2</sup>

<sup>1</sup>*Departamento de Química, Facultad Ciencia Naturales, Matemática y del Medio Ambiente, Universidad Tecnológica Metropolitana, las palmeras 3360, Ñuñoa Santiago, Chile*

<sup>2</sup>*Instituto Universitario de Investigación y Desarrollo Tecnológico, Universidad Tecnológica Metropolitana, Ignacio Valdivieso 2409, San Joaquín Santiago.*

*bgarcias@utem.cl*

La creciente acumulación de plásticos y contaminantes emergentes no tratados en cuerpos de agua representa un desafío crítico para los sistemas de tratamiento. En particular, los productos farmacéuticos y de cuidado personal (PFCP) muestran una alta afinidad por interactuar con nanoplasticos (NPs), afectando su movilidad, persistencia y toxicidad en ambientes acuosos. Esta tesis se centra en el estudio computacional de los mecanismos de adsorción de PFCP sobre NPs, utilizando métodos de mecánica molecular (MM) y teoría del funcional de la densidad (DFT), en diversas matrices poliméricas representativas como poliamida (PA), polietileno (PE), polietileno tereftalato (PET), polipropileno (PP) y policloruro de vinilo (PVC). Esta Investigación se enfoca en analizar la adsorción de PFCP en NPs utilizando cálculos basados en MM y DFT, evaluando los mecanismos de interacción NPs-PFCP en diferentes matrices poliméricas.

Para cada sistema se determinará las configuraciones de mínima energía mediante cálculos de MM, a las cuales posteriormente se realizará su optimización geométrica y cálculo de energía de interacción, mediante cálculos de DFT. Adicionalmente, se evaluará la influencia del medio acuoso sobre la estabilidad de los complejos formados, incorporando modelos de solvatación implícita, con el objetivo de aproximar condiciones ambientales realistas. Finalmente, se realizarán análisis de descomposición de energía para cuantificar los efectos físicos como transferencia de carga, polarización, dispersión y electrostática que determinan la magnitud de las interacciones moleculares. Esta aproximación integral no solo permitirá una comprensión detallada de los factores moleculares que regulan la afinidad entre NPs y PFCP, sino que también proporcionará información relevante para estudios de riesgo ambiental, transporte de contaminantes emergentes y el diseño de estrategias basadas en operaciones unitarias aplicables a sistemas de tratamiento de aguas.

Los resultados obtenidos indican que los PFCP tienden a adsorberse en proximidad a las cadenas poliméricas, preferentemente en sitios energéticamente favorables. Las configuraciones de adsorción varían en función de la naturaleza química del contaminante y del polímero, así como de las condiciones del medio. Las energías de interacción calculadas en medio acuoso (solvatación implícita) presentan valores negativos, en un rango de  $-7,2$  a  $-33,3$  kcal/mol, lo cual indica una alta estabilidad de los complejos NPs-PFCP, y al analizar la gráfica (Fig. 1b) a partir de los valores de energía de adsorción que presentan los sistemas se puede observar que: En los PFCP con  $pka > 5$  la estabilidad de la adsorción tiende en general a ser más favorable con polímeros como PA, PET y PVC. En particular, la molécula AVB presenta la energía de interacción más favorable con PVC ( $-28,6$  kcal/mol), seguido de PA ( $-27,8$  kcal/mol), lo cual sugiere una fuerte afinidad de este compuesto hacia NPs polares. En el caso de la molécula de CAF, se observa una preferencia por PVC ( $-24,4$  kcal/mol) y PA ( $-18,3$  kcal/mol), mientras que la molécula de CBZ interactúa de forma similar con PA y PVC ( $-22$  kcal/mol). Mientras que para los PFCP con  $pka < 5$  se presentan interacciones notablemente más intensas con ciertos polímeros, en particular PA y PET. La molécula de DCF

destaca por su interacción altamente favorable con PA (-33,3 kcal/mol), seguida por NPX con PET (-27,2 kcal/mol), IBP con PET (-20,5 kcal/mol) y AMF con PVC (-19,8 kcal/mol).

Estos hallazgos refuerzan la necesidad de considerar las interacciones moleculares específicas en el desarrollo de tecnologías de tratamiento de aguas capaces de abordar contaminantes emergentes asociados a nanoplásticos.

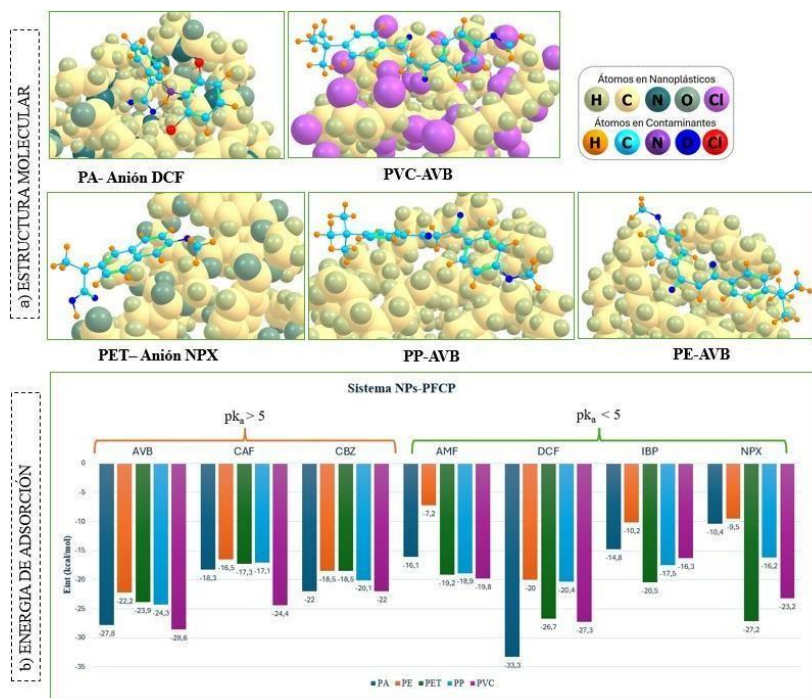


Fig.1: a) Estructura Molecular de los sistemas NPs-PFCP más estables b) energías de adsorción de los sistemas NPs-PFCP

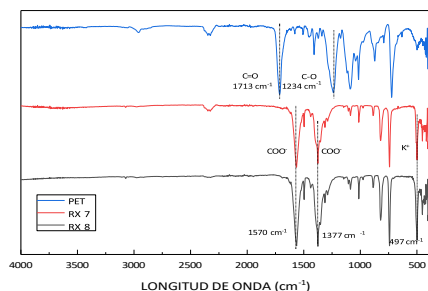
## Estudio sobre la despolimerización de PET a través de hidrólisis rápida para posible escalamiento

Contreras B. Paulina<sup>1</sup>, González P. Iván<sup>1</sup>, Franchi M. Oscar<sup>1</sup>

<sup>1</sup> Universidad Tecnológica Metropolitana (UTEM), Facultad de Ciencias Naturales, Matemáticas y Medio Ambiente, Chile

pcontrerasb@utem.cl

Este trabajo evalúa la degradación del politereftalato de etileno (PET) mediante hidrólisis alcalina, analizando el efecto de 3 variables: la concentración de hidróxido de potasio (KOH), la temperatura y el tiempo de la reacción sobre el porcentaje de degradación. Siguiendo la metodología por Wang et al. [1], se procesó PET de botellas comerciales en una solución de potasa alcohólica al 95%, variando las condiciones experimentales. Los resultados muestran valores de degradación superiores al 95% en todas las pruebas, alcanzando el 100% en múltiples combinaciones de alta temperatura y concentración de KOH. Se caracterizaron los resultados a través de espectros FT-IR, los cuales confirman la ruptura de enlaces característicos del PET, evidenciando la eficacia del tratamiento. Los gráficos de superficie de respuesta y contorno indican que el factor más importante es la concentración de KOH [2], seguido por la temperatura, dejando al tiempo como la variable de menor impacto. Se concluye que la hidrólisis alcalina bajo ciertas condiciones óptimas es un medio eficiente y potencialmente escalable para la reutilización de material polimérico, contribuyendo a la reducción de residuos plásticos.



**Figura 1.** Imagen FT-IR comparativa entre plástico PET sin degradar y dos reacciones, después de la despolimerización para observar la ruptura de los grupos funcionales.

### Agradecimientos

Se agradece al laboratorio LICCAT por el espacio físico donde se lleva a cabo la investigación y a QUIBINEXUS, por la ayuda al proyecto.

## DESARROLLO DE FOTOELECTRODOS SEMICONDUCTORES DE MULTIJUNTURA PARA LA PRODUCCIÓN DE HIDRÓGENO SOLAR

Felipe Rivera<sup>1</sup>, Roberto Villarroel<sup>2</sup>

<sup>1</sup>*Laboratorio de Física Experimental Avanzada, Departamento de Física, Universidad Tecnológica Metropolitana, Santiago, Chile.*  
*Felipe.riverac@utem.cl*

La búsqueda de soluciones energéticas sostenibles es uno de los grandes desafíos actuales. En este contexto, el hidrógeno verde emerge como una alternativa viable para almacenar energía solar, ya que puede generarse mediante electrólisis del agua sin emitir contaminantes. Actualmente, este proceso utiliza materiales costosos como platino, iridio y el rutenio, por lo que se requiere el desarrollo de sistemas más accesibles y eficientes.

Esta investigación propone el desarrollo de fotoelectrodos semiconductores de multijuntura destinado al estudio de la generación de hidrógeno a partir de energía solar y su estabilidad del sistema en medios acuosos. Se fabricaron fotocátodos basados en heterouniones de nanobarras de  $\text{Cu}_2\text{O}$  como material fotoactivo, recubiertos con una delgada capa de  $\text{TiO}_2$ . Esta configuración permite optimizar la movilidad de cargas fotogeneradas mediante un alineamiento escalonado de las bandas de conducción y, simultáneamente, protege al  $\text{Cu}_2\text{O}$  frente a la degradación en medios electrolíticos.

La metodología contempla la síntesis de nanobarras de  $\text{Cu}_2\text{O}$  mediante anodización electroquímica de superficies metálicas, generando nanoagujas de  $\text{Cu}(\text{OH})_2$ , posteriormente tratadas térmicamente en atmósfera inerte, para formar arreglos unidimensionales de nanobarras de óxido de cobre (I). Luego, se evalúa la deposición de una capa delgada y homogénea de  $\text{TiO}_2$  a través de dos rutas: síntesis química húmeda por *Dip Coating* y deposición de pulverización asistida por *Spray Coating*.

La caracterización estructural y morfológica de los fotocátodos  $\text{Cu}_2\text{O}/\text{TiO}_2$  se realiza mediante microscopía electrónica de barrido (*SEM*), análisis elemental (*EDS*) y espectroscopía Raman. En etapas posteriores se contemplan caracterizaciones adicionales mediante *DRX*, *PL* y *XPS*. Las evaluaciones fotoelectroquímicas y el estudio del comportamiento de interfases se realizarán mediante ensayos de cronoamperometría bajo iluminación simulada y voltamperometría de barrido lineal en celdas fotoelectroquímicas de tres electrodos.

Se espera lograr una fotoconversión solar superior al 10%, mediante el control de la morfología y estructura cristalina del  $\text{Cu}_2\text{O}$  y la optimización de la capa de  $\text{TiO}_2$ . Estos resultados permitirán entender mejor los mecanismos de captura de fotones y transferencia de carga, así como mejorar la resistencia a la fotocorrosión.

En conclusión, esta propuesta busca avanzar en el desarrollo de tecnologías limpias utilizando materiales abundantes y económicos. La combinación sinérgica de técnicas de síntesis física y química permitirá diseñar fotocátodos eficientes, estables y escalables para la producción de hidrógeno solar, contribuyendo al avance del conocimiento en energías renovables y almacenamiento energético.

## Evaluation of Cobalt Recovery from Tailings Using Various Treatment Methods

Yahaira Barrueto<sup>1,2</sup>, Juan Patricio Ibáñez<sup>1</sup>, Miguel Veliz<sup>1</sup>, Yendery Ramírez<sup>2</sup>,  
José Ojeda<sup>2</sup>

<sup>1</sup>*Departamento Ingeniería de Minas, Metalúrgica y Materiales, Universidad Técnica Federico Santa María, Valparaíso, Chile*

<sup>2</sup>*Sustainable Minerals Institute–International Centre of Excellence Chile (SMI-ICE-Chile), The University of Queensland, Santiago, Chile*

*yahaira.barrueto@usm.cl*

Cobalt is a strategic metal used in various technological applications, such as rechargeable batteries and superconducting materials. Its extraction, typically from sulfide ores, has been costly and has had environmental impacts. However, porphyry copper tailings, often considered waste, contain significant concentrations of cobalt, presenting an opportunity for its recovery through more sustainable and efficient technologies.

This study evaluated several treatment methods for cobalt extraction from porphyry copper tailings. The techniques assessed included leaching with deep eutectic solvents (DES) (choline chloride and citric acid), acid leaching with citric acid and sulfuric acid, chloride pre-treatment, and flotation. Analysis of the tailings revealed that the highest concentration of cobalt was found in fine particles, mainly those under 150 microns, which complicates extraction due to the insoluble form of cobalt in this fraction.

The total grade of the sample was 20 ppm, while the grade of the finer fraction, under 150 microns, was 7 ppm, indicating that a significant portion of the cobalt is in an insoluble form, complicating both extraction and phase identification. The association of cobalt with fine, largely insoluble particles underscores the need for mineral phase characterization and potential activation strategies. Operating conditions, between 25°C and 60°C, for 8 hours, indicate that the most effective techniques for cobalt recovery were acid leaching with 2M sulfuric acid (74%), flotation (54%), chloride pre-treatment (34%), and leaching with DES (23%). Sulfuric acid leaching achieved the highest cobalt recovery, demonstrating its effectiveness even at low-grade tailings.

This study highlights the potential of porphyry copper tailings as a source of cobalt and the need to optimize extraction processes to improve the recovery of this critical metal. The promising results open pathways for future pilot-scale implementations aiming at sustainable cobalt recovery from mining waste.

## Nanoestructuras de $\text{Cu}_2\text{O}$ : morfología y desempeño electroquímico para hidrógeno verde.

D. Montero<sup>1</sup>, R. Villaroel<sup>1</sup>

<sup>1</sup>*Laboratorio de Física Experimental Avanzada, Departamento de Física, Universidad Tecnológica Metropolitana, Santiago, Chile  
Dmilachay@utem.cl*

El presente estudio contribuye a una nueva forma de síntesis de distintas nanoestructuras óxido de cobre (I) para aplicaciones en la fotoconversión de energía solar a hidrógeno verde [1]. Un material económico, abundante en Chile y no tóxico estudiado durante mucho tiempo debido a sus características únicas para poder utilizar este tipo de fuente de energía [2].

Se presenta el desarrollo de distintas nanoestructuras unidimensionales de óxido de cobre (I), obtenidas mediante dos pasos, anodización electroquímica y tratamiento térmico en atmósfera inerte. Se estudió la influencia de las variables del proceso de síntesis en la morfología y nanoestructura de las nanobarras obtenidas, así como la influencia de estas características en su eficiencia fotoelectroquímica en la reducción de la molécula de agua.

El análisis morfológico permitió la identificación de tres grupos principales de morfologías superficiales: nanobarras, nanobarras compactas y dendritas. Estructuralmente estas familias también presentaron propiedades interesantes destacando la relación de intensidades relativas de las caras cristalinas predominantes (111) y (200), así como también su señal luminiscente.

La respuesta se evaluó utilizando estas nanobarras como fotocátodos en la reacción fotoelectroquímica de división de la molécula de agua, analizando voltametrías lineales en condiciones de oscuridad e iluminación, cronoamperometría pulsada y eficiencia de conversión de fotón a corriente (IPCE). De los resultados obtenidos, fue posible considerar el crecimiento dendrítico como el mejor candidato para la generación de hidrógeno solar, obteniendo una corriente fotogenerada máxima de  $0.45 \text{ mA/cm}^2$  a potencial de  $-0.4 \text{ V}$  y una eficiencia máxima de 23%.



## Exploring the impact of bifunctional catalysts for Furfural reductive amination

Alex Fernández<sup>1</sup>, Katherine Arriagada<sup>2</sup>, Daviel Gómez<sup>3</sup>, Cristian H. Campos<sup>4</sup>, Luis E. Arteaga-Pérez<sup>2</sup>

<sup>1</sup>Laboratory of Thermal and Catalytic Processes (LPTC-UBB), Department of Process Engineering and Bioproducts, Engineering Faculty, Universidad del Bio-Bio, Concepción 4030000, Chile.

<sup>2</sup>Department of Chemical Engineering, Faculty of Engineering, Universidad de Concepción, Concepción, 4030000, Chile.

<sup>3</sup>Instituto de Tecnología Química, Universitat Politècnica de València-Consejo Superior de Investigaciones Científicas (UPV-CSIC), Avenida de los Naranjos s/n, 46022 Valencia, Spain

<sup>4</sup>Universidad Andres Bello sede Concepción, Facultad de Ciencias Exactas, Departamento de Ciencias Químicas, Autopista Concepción-Talcahuano 7100, Talcahuano, Chile.

[larteaga@udec.cl](mailto:larteaga@udec.cl)

**Introduction:** The catalytic reductive amination of aldehydes and ketones derived from lignocellulosic biomass offers a green alternative to petrochemical-based amines. In this framework, catalytic amination of furfural is gathering attention due to its sustainability potential and economic feasibility. However, the one-pot amination of furfural (FUR), involves two major reaction steps: (i) imine formation followed by (ii) C=N hydrogenation, which requires for bifunctional catalysts to control product selectivity. Therefore, here we investigated the bifunctional role of Pd<sup>0</sup> nanoparticles and Lewis's acid sites in ZrO<sub>2</sub>-TiO<sub>2</sub> supports to achieve a fine tuning of reaction selectivity.

**Materials and methods:** Pd/ZrO<sub>2</sub>-TiO<sub>2</sub> catalysts with controlled acid properties were prepared via wet impregnation of TiO<sub>2</sub> with ZrO<sub>2</sub> (0.5–25% wt.), followed by drying (50 °C, 24 h), calcination (500 °C, 2 h), Pd impregnation (1.5% wt.), and reduction (400 °C, 2 °C·min<sup>-1</sup>, H<sub>2</sub>). Textural and structural properties of catalysts were analyzed through different techniques (BET, XRD, TEM, TPD-NH<sub>3</sub>, FTIR-Pyridine). Catalytic activity was tested in an operando FTIR-ATR reaction cell (Golden Gate) at 100 °C, 5 bar H<sub>2</sub>, using furfural and aniline as reagents, while preliminary kinetic measurements were performed at batch conditions in an autoclave reactor.

**Results and discussion.** The catalysts presented similar textural and structural properties (i.e., surface area, pore size distribution, and metal particle sizes), which allowed attributing the differences in their catalytic performance to the combination of metal nanoparticles with support's acid properties. According to pyridine titration, the materials showed predominantly Lewis's acid sites (medium: LM and strong: LS), with sharp signals at 1446 and 1596 cm<sup>-1</sup>. The incorporation of Zr on TiO<sub>2</sub> modified the strength of these sites, showing a direct correlation of ZrO<sub>2</sub> loading with the density of strong Lewis's acid sites. The selectivity for furfurylaniline (FFA) has no significant correlation with bulk acidity, indicating that only specific acidic sites are involved in the reaction pathway. Meanwhile an increase in the medium-to-strong Lewis sites (LM/LS) ratio enhances FFA selectivity up to LM/LS = 3; beyond this point, selectivity decreases rapidly. This indicates that a fine tuning of the strength of support's acid sites may be leveraged to regulate process selectivity. Given that imine hydrogenation may be the rate-determining step, we can assert that the combination of Pd<sup>0</sup>, which dissociates H<sub>2</sub> with moderate Lewis's acid sites, where FUR and imine are adsorbed, will generate a bifunctional effect in this reaction system, resulting in improved furfural amination.

### Acknowledgments

Thanks to ANID-Chile for financial support through the FONDECYT 1240054 project and the NATIONAL DOCTORAL SCHOLARSHIP 2024/21241495.



## Reductive Amination of Furfural using bifunctional catalyst: Exploring Solvent and N-Substrate Effects

Alex Fernández<sup>1</sup>, Cristian H. Campos<sup>2</sup>, Luis E. Arteaga-Pérez<sup>3</sup>

<sup>1</sup>Laboratory of Thermal and Catalytic Processes (LPTC-UBB), Department of Process Engineering and Bioproducts, Engineering Faculty, Universidad del Bio-Bio, Concepción 4030000, Chile.

<sup>2</sup>Universidad Andres Bello sede Concepción, Facultad de Ciencias Exactas, Departamento de Ciencias Químicas, Autopista Concepción-Talcahuano 7100, Talcahuano, Chile.

<sup>3</sup>Department of Chemical Engineering, Faculty of Engineering, Universidad de Concepción, Concepción, 4030000, Chile.

[alex.fernandez2201@alumnos.ubiobio.cl](mailto:alex.fernandez2201@alumnos.ubiobio.cl)

**Introduction:** The production of fine chemicals from lignocellulosic biomass is a promising alternative to foster the sustainability of the chemical industry. In this effort, reductive amination of furfural promoted by palladium-based catalysts is attracting scientific attention. In parallel, there are aspects related to the reaction media and the nitrogen source that need to be studied and that could help to maximise the selective formation of aromatic secondary amines in the presence of metal-acid catalysts. Consequently, in this study we present an exploratory analysis of the synthesis of N-furfurylamines (FFA) using different solvents as reaction media and N-substrates (amines) as nitrogen sources in the presence of a bifunctional Pd/ZrO<sub>2</sub>-TiO<sub>2</sub> catalyst.

**Materials and methods:** The synthesis of the Pd/ZrO<sub>2</sub>-TiO<sub>2</sub> catalyst started with the impregnation of Zr (3% wt.) on TiO<sub>2</sub>, followed by drying (50 °C, 24 h) and calcination (500°C, 2 h).

Then, Pd was impregnated at 1.5% wt. by incipient wet. Prior to its use in reaction, the catalyst was reduced in H<sub>2</sub> flow (400 °C, 2 °C min<sup>-1</sup>), and characterised by different structural and surface techniques (N<sub>2</sub> Physisorption, TEM and HR-TEM, XPS, TPD-NH<sub>3</sub>, XRD and FTIR-Pyridine).

Experiments with different solvents and N-substrates were performed in batch reactors at T= 100 °C, P<sub>H<sub>2</sub></sub>= 2 bar, C<sup>0</sup><sub>FUR</sub>= C<sup>0</sup><sub>amine</sub>= 0.5 mol L<sup>-1</sup>, V<sub>R</sub>= 3 mL, t=180 min. The products were identified and quantified by GC-MS.

**Results and discussion:** The catalyst showed Pd nanoparticles (7.4 nm) homogeneously dispersed on the support (ZrO<sub>2</sub>-TiO<sub>2</sub>). Moreover, it showed Lewis's acid sites with a predominance of weak and medium-strength sites, and an increase of strong sites with respect to pure TiO<sub>2</sub>. The results of the effect of solvent on FFA formation were interpreted in terms of the relationship between the ability to donate hydrogen bonds and the dielectric constant ( $\alpha/\epsilon$ ). The highest selectivity for N-furfurylaniline (S<sub>FFA</sub> = 69%; Y<sub>FFA</sub> = 32%) was achieved with methanol ( $\alpha/\epsilon$  intermediate) as solvent, due to its ability to interact with regulated force in the liquid phase. This contributed to the solubility of the reagents and the stabilisation of the imine intermediate, allowing its entry into the catalytic cycle. Of the N-substrates evaluated, 3-fluoroaniline yielded the largest production of secondary amines (Y<sub>FFA</sub> = 76%; S<sub>FFA</sub> = 82%). This is attributed to the electronegativity of fluorine slightly removing the electron density of the imine group (C=N) and increasing the electrophilicity and subsequent hydrogenation to produce the target product. In addition, steric effects were evidenced mainly with amines substituted in the ortho position because they generate spatial congestion close to the amino group. These results represent a significant contribution to the choice of solvents and N-substrates to maximise the production of N-furfurylanilines using bifunctional metal-acid catalysts.

**Acknowledgments:** Thanks to ANID-Chile for financial support through the FONDECYT 1240054 project and the NATIONAL DOCTORAL SCHOLARSHIP 2024/21241495.

## Direct Air Capture of CO<sub>2</sub> Using Monolithic Activated Carbon Pellets in a Domestic-scale VSA System

G. Córdova<sup>1</sup>, A. Oteiza<sup>1</sup>, C. Reinao<sup>1</sup>, G. Núñez<sup>1</sup>, I. Cornejo<sup>1</sup>

<sup>1</sup>*Departamento de Ingeniería Química y Ambiental Universidad Técnica Federico Santa María, Chile.  
guillermo.cordovac@usm.cl*

Direct Air Capture (DAC) is an emerging technology that plays a crucial role in achieving carbon neutrality by removing CO<sub>2</sub> directly from the atmosphere. Among the available options, adsorption systems using solid sorbents offer energy advantages over liquid-based alternatives. In particular, coconut shell-based activated carbon stands out due to its high surface area, mechanical stability, and strong performance at low cost. However, its traditional use in granular form presents limitations such as high pressure drop and low mass transfer efficiency. To address this, structuring the sorbent into monolithic forms has demonstrated operational improvements in recent studies [1]. This work proposes an alternative approach: the design and experimental evaluation of monolithic pellets molded with controlled internal geometry, using activated carbon and carboxymethylcellulose as a binder. The system operates in a closed batch mode under ambient conditions, using vacuum swing adsorption (VSA) cycles. The aim is to assess how the internal morphology influences the adsorption efficiency and regeneration capacity of the sorbent. Three designs were fabricated with controlled internal geometries by varying channel size and wall thickness: 7/7 mm (Design 1), 7/5 mm (Design 2), and 5/5 mm (Design 3), along with a powdered reference sample. The experiments were carried out in a closed batch system under ambient conditions (16–19 °C and 20–25 % RH) for 800 minutes, and the results were expressed as adsorption capacity per mass ( $q_m$ ) and per geometric area ( $q_A$ ). The results showed that increasing the S/V ratio enhances the total CO<sub>2</sub> capture capacity: Design 1 reached 44 mg CO<sub>2</sub> kg<sup>-1</sup> (108 mg CO<sub>2</sub> m<sup>-2</sup>), Design 2 ranged between 64–74 mg CO<sub>2</sub> kg<sup>-1</sup> (150–184 mg CO<sub>2</sub> m<sup>-2</sup>), and Design 3 achieved 147 mg CO<sub>2</sub> kg<sup>-1</sup> (283 mg CO<sub>2</sub> m<sup>-2</sup>), while the powder sample attained 51 mg CO<sub>2</sub> kg<sup>-1</sup> (56 mg CO<sub>2</sub> m<sup>-2</sup>). These findings demonstrate that a higher S/V ratio increases the exposed area and, consequently, the CO<sub>2</sub> capture capacity, although with a slight penalty in adsorption kinetics. Overall, Design 3 exhibited the highest total capacity, while Design 2 provided the best balance between available surface area and diffusive efficiency, highlighting the importance of geometric optimization to enhance the performance of structured sorbents in DAC systems.

## Quantitative method for measuring liquid-phase catalytic reactions by *Operando* FTIR-ATR

Katherine Arriagada<sup>1</sup>, Alex Fernández<sup>2</sup>, Juan Parra<sup>2</sup>, Luis Arteaga<sup>1</sup>

<sup>1</sup>*Department of Chemical Engineering, Faculty of Engineering, University of Concepción, Concepción, 4030000, Chile.*

<sup>2</sup>*Laboratory of Thermal and Catalytic Processes (LPTC-UBB), Department of Process Engineering and Bioproducts, Engineering Faculty, University of Bío-Bío, Concepción 4030000, Chile.*

[katarriagada@udec.cl](mailto:katarriagada@udec.cl)

Fourier transform infrared spectroscopy with attenuated total reflectance (FTIR-ATR) has been widely adopted for in situ spectroscopic measurements, as it allows the identification of reaction intermediates, spectators, products, and substrates. However, for heterogeneous catalytic reactions occurring in the liquid phase, this technique presents several challenges, such as: (i) high dead volume of commercial cells, (ii) poor mixing and flow defects, and (iii) poor coating of the catalytic film on cell walls (Zaera, 2021). In this context, stirred tank pressurized reactors (STPRs) equipped with IR-probes, or STPR-cells, are being developed, though they require ad hoc analytical procedures. To this end, we report the implementation of an analytical technique for studying kinetics, reaction mechanisms, and conducting catalytic screenings by applying *operando* FTIR-ATR in an STPR-cell. The method combines FTIR-ATR measurements with conventional gas chromatography to identify and quantify reaction products and intermediates. Moreover, the method is validated for the one-pot amination of furfural (FUR) over Pd/ZrO<sub>2</sub>-TiO<sub>2</sub> and can be extended to (de)hydrogenation, (de)polymerization, and related transformations.

The reactions were performed on a FTIR spectrometer (Thermo Scientific Nicolet iS20) equipped with a diamond crystal attenuated total reflectance reaction chamber (Golden Gate, Specac, ATR). The reductive amination of furfural (FUR) with aniline (AN) over Pd/ZrO<sub>2</sub>-TiO<sub>2</sub> was studied for 120 min at 100 °C, 900 rpm, and 3 bar H<sub>2</sub>. For this, catalysts were prepared by varying the percentage of Zr (0.5 - 25%) to modify their acidic properties. To validate the spectroscopic measurements and perform quantitative analyses, chromatographic analyses were performed on a gas chromatograph (SRI 8610C) using nonane as an internal standard. In addition, automated continuous sampling for catalytic and non-catalytic reactions was implemented using the integrated Series extension of the Omnic software. All spectra were post-processed using Spectragryph software. All analyses were performed using analytical-grade reagents.

Correlation of the calibration curves for GC and FTIR-ATR showed an excellent linear fit ( $R^2 > 0.98$ ) for AN and FUR. Thereafter, kinetic curves for AN and FUR were followed as a function of the peak intensities at 1605 cm<sup>-1</sup> and 1675 cm<sup>-1</sup>, respectively, corresponding to IR signatures (=NH<sub>2</sub>, bending mode and C=O, stretching mode). In addition, the intensities of the signals at 1630 cm<sup>-1</sup> (C=N, stretching mode) and at 1315 cm<sup>-1</sup> (C-N, stretching mode), allowed tracking the evolution of imine and furfurylaniline, respectively. These curves suggest that FUR amination involves the homogeneous condensation of FUR and AN to yield (*E*)-[2-Furyl-methylene] aniline (imine) as an intermediate, with a conversion of approximately 74.9% of FUR. Subsequently, the C=N bond of the imine was hydrogenated by H<sup>+</sup> dissociated on Pd<sup>0</sup> sites to form furfurylaniline. When the reaction was carried out over the catalyst support (ZrO<sub>2</sub>-TiO<sub>2</sub>), FUR conversion increased to 96.2%, indicating that the acidic sites of the support promote the condensation of the imine with the C=O group of furfural. A catalytic screening over Pd/ZrO<sub>2</sub>-TiO<sub>2</sub> with tailored acidity showed that the total density of acid sites had no significant effect on the selectivity toward furfurylaniline. However, medium-strength Lewis acid sites significantly favored the production of the desired amine. This made it possible to demonstrate that the implementation of the FTIR-ATR methodology for the study of catalytic reactions in the liquid phase provided solid experimental data to identify and quantify the species involved in the reaction.

## Producción y aplicación de la enzima Latex clearing protein de *Rhodococcus rhodochrous* (Lcp<sub>Rr</sub>) sobre diferentes mezclas de caucho

Antonia Hernández<sup>1</sup>, Rodrigo Andler<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Escuela de Ingeniería en Biotecnología, Laboratorio de Bioprocesos, Centro de Biotecnología de los Recursos Naturales (CENBio), Universidad Católica del Maule, Talca, Chile.

[antonia.hernandez@alumnos.ucm.cl](mailto:antonia.hernandez@alumnos.ucm.cl)

El importante desarrollo de la industria automotriz ha facilitado enormemente la vida de las personas. Sin embargo, cuando estas grandes cantidades de vehículos llegan al final de su vida útil, comienzan a surgir problemas, uno de los cuales es la eliminación de neumáticos. Lo que ha dado lugar a una gran acumulación de productos poliméricos que se han convertido en una amenaza para el medio ambiente<sup>1</sup>. En la actualidad, los procesos de tratamiento más comunes se enfocan en soluciones mediante técnicas de degradación físico-químicas. No obstante, la biorremediación se ha convertido en una alternativa con alto potencial y un sello sostenible, mediante el uso de enzimas como Látex clearing protein (Lcp), que tiene la capacidad de catalizar la escisión oxidativa de los dobles enlaces presentes en el poli(*cis*-1,4-isopreno)<sup>2</sup>. Si bien la biorremediación se ve limitada por la complejidad de las mezclas de caucho, este mecanismo oxidativo abre la posibilidad de poder aplicar esta enzima en diferentes mezclas de caucho. Bajo este contexto, el presente estudio tiene como objetivo evaluar el comportamiento de Lcp proveniente de *Rhodococcus rhodochrous* (Lcp<sub>Rr</sub>) utilizando diferentes mezclas de caucho, tanto en términos de velocidad inicial de reacción, como en consumo total de oxígeno.

La producción de Lcp<sub>Rr</sub> se llevó a cabo a escala de biorreactores de 4L, durante 24 h, utilizando medio Terrific Broth (TB). Para la purificación de Lcp<sub>Rr</sub>, se utilizó la columna Strep-Tactin XT de 1 mL (IBA Lifesciences). Luego de la purificación enzimática, se realizó ensayo de Bradford para la determinación de la concentración proteica. Posteriormente se realizó un ensayo para analizar la variación de la concentración de oxígeno disuelto en la solución, incubando Lcp<sub>Rr</sub> en presencia de diferentes mezclas de caucho, buffer tris pH 7,2, a temperaturas de 30, 40 y 50°C, en un biorreactor multicanal (Biosan, RTS-8). Se realizó una extracción líquido-líquido para la obtención de oligosoprenoides con acetato de etilo. Finalmente, los productos de degradación fueron disueltos en 1 mL de metanol y analizados a través de cromatografía líquida de alta eficiencia (HPLC) utilizando el detector YL9120 UV/Vis (Young in Chromass, D).

Se determinó una concentración de enzima de 22,5 mg/L, del cultivo en biorreactor, obteniendo un total de 180 mg de Lcp<sub>Rr</sub>. Del ensayo de análisis de la variación de concentración de oxígeno disuelto en la solución se observó que en el sustrato modelo poli(*cis*-1,4-isopreno), hubo una mayor velocidad inicial de reacción a 40 y 50°C, con una actividad enzimática específica de 31,7 (U/mg) y 32,5 (U/mg), respectivamente. Además, se determinó una tasa de consumo de oxígeno de 6,33 (μmol/min<sup>1</sup>) a los 40°C y de 6,49 (μmol/min<sup>1</sup>) a los 50°C. Los resultados del HPLC indican la producción de oligosoprenoides como productos de degradación en todas las temperaturas evaluadas.

A partir de los resultados obtenidos y considerando la actividad de Lcp<sub>Rr</sub> en condiciones controladas, se destaca su potencial para obtener oligosoprenoides, a partir de diferentes mezclas de caucho, representando una estrategia prometedora frente a la contaminación ambiental, mediante un proceso de degradación más sustentable.

## Reacciones en fase gaseosa entre precursores y moléculas inhibidoras durante el proceso de deposición selectiva de capa atómica

C. Vivanco, M. Picuntureo, T. Sandoval

*Departamento de Ingeniería Química y Ambiental, Universidad técnica Federico Santa María.  
cristian.vivancof@usm.cl*

El constante crecimiento de la industria de los semiconductores plantea importantes desafíos medioambientales. Nuevas técnicas de fabricación, como ALD, ofrecen una alternativa con menor impacto ambiental, sin comprometer la calidad de material. En particular, la deposición selectiva de capa atómica (AS-ALD) ha surgido como un método que permite un control nanométrico en la fabricación de materiales, esencial en la miniaturización de circuitos integrados. Una forma de lograr la selectividad es mediante la adsorción de moléculas inhibidoras (SMI), que bloquean la deposición en las zonas no deseadas, sin embargo, se ha evidenciado que existe una pérdida de selectividad gracias a reacciones químicas indeseadas entre los precursores e inhibidores.

Debido a su interés tecnológico, se realizará la simulación de precursores ALD de tantalio, titanio, silicio y hafnio, junto a moléculas inhibidoras de diversos grupos funcionales (-NH<sub>2</sub>, -COOH, -CHO, -CH<sub>3</sub>), mediante la teoría funcional de la densidad (DFT). Para ello se utilizó el funcional PBE con corrección D3(BJ) y el conjunto de bases Def2-SV(P). Este enfoque permite analizar las interacciones moleculares e identificar los pares precursor-inhibidor que afectan la selectividad del proceso en base a su reactividad. Esto permitirá optimizarlo y establecer una metodología capaz de ser utilizada en otros sistemas.

Los cálculos se validaron a través de un análisis de las energías de reacción, adsorción y las barreras de activación entre una molécula de trimetilaluminio (TMA) y 4-hidroquinona (4HQ) que han sido estudiados con anterioridad, lo que nos permite asegurar reproducibilidad de esta en las próximas reacciones.

De los resultados obtenidos de la reacción TMA-4HQ podemos destacar que se cumple la disminución de la distancia interatómica entre el aluminio y oxígeno, siendo de 3.09 Å en la fisisorción (E<sub>1</sub>), 2.10 Å en la quimisorción (E<sub>2</sub>), 1.99 Å en el estado de transición (E<sub>3</sub>) y 1.75 Å en el producto final (E<sub>4</sub>). También se realizó una comparación entre los valores de la diferencia energética en cada paso de la reacción, siendo los reportados del estado inicial (E<sub>0</sub>) de 0 por definición; E<sub>1</sub> = 3.1, E<sub>2</sub> = -40.5, E<sub>3</sub> = -8.4 y E<sub>4</sub> = -149.7 kJ/mol, mientras que los obtenidos en la simulación fueron de: E<sub>0</sub> = 0; E<sub>1</sub> = 9.9, E<sub>2</sub> = -34.1, E<sub>3</sub> = -1.3 y E<sub>4</sub> = -144.7 kJ/mol. Esto nos da un coeficiente de determinación R<sup>2</sup> = 0.998 Por lo que podemos afirmar que la metodología empleada representa adecuadamente las reacciones simuladas.

De los resultados obtenidos se puede evidenciar la reactividad entre precursores e inhibidores, lo que afecta en la selectividad del proceso AS-ALD. Por ello, es necesario ampliar el estudio para explorar la reactividad de otros pares moleculares representativos para determinar si existirá una reacción química que pueda afectar en la pérdida de selectividad para poder optimizar el proceso y disminuir la contaminación ambiental. Además, se obtiene una metodología que representa adecuadamente los datos teóricos reportados, lo que valida la aplicación en el estudio de otros pares precursor-inhibidor. De esta forma, el trabajo no solo aporta a la optimización del proceso, sino que también en el área tecnológica, al favorecer la formación de nuevos componentes electrónicos, los que promueven el desarrollo y la mejora continua en distintos ámbitos.



## A New Heat Transfer Correlation for Core-Ring Packed Beds for a Low Reynolds Condition

P. Díaz<sup>1</sup>, B. Garrido<sup>1</sup>, I. Cornejo<sup>1</sup>

<sup>1</sup>*Departamento de Ingeniería Química y Ambiental, Universidad Técnica Federico Santa María, Chile  
pablo.diazu@sansano.usm.cl*

Controlling flow distribution and heat transfer in catalytic packed-bed reactors is essential to maximize performance and prevent hot spots in strongly exothermic systems. This study investigates a coaxial dual-zone “core–ring” packing, where a central core and the surrounding annulus employ different pellet sizes. The induced radial heterogeneity alters permeability, flow partitioning, and interfacial transport, providing a practical lever to tune hydrodynamics and thermal management beyond homogeneous beds. A computational framework is developed to quantify these effects and to deliver an engineering correlation for the convective heat-transfer coefficient under laminar to weakly transitional conditions representative of laboratory and pilot scales.

The numerical model is implemented in ANSYS Fluent 2024R2 using the finite-volume method on a two-dimensional axisymmetric tube subdivided into porous subdomains for core and ring. Each zone is assigned a distinct pellet diameter and porosity consistent with targeted packings; thermophysical properties are evaluated at the inlet temperature and kept constant to isolate geometric and hydrodynamic contributions. Boundary conditions comprise uniform inlet velocity and temperature, a no-slip isothermal wall, and a fixed-pressure outlet. The inlet Reynolds number ( $Re_{in}$ ) based on tube diameter is set to one hundred. Two geometric controls are varied systematically, the core area fraction ( $\lambda_c = A_c/A_T$ ) and the pellet-size ratio between core and ring ( $D_{p,c}/D_{p,r}$ ), thereby spanning distinct particle-scale Reynolds numbers in each zone ( $Re_{p,c}$ ,  $Re_{p,r}$ ). For every case, cross-section-averaged convective coefficients ( $h$ ) and the total pressure drop are computed. Spatial discretization uses second-order schemes with boundary-layer-refined, body-fitted meshes; grid independence is enforced by requiring changes below two percent in both Nusselt number and pressure drop upon refinement. Steady solutions are advanced until strict residual criteria are met, and integral energy balances stabilize. A homogeneous-bed baseline is reproduced before executing the full parametric sweep to validate the CFD model.

Two transport regimes emerge. At low particle-scale Reynolds numbers, diffusion dominates, and geometric contrast governs radial gradients, enhancing heat removal where permeability is higher. Above a threshold, convective mixing homogenizes profiles, reducing geometric sensitivity while preserving a measurable advantage over uniform packing. Guided by these trends, an explicit Nusselt-type correlation is formulated that blends conventional dimensionless groups with compact modifiers for core fraction and pellet-size ratio. Model constants vary smoothly with the particle-scale Reynolds number to reflect the transition from diffusion-dominated to mixing-enhanced transport. The correlation reproduces the CFD-derived heat-transfer coefficients across the explored design space with a coefficient of determination of 0.98 and a mean relative error of approximately 12%, based on non-linear regression fitting.

From a design standpoint, the correlation enables rapid screening of core–ring layouts and first-pass thermal sizing of tubes and jackets without resorting to full simulations. This supports the development of strongly exothermic processes where heat-removal limits often constrain conversion, selectivity, or catalyst life, and clarifies how geometric tuning redistributes flow between zones for improved pressure-drop management and hot-spot mitigation.

## Investigación numérico-experimental de la combustión en mezcla metano/amoniaco en un reactor de flujo recíproco con medios porosos inertes

Luis Barassi<sup>1</sup>, Andrés Arriagada<sup>1</sup>, Mario Toledo<sup>1</sup>

<sup>1</sup> Departamento de Ingeniería Mecánica, Universidad Técnica Federico Santa María, Av. España 1680, Valparaíso, Chile

*luis.barassi@usm.cl*

El amoniaco ( $\text{NH}_3$ ) se prevé con un rol protagonista en la transición energética ya que su combustión completa no emite  $\text{CO}_2$ , a diferencia de los combustibles fósiles que, en 2022, el sector energía en Chile emitió cerca de 85.000 kt  $\text{CO}_2$  eq debido a la quema de estos. Una de las tecnologías para disminuir emisiones desde procesos de combustión, es el uso de medios porosos inertes (MPI). Además, la utilización de un reactor de flujo recíproco (RFR) con MPI, a diferencia de los quemadores tradicionales, permiten aprovechar la recuperación de calor de los gases de salida obteniendo mayores eficiencias (95% vs 75% en quemadores tradicionales) y una combustión superadiabática. En este trabajo numérico-experimental se estudia la distribución de temperatura en un reactor de flujo recíproco con medios porosos y las emisiones gaseosas de monóxido de carbono (CO), dióxido de carbono ( $\text{CO}_2$ ), óxidos de nitrógeno ( $\text{NO}_x$ ), hidrógeno ( $\text{H}_2$ ) y amoniaco no quemado ( $\text{NH}_3$ ) frente a la variación de la relación de equivalencia ( $\phi$ ) y la fracción molar de amoniaco en mezcla con metano ( $x_{\text{NH}_3}$ ). Para la metodología experimental se utilizó un banco de pruebas con un quemador de flujo recíproco de 305 mm de longitud y 60 mm de diámetro interno con espuma cerámica de  $\text{ZrO}_2$  y SiC (83% porosidad) como medio poroso en el interior y 30 segundos de cambio recíproco. Se poseen 9 puntos equidistantes para la toma de temperatura a lo largo del reactor, mientras que para la medición de emisiones se utilizó un analizador de gases de combustión y uno de amoniaco. En cuanto a lo numérico, se utilizó el software comercial ANSYS Fluent representando el fenómeno mediante una simulación unidimensional, de tipo transiente y una cinética reducida de 45 especies y 419 reacciones. Dentro de los resultados más relevantes observados está el efecto de la adición de amoniaco  $x_{\text{NH}_3}=0.2$  que genera mayores temperaturas en todo el rango de  $\phi$  en contraste a utilizar solo metano, obteniendo una temperatura máxima de 1791K para  $x_{\text{NH}_3}=0.2$  y  $\phi=1.0$ . En cuanto a las emisiones, frente al aumento de amoniaco en mezcla, se observaron disminuciones promedio del 28% y 46% para CO y  $\text{CO}_2$ , respectivamente, mientras que las emisiones de  $\text{NO}_x$  alcanzaron valores máximos de 1000 ppm para  $x_{\text{NH}_3}=0.4$  y  $\phi=0.9$ . Además, se obtuvieron eficiencias de combustión de hasta un 89% para  $x_{\text{NH}_3}=0.4$  y  $\phi=1.0$  vs 87% para metano puro. En base al trabajo realizado, se busca continuar la investigación con geometrías más complejas y escalamiento de la tecnología, esto debido a que se debe seguir investigando el desarrollo de tecnologías carbono neutrales para un futuro más sostenible.

## Estudio de la remoción de Amoxicilina presente en matriz acuosa, mediante adsorción sobre MOF UiO-66, modificado con Ni.

C. Astudillo<sup>1</sup>, P. Salazar<sup>1</sup>, T. Maldonado<sup>1</sup>, P. Baeza<sup>1</sup>, J. Ojeda<sup>2</sup>

<sup>1</sup>Instituto de Química, Pontificia Universidad Católica de Valparaíso, Valparaíso, Chile.

<sup>2</sup>Escuela de Química y Farmacia, Facultad de Farmacia, Universidad de Valparaíso, Chile.  
camila.astudillo.v@pucv.cl

Uno de los contaminantes emergentes que actualmente han captado la atención de la comunidad científica, son los productos farmacéuticos (PF). Los cuales se administran en grandes cantidades en todo el mundo y se eliminan de forma regular a través del sistema de alcantarillado doméstico. Muchos de estos PF y sus metabolitos son fácilmente propagados, persistentes y se bioacumulan en suelos y océanos. En la actualidad se han desarrollado nuevos materiales para la remoción de los contaminantes emergentes, como los MOF's, éstos son compuestos que tienen alta porosidad, fácil síntesis y estructuras modificables, por lo tanto, podrían ser adsorbentes muy efectivos para eliminar diversos contaminantes orgánicos.

En este trabajo se estudió la remoción de Amoxicilina mediante adsorción utilizando MOF UiO-66 y su posterior modificación con Ni, como adsorbente. La incorporación de níquel se realizó mediante impregnación húmeda de manera de obtener un 4 % de NiO. Los adsorbentes se caracterizaron por: Acidez Total, Migración Electroforética (ME), FTIR-UATR, TGA y SEM.

La capacidad de adsorción se determinó en un sistema Batch para una solución artificial de 20 mg L<sup>-1</sup> de Amoxicilina en agua y una masa de adsorbente aproximadamente de 0,04 g. La cuantificación de Amoxicilina se realizó mediante HPLC-UV (LOD = 1,12 mg L<sup>-1</sup>, LOQ = 3,73 mg L<sup>-1</sup> y LOL 25 mg L<sup>-1</sup>) y los resultados de capacidad de adsorción se expresaron como mg de Amoxicilina adsorbidos por gramo de adsorbente.

Los resultados de fuerza ácida indicaron que ambos materiales estudiados, presentan una fuerza correspondiente a sitios ácidos débiles, y una densidad de sitios ácidos levemente mayor para el adsorbente modificado con Ni. El resultado de las micrografías obtenidas por SEM es concordante con la estructura típica del MOF UiO-66. El resultado del análisis TGA arrojó que la temperatura máxima para calcinar el MOF UiO-66 luego de impregnar es de 300 °C, para asegurar la formación de NiO. La capacidad de adsorción del MOF UiO-66 (7,85 mg g<sup>-1</sup>) aumenta con la incorporación de Ni (18,60 mg g<sup>-1</sup>), debido probablemente a que la incorporación de Ni aumenta la capacidad de adsorción vía una retrodonación electrónica mediante  $\pi$  complejación.

Agradecimientos: Beca doctorado nacional ANID N°21230611



## Optimización racional de catalizadores Cu/MeO<sub>x</sub> para la conversión de CO<sub>2</sub> a metanol

José Arocha, Yenisel Hernández, Tatiana Bustamante, Alejandro Karelovic\*

Laboratorio de Carbón y Catálisis (CarboCat), Departamento de Ingeniería Química, Facultad de Ingeniería, Universidad de Concepción, Concepción 4070386, Chile.

[jarocho2023@udec.cl](mailto:jarocho2023@udec.cl)

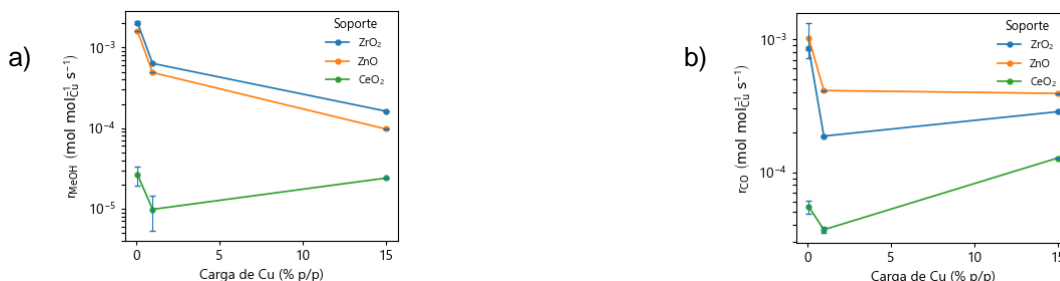
La síntesis de metanol a partir de CO<sub>2</sub> e H<sub>2</sub> renovable es clave para cerrar el ciclo del carbono<sup>1</sup>. En catalizadores de Cu, la interacción metal-soporte y el tamaño de partícula determinan la ruta mecanística (formiato (HCOO\*) vs. RWGS (CO)) y la selectividad<sup>2</sup>. Estudios recientes muestran que especies de Cu atómicamente dispersas (unidades Cu<sub>1</sub>-O<sub>3</sub>) en óxidos como ZrO<sub>2</sub> favorecen la formación de HCOO\* y la producción de CH<sub>3</sub>OH con alta selectividad<sup>3</sup>.

Sobre esa base, se sintetizaron Cu/MeO<sub>x</sub> (Me = Zr, Zn, Ce; 0.1–15% en peso de Cu) por coprecipitación, optimizando pH y T mediante modelación termodinámica con PHREEQC (software de modelación geoquímica para especiación e índices de saturación). Los sólidos se caracterizaron por fisisorción de N<sub>2</sub> a 77 K (BET), XRD, TPR-H<sub>2</sub> y FE-SEM/EDS. La evaluación catalítica se realizó en reactor de lecho fijo de acero inoxidable (pre-reducción en H<sub>2</sub> (250 °C, 1 h) a 600 kPa-H<sub>2</sub>, 200 kPa-CO<sub>2</sub>, 190–250 °C y conversión <10% para análisis cinético.

Los materiales presentan áreas específicas altas (tabla 1) y XRD sin señales de CuO lo que sugiere alta dispersión de Cu. En todas las series los perfiles TPR-H<sub>2</sub> se desplazan a mayor temperatura al disminuir la carga de Cu (tabla 1), indicando interacción Cu-soporte más fuerte y estabilización de especies Cu<sup>δ+</sup>-O<sub>x</sub>. En concordancia, las imágenes FE-SEM/EDS muestran una distribución homogénea del metal sin agregados micrométricos. En Cu/ZrO<sub>2</sub> y Cu/ZnO, la velocidad normalizada por mol de Cu crece al disminuir la carga y muestra un máximo en 0.1% (figura 1a), simultáneamente disminuye r<sub>CO</sub>, consistente con un cambio en la naturaleza de los sitios activos (figura 1b). En el caso Cu/CeO<sub>2</sub> exhibe baja actividad a cargas menores. La selectividad a MeOH aumenta al bajar la carga de Cu en Cu/ZrO<sub>2</sub> y Cu/ZnO, mientras que  $X_{CO_2} \cdot S_{MeOH}$  presenta un máximo cercano a 1% Cu.

**Tabla 1.** Composición y propiedades: carga de Cu, área específica (SBET) y temperatura de reducción de los catalizadores.

Análisis	Catalizador (CZr = Cu/ZrO <sub>2</sub> ; CZ = Cu/ZnO; CCe = Cu/CeO <sub>2</sub> ; x = %Cu p/p)								
	CZr0.1	CZr1	CZr15	CZ0.1	CZ1	CZ15	CCe0.1	CCe1	CCe15
SBET (m <sup>2</sup> g <sup>-1</sup> )	185	200	209	66	57	73	91	101	53
Tred (°C)	389	350	194	430	209	221	351	253	185



**Figura 1.** (a)  $r_{MeOH}$  y (b)  $r_{CO}$  a 230 °C y 8 bar en función de la carga de Cu. Barras: desviación de los últimos 4 puntos en estado estable (3–6 h).

La modelación termodinámica acoplada a coprecipitación permite dirigir precursores y lograr Cu altamente disperso con desempeño mejorado a cargas ultra bajas (0.1–1%). En la siguiente etapa se realizarán HR-TEM/EDS, XPS y XAS (operando) para verificar la naturaleza atómica de los centros de Cu y su relación con la ruta a metanol.

## Síntesis, caracterización y evaluación de un catalizador bifuncional $\text{In}_2\text{O}_3\text{-ZrO}_2\text{/SAPO-34}$ para la hidrogenación de $\text{CO}_2$ a olefinas ligeras

Yenisel Hernández\*, Flavia Troncozo, José Arocha, Tatiana M. Bustamante, Romel Jiménez\*

*Laboratorio de Carbón y Catálisis (CarboCat), Departamento de Ingeniería Química, Facultad de Ingeniería, Universidad de Concepción, Concepción 4070386, Chile. [yenhernandez2023@udec.cl](mailto:yenhernandez2023@udec.cl), [romeljimenez@udec.cl](mailto:romeljimenez@udec.cl)*

La hidrogenación de  $\text{CO}_2$  a olefinas ligeras es una estrategia prometedora para reducir emisiones de gases de efecto invernadero y promover una economía circular. Catalizadores de  $\text{In}_2\text{O}_3$  promovido con óxidos como  $\text{ZrO}_2$ ,  $\text{Cr}_2\text{O}_3$  o  $\text{CeO}_2$ , han mostrado alta eficiencia en la activación de  $\text{CO}_2$ , destacando  $\text{In}_2\text{O}_3\text{-ZrO}_2$  por su selectividad y estabilidad. La conversión de  $\text{CO}_2$  a olefinas ligeras se ha logrado empleando catalizadores bifuncionales preparados por mezclado físico (MF), técnica simple y económica que combina una fase redox con una fase ácida, como SAPO-34, que favorece la formación de enlaces C–C y mejora la selectividad. Sin embargo, esta metodología presenta limitada capacidad para controlar la distribución entre fases, lo que puede restringir la transferencia eficiente de intermediarios como el metanol. En este trabajo se propone una estrategia alternativa basada en impregnación húmeda incipiente (IWI), que permite una integración funcional más precisa entre fases. Esta configuración promueve interacciones sinérgicas y podría mejorar la eficiencia en la conversión de  $\text{CO}_2$  a olefinas ligeras, superando así las limitaciones del diseño convencional.

Se prepararon dos catalizadores bifuncionales de  $\text{In}_2\text{O}_3\text{/SAPO-34}$  (InSP) e  $\text{In}_2\text{O}_3\text{-ZrO}_2\text{/SAPO-34}$  (InZrSP) mediante IWI, utilizando zeolita SAPO-34 previamente calcinada. Para comparar el efecto del confinamiento espacial, se prepararon dos sistemas por MF: (i) un lecho tándem  $\text{In}_2\text{O}_3\text{/ZrO}_2\text{+ SAPO-34}$  (1:2, contacto débil) y (ii) una mezcla entre  $\text{In}_2\text{O}_3\text{-ZrO}_2$  y el material bifuncional  $\text{In}_2\text{O}_3\text{-ZrO}_2\text{/SAPO-34}$ , ambos previamente tamizados (230–380  $\mu\text{m}$ ). Los lechos se diluyeron con arena de cuarzo (1:1) y se aplicó un tratamiento con  $\text{NH}_4\text{NO}_3$  0,1 M a los catalizadores obtenidos por IWI y a la SAPO-34 empleada en los sistemas por MF para favorecer la generación de sitios ácidos tipo Brønsted.

Las muestras sintetizadas se caracterizaron por XRD, TPR- $\text{H}_2$ , Adsorción de  $\text{N}_2$  a 77K (BET) y FE-SEM/EDS. El análisis por XRD evidenció la estructura tipo CHA de la SAPO-34 y la presencia de  $\text{In}_2\text{O}_3$  cúbico altamente disperso (~4.3%wt). FE-SEM/EDS mostró una distribución homogénea de los elementos activos (P, Si, Al, O, In, Zr) con una razón superficial Si/Al~0.25, acorde a SAPO-34 moderadamente ácida. Los perfiles TPR- $\text{H}_2$  evidenciaron mayor homogeneidad estructural de la fase redox en los sistemas preparados por IWI, sin señales de reducción a baja temperatura, como en los materiales preparados por MF. El análisis BET mostró áreas superficiales de 407  $\text{m}^2\text{/g}$  (InSP) y 393  $\text{m}^2\text{/g}$  (InZrSP), respecto a los 550  $\text{m}^2\text{/g}$  de la SAPO-34, conservando en todos los casos una microporosidad dominante. En conjunto, los resultados sugieren que la incorporación de la fase activa preserva la estructura y la microporosidad, con indicios indirectos compatibles con una acidez característica de SAPO-34 moderada. Se realizó la evaluación del desempeño catalítico de los materiales sintetizados (640 kPa $\text{H}_2$  – 160 kPa $\text{CO}_2$ , 220-350°C, 25 mLmin $^{-1}$ ) y los resultados preliminares evidencian diferencias significativas en la conversión y selectividad según el método de síntesis, lo que será analizado en detalle durante el congreso.

Los resultados obtenidos evidencian que la configuración espacial entre las fases redox y ácida impacta directamente en la eficiencia y selectividad del proceso, subrayando la necesidad de diseñar catalizadores bifuncionales que equilibren una integración estructural adecuada con la conservación de las propiedades individuales de cada fase, a fin de optimizar la conversión selectiva de  $\text{CO}_2$  a olefinas ligeras.

## Estudio de la adsorción aleatoria de moléculas inhibitoras en superficies amorfas de óxidos metálicos

D. Rojas, L. Lodeiro, T. E. Sandoval

Universidad Técnica Federico Santa María, Departamento de Ingeniería Química y Ambiental.  
diego.rojasso@usm.cl

La miniaturización extrema que se ha logrado en la industria de semiconductores y producción de microelectrónica exige actualmente de una manufactura con control y precisión a escala atómica. La técnica de manufacturación *atomic layer deposition* (ALD) permite una deposición controlada capa a capa, mediante reactivos en fase gas, reduciendo el consumo y pérdida de materiales, disminuyendo la huella de CO<sub>2</sub> y haciendo más sustentable el proceso. Sin embargo, la necesidad de crear patrones en el sustrato exige el bloqueo de la deposición en las áreas de no crecimiento, lo que se conoce como *area-selective ALD*. La deposición selectiva se logra con el empleo de inhibidores que desactivan zonas de la superficie, evitando que el precursor se adsorba en sitios no deseados, siendo los *small molecule inhibitors* (SMIs) una alternativa atractiva, por su compatibilidad con el proceso industrial.

El estudio de esta área mediante simulaciones *density functional theory* (DFT) está restringido a pequeñas áreas de superficie dado al costo computacional, por lo que otros métodos son utilizados para estudiar el empaquetamiento de los SMIs a mayor escala, por ejemplo, la *random sequential adsorption* (RSA) que consiste en depositar inhibidores aleatoriamente sobre una superficie/patrón, permitiendo estudiar la cobertura de las superficies.

Los estudios RSA principalmente utilizan superficies cristalinas, las cuales siguen un patrón ordenado de sitios activos. Sin embargo, en condiciones reales las superficies pueden presentar deformaciones o desorden estructural, de modo que los sitios activos dejan de exhibir un orden perfecto.

Es por ello que se plantea la necesidad de un estudio en superficies amorfas para comprender las consecuencias de la amorfización en las simulaciones RSA. Para esto, construimos superficies amorfas partiendo de la estructura cristalina a la cual se le ha aplicado un desplazamiento aleatorio para que los sitios se muevan dentro de un radio determinado, lo que proporciona una aproximación de una estructura amorfa. Para la caracterización de estas se ha utilizado la teselación de Voronoi, que divide el plano según el sitio activo más cercano. De esta manera extraemos parámetros como la relación  $\text{perímetro}^2/\text{área}$  o la topología de las celdas formadas, caracterizando las superficies amorfas y sus diferentes patrones.

Al comparar las teselaciones de Voronoi de superficies cristalinas y amorfas, se observa un cambio en la distribución de las propiedades de celdas generadas, lo que posiblemente tenga un efecto en la cobertura obtenida por los SMIs. Por ello se propone realizar simulaciones RSA tanto en superficies amorfas y cristalinas, comparando sus resultados, y así correlacionar el grado de amorficidad y su efecto en la cobertura por SMIs. Este análisis permitirá anticipar limitaciones y oportunidades en la deposición selectiva en escenarios más realistas, donde las superficies rara vez son perfectamente cristalinas.

## Molecular Understanding of the Solute-Hydrotrope Aggregation in Aqueous Solutions: A Molecular Dynamics Approach

Esteban Cea-Klapp<sup>a,c,\*</sup>, Dinis O Abranches<sup>b</sup>, Eliseo Marin-Rimoldi<sup>b</sup>, Edward J. Maginn<sup>b</sup>, Nicolás F. Gajardo-Parra<sup>c</sup>, Roberto I. Canales<sup>c</sup>, José Matías Garrido<sup>a</sup>

<sup>a</sup> *Departamento de Ingeniería Química, Universidad de Concepción, Chile.*

<sup>b</sup> *Department of Chemical and Biomolecular Engineering, University of Notre Dame, USA.*

<sup>c</sup> *Departamento de Ingeniería Química y Bioprocesos, Pontificia Universidad Católica de Chile, Chile.*

*\* Email: [estebancea@udec.cl](mailto:estebancea@udec.cl)*

Hydrotropy is a phenomenon where an amphiphilic molecule (i.e., the hydrotrope) is able to enhance the aqueous solubility of a hydrophobic solute. Understanding the molecular mechanisms underlying this process is essential to design novel hydrotropes to optimize solubilization processes of poorly soluble compounds. As such, this study investigates the hydrotropic behavior of 1,2-alkanediols in enhancing the aqueous solubility of syringic acid using molecular dynamics (MD) simulations. The analysis carried out here employs, in particular, Kirkwood-Buff integrals (KBI), solvation free energies, and radial distribution functions (RDF). Both the hydrotropes and solute were chosen based on their sustainable character and previous use in hydrotropic processes.

The GAFF2 force field and SPC/E water model were used to study the system. The charge distributions for the 1,2-alkanediols and syringic acid were obtained using the RESP2(0.5) methodology to account for the polarization of the molecules in the solvents. This combination of force fields successfully reproduced the experimental KBI values in binary mixtures of 1,2-ethanediol + water and 1,2-propanediol + water.

Solvation free energy calculations underscore the thermodynamic favorability of syringic acid solubilization in the presence of 1,2-alkanediols, aligning with experimental trends. The MD simulations reveal a pronounced affinity between syringic acid and the 1,2-alkanediols, particularly at low hydrotrope concentrations. KBI analysis indicates preferential solvation of syringic acid by the hydrotropes, suggesting a significant shift in local solute-solvent structure. The RDF data shows higher peak intensities and specific interaction patterns between the aliphatic chains of the alkanediol molecules and syringic acid, corroborating that the apolar moieties of the hydrotrope aggregate around the hydrophobic solute molecule.

Additionally, the analysis code for KBI calculation is available to the public at [https://github.com/MaginnGroup/syringic\\_acid\\_KBI](https://github.com/MaginnGroup/syringic_acid_KBI), including example GROMACS files along with the force field parameters for each molecule used in this work.

## Efectos de la velocidad de agitación en la producción heteróloga de Lcp<sub>K30</sub> a partir de la medición de $k_{La}$ en biorreactor

J. Mellado<sup>1</sup>, C. Guajardo-Flores<sup>1</sup>, R. Andler<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Escuela de Ingeniería en Biotecnología, Laboratorio de Bioprocesos, Centro de Biotecnología de los Recursos Naturales (CENBio), Universidad Católica del Maule, Talca, Chile.

[juan.mellado@alumnos.ucm.cl](mailto:juan.mellado@alumnos.ucm.cl)

La enzima Latex clearing protein (Lcp) es una enzima fundamental para la degradación oxidativa del caucho natural. Su mecanismo de acción consiste en la oxidación de los enlaces C=C presente en el caucho, formando oligoisoprenoides. La enzima Lcp<sub>K30</sub> ha sido recientemente caracterizada cinéticamente, demostrando una conversión de caucho natural a oligoisoprenoides de un 80%. A pesar de este gran avance dentro de la caracterización de la enzima en cuestión todavía se requiere realizar una optimización en su proceso de producción. El coeficiente volumétrico de transferencia de oxígeno ( $k_{La}$ ) es un parámetro que permite evaluar la transferencia de oxígeno desde una fase gaseosa a una líquida tomando en consideración factores geométricos del recipiente a usar, así como también factores físicos como la velocidad de agitación, la temperatura, la presión, entre otros parámetros. Esto permite generar mejores diseños de procesos dependientes de oxígeno, facilitando su escalamiento.

Este trabajo tiene por objetivo relacionar la velocidad de agitación aplicada en un medio Terrific Broth (TB) + *Escherichia coli* BL21 (DE3) + p.4782:1::Lcp<sub>K30</sub> con L-ramnosa como inductor en un volumen útil de 2 L dentro de un biorreactor de 6 L y la producción de Lcp<sub>K30</sub>. Para esto inicialmente se realizó una transformación de *E. coli* BL21 (DE3) competentes en conjunto al plásmido p.4782:1::Lcp<sub>K30</sub>, incubando por 12 h en placas con medio LB + kanamicina. Una colonia fue traspasada a medio líquido, correspondiente al preinóculo (20 mL LB + 20  $\mu$ L kanamicina + 1 colonia de *E. coli*) y posteriormente se preparó el inóculo (100 mL LB + 100  $\mu$ L kanamicina + 1 mL preinóculo) ambos cultivados por 12 h. Los cultivos principales se realizaron en biorreactor (Minifors 2, Infors) utilizando 2 L de medio TB líquido (1 L de medio TB contiene 24 g de extracto de levadura, 12 g de triptona, 15,6 mL de glicerol, 12,5 g de K<sub>2</sub>HPO<sub>4</sub> y 2,3 g de KH<sub>2</sub>PO<sub>4</sub>) a 22 °C, 0,5 vvm, a velocidades de agitación de 400, 600 y 800 RPM durante 48 h. Los valores de  $k_{La}$  en biorreactores fueron obtenidos a partir de la técnica de medición dinámica de este parámetro utilizando el porcentaje de oxígeno disuelto como valores de referencia para el cálculo de  $k_{La}$ . Para la concentración de biomasa final obtenida se realizó una medición por peso seco. Para la purificación de la enzima se utilizó una columna de afinidad Streptactin XT de flujo gravitacional y para su posterior cuantificación se aplicó el método de Bradford. Para evaluar la pureza de la enzima se realizó un SDS-PAGE para visualizar la integridad de la enzima estandarizando su cantidad a 5  $\mu$ g.

En cuanto a las concentraciones de biomasa obtenidas se observó una gran influencia de la velocidad de agitación, siendo de  $3,24 \pm 0,064$  g/L a 400 RPM,  $7,44 \pm 0,15$  g/L a 600 RPM y  $10,08 \pm 0,19$  g/L a 800 RPM. Los valores de  $k_{La}$  obtenidos fueron de  $20,9$  h<sup>-1</sup> a 400 RPM,  $55,6$  h<sup>-1</sup> a 600 RPM y  $101$  h<sup>-1</sup> a 800 RPM. La concentración de enzima obtenida por el método de Bradford a nivel de biorreactor fue de 5,0, 6,8 y 0,5 mg/L a 400, 600 y 800 RPM, respectivamente. La cantidad de enzima obtenida fue de 2498,34, 1044,02 y 250,23  $\mu$ g en 400, 600 y 800 RPM respectivamente. En el valor de  $k_{La}$  y velocidad de agitación en el cual se obtuvo una mayor concentración de Lcp<sub>K30</sub> fue en el cultivo a 600 rpm, con un  $k_{La}$  de  $55,6$  h<sup>-1</sup> y una cantidad de enzima de 6,8 mg/L. Los resultados obtenidos de SDS-PAGE permiten establecer la integridad y pureza de la enzima.

Los reportes identificados en este trabajo permiten caracterizar de mejor forma la producción de Lcp<sub>K30</sub>, lo cual da un paso adelante a la optimización del proceso de producción. Sin embargo, se requieren más estudios con respecto al rol específico que posee el oxígeno en la producción heteróloga de Lcp<sub>K30</sub> con respecto a su limitación y necesidad para ser usado en este proceso. Esta investigación fue financiada a través del proyecto FONDECYT regular 1230313.



## Development of capsules based on porous volcanic aggregates coated with PVA for self-healing in cementitious materials

Carlos Guamán-Marquines<sup>1(\*)</sup>, José Norambuena-Contreras<sup>2</sup>, Manuel Chávez-Delgado<sup>3</sup>, Erik Alpizar-Reyes<sup>1</sup>

<sup>1</sup> *Laboratory of Biobased Macromolecules (LMBB), Department of Process And bioproducts Engineering, Universidad del Bío-Bío, Concepción, Chile.*

<sup>2</sup> *Materials and Manufacturing Research Institute (M2RI), Department of Civil Engineering, Faculty of Science and Engineering, Swansea University, Bay Campus, United Kingdom.*

<sup>3</sup> *Laboratorio de Ingeniería Civil, Departamento de Ingeniería Civil, Facultad de Ingeniería, Sede Concepción, Universidad Andres Bello, Chile.*

[carlos.guaman2401@alumnos.ubiobio.cl](mailto:carlos.guaman2401@alumnos.ubiobio.cl)

Population growth demands increasingly larger infrastructures, with concrete being the most widely used material due to its durability and versatility. However, prolonged exposure to environmental factors results in the formation of microcracks and facilitates the entry of aggressive agents, which accelerates degradation mechanisms and causes structural deterioration. In response to this challenge, the development of self-healing cementitious materials has emerged as a promising alternative to improve structural durability and reduce maintenance costs. In this study, bio-inspired capsules were developed using porous volcanic aggregates as carrier agents for self-healing concrete. The capsules were produced through a vacuum saturation process (120 mbar) with sodium silicate as the healing agent, followed by the application of a 6% by weight polyvinyl alcohol (PVA) coating to ensure the controlled release of the encapsulated material. The characterization included morphological analysis (SEM), circularity measurements, porosity tests, compressive strength evaluation, and chemical composition analysis (EDS and FTIR-ATR). The self-healing efficiency was evaluated through flexural tests. RILEM-type cementitious mortars were prepared with 4% by weight of  $\text{Na}_2\text{SiO}_3$  capsules. The samples were cured in a standard chamber ( $20 \pm 2^\circ\text{C}$  and 95% relative humidity) and pre-cracked up to 80% of their maximum strength ( $\sigma_{\text{max}}$ ) at 14 days of age, to induce microcracks. After this pretreatment, they were subjected to an additional curing period of 7 days under the same conditions, after which the compression test was performed to determine the recovered strength. SEM analysis revealed an interconnected porous structure with average sizes of  $7.92 \pm 0.15$  mm and circularity values between 0.72 and 0.74. The saturation technique achieved an optimal efficiency of 53.1%. EDS analysis confirmed effective encapsulation, with more than 5% by weight of sodium (Na), a key element of  $\text{Na}_2\text{SiO}_3$ , while FTIR-ATR confirmed the presence of functional groups from both the wall material and the curing agent. The application of a 6% PVA coating improved the compressive strength of the capsules from 2.15 to 2.47 MPa, potentially ensuring capsule integrity during concrete mixing processes. The self-healing efficiency in cementitious mortars with 4% by weight of sodium silicate capsules, coated with 6% PVA, resulted in a recovery of more than 20% of the flexural strength in the samples after controlled cracking at 7 days of curing. These results show that the capsules may be integrated into cementitious materials to enhance structural durability and minimise cement manufacturing costs and  $\text{CO}_2$  emissions.

## Thermal hydrolysis of waste activated sludge: impacts on nutrient release, melanoidins formation, and downstream resource recovery processes

J. Pavez-Jara<sup>1</sup>, D. Jeison<sup>2</sup>

**1,2** Pontificia Universidad Católica de Valparaíso, Valparaíso, Chile.

[javier.pavez@PUCV.cl](mailto:javier.pavez@PUCV.cl)

Thermal hydrolysis (THP) has emerged as a key technology for enhancing the energy recovery and sludge reduction performance of wastewater treatment plants. This work explores the environmental and operational consequences of implementing THP prior to mesophilic anaerobic digestion (AD), with a focus on nutrient release dynamics and the formation of refractory organic compounds, particularly melanoidins.

The study demonstrates that THP promotes the solubilization of total ammoniacal nitrogen (TAN) and phosphate ( $\text{PO}_4^{3-}$ ), thereby increasing their concentrations in the liquid phase of the sludge matrix. While TAN concentrations rise significantly during subsequent AD, potentially inhibiting acetotrophic methanogens, phosphate availability is further influenced by precipitation with multivalent cations. This was particularly relevant in sludge from enhanced biological phosphorus removal (EBPR) systems. These dynamics are highly dependent on hydrolysis temperature and sludge origin, highlighting the importance of tailored operational strategies for full-scale systems.

Additionally, the formation of melanoidins, which are brown-coloured, aromatic compounds produced through Maillard type reactions was observed to significantly alter the chemical characteristics of the digestate and its reject water. Low-molecular-weight melanoidins were found to be partially biodegradable during AD, whereas larger fractions persisted, contributing to the accumulation of humic substances (HSs) in the liquid phase. The presence of HSs was shown to interfere with downstream nutrient recovery processes. Particularly the impact of HSs on struvite precipitation was evaluated, revealing that melanoidins and humic acids reduce crystals yield, modify precipitates morphology, and alter colour factors, which can affect the quality and marketability of recovered phosphorus products.

Furthermore, full-scale evaluations of partial nitrification/anammox (PN/A) systems receiving THP-derived reject water revealed increased TAN and aromatic organics loads, with lower-than-expected nitrate concentrations in effluents. These findings suggest altered stoichiometry and higher oxygen demand, along with potential limitations in trace element availability. All of which must be considered to ensure efficient nitrogen removal in full-scale systems.

Altogether, this research provides a comprehensive understanding of the interactions between thermal pre-treatment, anaerobic digestion, and advanced nutrient recovery technologies. The insights generated contribute to the development of more sustainable, integrated wastewater treatment strategies that align with environmental protection goals, promote nutrient reuse, and enhance energy efficiency in line with the principles of circular economy and climate change mitigation.

## Simulación de sistemas bioelectroquímicos: Aplicación a la conversión de $\text{CO}_2$ con formiato deshidrogenasa

Sara García<sup>1</sup>, Pablo Bobillier<sup>1</sup>, Carminna Ottone<sup>1</sup>, Raúl Conejeros<sup>1</sup>

<sup>1</sup> Escuela de Ingeniería Bioquímica. P. Universidad Católica de Valparaíso. Avenida Brasil 2085, Valparaíso.

*raul.conejeros@pucv.cl*

La transformación biológica del dióxido de carbono ( $\text{CO}_2$ ) en moléculas orgánicas de mayor complejidad ha cobrado una relevancia creciente en el contexto de la economía circular, la química verde y el concepto de biorrefinería. Este enfoque no solo permite valorizar un residuo global como el  $\text{CO}_2$ , sino que también ofrece rutas sostenibles para la obtención de productos químicos con amplio uso industrial. Entre los productos objetivo más relevantes destaca el ácido fórmico ( $\text{HCOOH}$ ) y su forma aniónica (formiato,  $\text{HCOO}^-$ ). Además de su uso tradicional como conservante y agente antibacteriano, el ácido fórmico ha despertado interés como portador de hidrógeno líquido, combustible renovable y materia prima para la síntesis sostenible de análogos petroquímicos como el metanol.

La enzima formiato deshidrogenasa (FDH, EC 1.17.1.9) resulta prometedora para la conversión reductiva de  $\text{CO}_2$  en formiato, al catalizar esta reacción de manera eficiente y con alta especificidad. Sin embargo, su aplicabilidad práctica se ve limitada por la necesidad de equivalentes estequiométricos de NADH (un cofactor costoso) y por una tendencia cinética más pronunciada hacia la oxidación de formiato en lugar de su formación. Una estrategia atractiva para solventar esta limitación es la regeneración electroquímica del NADH, aprovechando los avances en materiales electrocatalíticos. Este enfoque permite acoplar la biocatálisis con una fuente eléctrica externa, eliminando la necesidad de añadir continuamente cofactores reducidos. Un desafío clave en el desarrollo de procesos bioelectroquímicos para su producción es la identificación de la estrategia óptima de uso del biocatalizador, es decir, si la enzima debe emplearse en solución libre, inmovilizada directamente sobre el electrodo o soportada sobre una matriz porosa externa.

En este contexto, el presente trabajo propone el desarrollo de un modelo computacional capaz de simular estas condiciones bajo distintos escenarios operativos, con el objetivo de predecir el rendimiento catalítico y compararlo con datos experimentales. Los parámetros cinéticos de la enzima fueron determinados experimentalmente considerando concentración de formiato en el rango de 10 a 60 mN y de  $\text{NAD}^+$  de 0.2 a 1 mM, determinándose que un mecanismo ping-pong de reacción secuencial ordenado. Estos valores fueron utilizados para realizar simulaciones utilizando el software Python 3.13. Las simulaciones consideraron el uso de enzima inmovilizada en partículas de sílica de  $0.4 \mu\text{m}$  de diámetro. El modelo de reacción fue acoplado a un modelo de reacción por lotes, considerando la regeneración del cofactor con una constante cinética  $k_{reg} = 0.000176 \text{ s}^{-1}$ .

A largo plazo, este enfoque contribuirá al avance de tecnologías de conversión de  $\text{CO}_2$  más eficientes, robustos y compatibles con aplicaciones a mayor escala en el contexto de tecnologías limpias.



## Modelado molecular y análisis *in vitro* de la interacción de Latex clearing protein de *Streptomyces* sp. K30 (Lcp<sub>K30</sub>) con aditivo antioxidante presente en caucho vulcanizado

Brito-Cabezas Javiera<sup>1</sup>, Javiera Baeza Jara<sup>2</sup>, Rodrigo Andler<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Escuela de Ingeniería en Biotecnología, Laboratorio de Bioprocesos, Centro de Biotecnología de los Recursos Naturales (CENBio), Universidad Católica del Maule, Talca, Chile.

<sup>2</sup>Centro de Bioinformática, Simulación y Modelado (CBSM), Facultad de Ingeniería, Universidad de Talca, Talca, Chile.

[javiera.brito@alu.ucm.cl](mailto:javiera.brito@alu.ucm.cl)

Los neumáticos están compuestos entre 60%-70% de caucho natural que, a su vez, está compuesto en un 90% por poli-(cis-1,4-isopreno). Según literatura, este polímero puede ser escindido por tres enzimas: Rubber Oxigenases A y B, y Latex clearing protein (Lcp), las cuales generan oligoisoprenoides de diferentes tamaños a partir de la escisión. No obstante, los neumáticos están constituidos por red molecular que contiene variedad de aditivos vulcanizantes adicionales. En este contexto, un estudio realizado con Lcp de *Gordonia polysoprenivorans* VH2 reportó que, cuando el acoplamiento del complejo enzima-poli-(cis-1,4-isopreno) ocurre en presencia de aditivos vulcanizantes la actividad catalítica de la enzima se ve comprometida, representando una barrera importante en su uso como solución biotecnológica de aplicación real.

Lcp de *Streptomyces* sp. K30 (Lcp<sub>K30</sub>) fue la primera oxigenasa del caucho descubierta y existe una robusta caracterización de su actividad y su estructura, lo que representa una ventaja en el afán de comprender su mecanismo. Por lo tanto, con la finalidad de ampliar el conocimiento sobre Lcp bajo uno de los contextos específicos que han sido reportados como limitantes de su actividad catalítica, el presente estudio tiene por objetivo investigar el efecto de N-(1,3-dimetilbutil)-n'-fenil-p-fenilendiamina (6PPD) sobre la actividad enzimática de Lcp<sub>K30</sub> mediante análisis *in vitro* e *in silico* incluyendo desde la transformación bacteriana y producción heteróloga de Lcp<sub>K30</sub> en biorreactores, hasta el análisis de actividad catalítica y modelado molecular de las interacciones claves entre 6PPD y la enzima Lcp<sub>K30</sub> que afectan la acción de escisión.

Se encontró que el aditivo vulcanizante 6PPD, utilizado comúnmente como antioxidante en neumáticos, es capaz de acceder y formar enlaces, pi-catión y puentes salinos, con el embebido grupo hemo que Lcp<sub>K30</sub> utiliza como sitio activo y afecta residuos claves involucrados en el movimiento enzimático y el correcto plegamiento del sustrato para la catálisis, lo que provoca una disminución del 53% de la actividad enzimática en una concentración determinada como media (6,33 M).

Este estudio permitió profundizar en la comprensión de los mecanismos interactivos de Lcp<sub>K30</sub> y su potencial para convertirse en un método biotecnológico para el tratamiento del caucho vulcanizado.

## Valorización de residuos cerveceros a través de la implementación de una biorrefinería para la obtención de bioproductos

Eric Pérez Cornejo<sup>1</sup>, Javier Aguilera<sup>1</sup>, José Duarte<sup>2</sup>, Maribel Mamani<sup>1</sup>, Rodrigo Andler<sup>1</sup>

<sup>1</sup>*Escuela de Ingeniería en Biotecnología, Laboratorio de Bioprocesos, Centro de Biotecnología de los Recursos Naturales (CENBio), Universidad Católica del Maule, Talca, Chile.*

<sup>2</sup>*Departamento de Medicina Traslacional, Laboratorio de Canales Iónicos y Reproducción, Universidad Católica del Maule, Talca, Chile.*

Email: [eric.perez@alu.ucm.cl](mailto:eric.perez@alu.ucm.cl)

Hasta el año 2020, la industria agrícola chilena generaba unos 4,6 millones de toneladas de residuos sólidos orgánicos. De esta cantidad, sólo un 1% de los residuos es reutilizado para la obtención de productos de valor agregado. El principal residuo sólido generado por la industria cervecera es el bagazo cervecero, un material lignocelulósico, que representa el 85% del residuo de la cerveza. Los principales componentes estructurales esta materia lignocelulósica corresponden a celulosa, hemicelulosa y la lignina, cuya composición es variable, pero puede llegar a ser de aproximadamente un 15,2%, 41,3% y 11,41%, respectivamente, aunque también puede llegar a tener un contenido del 18,5% de proteínas, un 8,4% de lípidos, y el resto almidón y cenizas, además de una pequeña cantidad de compuestos fenólicos. Por esta razón, el bagazo cervecero tiene el potencial de poder ser tratado en una biorrefinería, pudiendo recuperar una gran cantidad de productos como azúcares, proteínas e incluso polifenoles con propiedades antibióticas, antioxidantes, y otros productos de interés comercial como el Polihidroxibutirato (PHB), un polímero biodegradable y biocompatible de gran interés.

El objetivo de esta investigación fue el de evaluar la extracción de diferentes compuestos y producción de PHB a partir de bagazo obtenido de la industria cervecera artesanal dentro de la región del Maule. Para determinar la cantidad de azúcares reductores presentes en el bagazo, se siguió un método de extracción de azúcares utilizado en una referencia previa para la obtención de compuestos fenólicos. Para esto, el bagazo se sometió a una extracción de azúcares con agua a 60°C a una concentración del 5% p/v, y se determinó la concentración de azúcares extraídos utilizando el reactivo 3,5-ácido dinitrosalicílico (DNS), obteniéndose una concentración de azúcares de 8,35 g/L. Esta solución de azúcares fue concentrada para ser utilizada como fuente de carbono en cultivos a escala de matraces de *Azotobacter vinelandii* OP, con el objetivo de producir PHB en medio BURK. Las condiciones de cultivo utilizadas fueron de una temperatura de 30°C y 72 horas de cultivo, logrando extraer 1,98 g/L de PHB a partir de 5,80 g de biomasa de *A. vinelandii* OP, es decir un 34% p/p. Al someter el bagazo a un tratamiento hidrotermal a 100°C, el hidrolizado obtenido fue sometido a dos análisis: Cuantificación de fenoles totales a partir del reactivo de Folin-Ciocalteu, y cuantificación de proteínas totales a partir de reactivo de Bradford, logrando determinar que se pudieron extraer 183,1 mg/L de fenoles totales y 0,24 mg/mL de proteínas totales.

Debido a la creciente demanda de cerveza a nivel nacional, y a la ingente cantidad de bagazo cervecero generado anualmente, la utilización de este material como materia prima para la obtención de compuestos y polímeros, tales como fenoles y PHB, tiene un gran potencial para la elaboración de bioproductos de alto valor agregado con un menor impacto sobre el medioambiente, contribuyendo con la economía circular.

## Caracterización enzimática de Lacasa de *Trametes versicolor* para el tratamiento degradativo del caucho vulcanizado

Victor Garrido<sup>1</sup>, Rodrigo Andler<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Escuela de Ingeniería en Biotecnología, Laboratorio de Bioprocesos, Centro de Biotecnología de los Recursos Naturales (CENBio), Universidad Católica del Maule.

[Victor.garrido@alumnos.ucm.cl](mailto:Victor.garrido@alumnos.ucm.cl)

El caucho vulcanizado es ampliamente usado en la industria por su alta resistencia y presenta grandes desafíos para su gestión como residuo. En Chile, hasta 2021 se generaban cerca de 140.000 toneladas anuales de residuos de neumáticos, pero solo un 17% eran gestionados adecuadamente. Si bien, existen estrategias como el reciclaje, la molienda y tratamientos térmicos o químicos, ninguna de estas enfrenta el problema real de contaminación, ni contienen o retienen al caucho de ser liberado al medio ambiente.

Si bien, la gestión de residuos de caucho vulcanizado constituye un desafío ambiental global, la degradación enzimática surge como una alternativa prometedora, aunque poco estudiada en cuanto a la eliminación de aditivos y estructuras aromáticas en su matriz. Entre las enzimas propuestas, la lacasa (Lac, EC 1.10.3.2) de *Trametes versicolor* (Lac<sub>TV</sub>), una oxidorreductasa multicobre de alta relevancia industrial por su capacidad para oxidar estructuras aromáticas en polímeros complejos, destaca, particularmente en su forma purificada, como potencial agente degradador en sistemas *in-vitro* debido a su versatilidad y bajo impacto ambiental. Sin embargo, la actividad de Lac<sub>TV</sub> frente a sustratos complejos como el caucho vulcanizado no se ha estudiado previamente. Por ello, esta investigación tiene como objetivo desarrollar metodologías para cuantificar y caracterizar su actividad oxidativa bajo distintas condiciones de pH mediante ensayos con ABTS y consumo de oxígeno.

Para la evaluación de la actividad enzimática de Lac<sub>TV</sub> por espectrofotometría, se preparó una solución stock de la enzima a una concentración de 1 mg/mL en agua Milli-Q. Como sustrato modelo se utilizó 2,2'-azino-bis(3-etilbenzotiazolina-6-sulfónico) (ABTS) en un rango de concentraciones de 0,1 a 20 mM. Para ajustar el pH de las reacciones, se emplearon los buffers fosfato de potasio 100 mM con valor de pH de 6,5 y acetato de sodio 100 mM con valor de pH de 4,5. Las reacciones enzimáticas se evaluaron mediante espectrofotometría, midiendo la absorbancia a una longitud de onda de 405 nm durante 10 minutos a 30°C, en mezclas de 2 mL que contenían 20 µg de Lac<sub>TV</sub>. Adicionalmente, se implementaron ensayos basados en el consumo de oxígeno para evaluar la actividad de Lac<sub>TV</sub> sobre diferentes mezclas de caucho, los cuales se llevaron a cabo en un reactor multicanal (RTS-8, Biosan), en el que se monitoreó la variación de la concentración de oxígeno disuelto a pH de 4,5 y 6,5 incubando por un total de 120 horas con agitación continua a 150 rpm, y una temperatura de 30°C. Cada reacción constó de 0,8 g de sustrato de caucho y 200 µg de enzima.

Se pudo evidenciar que Lac<sub>TV</sub> presenta actividades de 4,9; 5,1; 12,5 y 9,5 U/mg a pH 4,5 con concentraciones de ABTS de 2,5; 5; 10 y 20 mM respectivamente. Mientras que a pH 6,5 se midió actividad de 4,9; 5,2; 12,5 y 9,5 (U/mg) para las mismas concentraciones de ABTS. Sin embargo, en muestras más complejas como las que contienen caucho, solo se observó una variación de la concentración de oxígeno a pH 6,5, pero sin cambios detectables a pH 4,5. Estas variaciones observadas sugieren que la enzima puede verse afectada por el pH, y que podría estar interactuando con la matriz del caucho, lo cual es indicativo de actividad. La caracterización de la actividad oxidativa de Lac<sub>TV</sub> frente a estas matrices suponen un avance fundamental en la comprensión de su comportamiento en sistemas no convencionales, dando paso a nuevas posibilidades para el diseño de procesos de degradativos aplicados a residuos poliméricos de alto impacto ambiental basados en biocatálisis enzimática.

## Estudio de solventes para la extracción de moléculas desde la fase acuosa del *bio-oil*

Junior Lorenzo-Llanes<sup>1</sup>, Nicolás Gajardo-Parra<sup>1</sup>, Néstor Escalona<sup>1</sup>, Roberto I. Canales<sup>1,\*</sup>

<sup>1</sup>*Departamento de Ingeniería Química y Bioprocesos, Pontificia Universidad Católica de Chile, Av. Vicuña Mackenna 4860, Macul, 7820436 Santiago, Chile*  
*rocanalesm@uc.cl*

La producción de compuestos químicos a partir de materias primas renovables, como la biomasa lignocelulósica, ha suscitado un gran interés en investigaciones recientes. El *bio-oil* es un derivado de la biomasa y una valiosa fuente de diversos compuestos, entre ellos metoxifenoles, ácidos orgánicos y otros. Sin embargo, la separación de los compuestos del *bio-oil* es esencial para obtener productos químicos básicos que sustituyan a los derivados del petróleo. En particular, la fase acuosa del *bio-oil* (FAB) ha despertado interés para la recuperación de productos químicos de valor agregado. La extracción líquido-líquido (ELL) se ha identificado como una técnica eficaz para el fraccionamiento del *bio-oil* y la recuperación de sus productos.

Este estudio se centró en evaluar solventes para la extracción física y reactiva de ácido acético y acetol desde la FAB. Se llevó a cabo una selección exhaustiva de solventes utilizando COSMO-RS para estimar el coeficiente de distribución ( $K_d$ ) de cada soluto en un sistema bifásico solvente-agua. Los solventes más prometedores se evaluaron en cuanto a su impacto ambiental, de seguridad y para la salud humana antes de ser validados experimentalmente mediante mediciones de ELL. En los experimentos de ELL reactivo, los solventes seleccionados se combinaron con trioctilamina (TOA) o tributilfosfato (TBP) que son conocidos extractantes reactivos de ácido acético. Se analizaron los efectos de la temperatura y la concentración del extractante sobre el  $K_d$  para determinar las mejores mezclas de solvente con extractante. Entre los solventes probados, el 2-metiltetrahidrofurano y el 2-feniletanol demostraron un rendimiento superior en comparación con los terpenos. El uso de mezclas con TOA mejoró significativamente la extracción de ácido acético, aumentando el  $K_d$  hasta 10 veces en comparación con la ELL física, aunque no se observó ninguna mejora para el acetol. Por otra parte, los extractantes basados en TBP no mostraron mejoras significativas. Finalmente, se investigó experimental y teóricamente la extracción de acetol de sistemas acuosos utilizando solventes eutécticos (DES) basados en terpenos. Además, se realizaron estudios de ELL con mezclas de acetol, agua y solventes terpénicos para evaluar el rendimiento de la extracción. Los DES basados en terpenos elegidos fueron el timol, el eugenol, el eucaliptol, mezclas de los anteriores o con ácido octanoico, y se utilizó carvacrol puro como solvente de referencia. En este caso, se observa que el carvacrol es consistentemente mejor en la extracción de acetol, pero se pueden encontrar casos donde la mezcla timol con ácido octanoico supera su  $K_d$ . En general, la extracción de acetol es desafiante y se observan valores de  $K_d$  mucho menores comparados con el ácido acético.

## Evaluación de módulos planos y helicoidales para el proceso de destilación con membranas con capa de aire (AGMD) para la recuperación de aguas grises

A. Alfonso<sup>1</sup>, A. Chávez<sup>1</sup>, J. Romero<sup>1</sup>, V. Campos<sup>1</sup>, P. Moreno<sup>1</sup>, R. Abejón<sup>1</sup>,  
E. Quijada-Maldonado<sup>2</sup>

<sup>1</sup> Laboratorio de Procesos de Separación por Membranas (LabProSeM), Departamento de Ing. Química y Bioprocesos, U. de Santiago de Chile.

<sup>2</sup> Laboratorio de Intensificación de Procesos de Separación (SPI), Departamento de Ing. Química y Bioprocesos, U. de Santiago de Chile.

[amanda.chavez@usach.cl](mailto:amanda.chavez@usach.cl)

Los efectos del cambio climático han afectado de manera significativa a todas las regiones de Chile, especialmente en la disminución de precipitaciones, la cual se ve agravada por un incremento constante de la demanda de agua, debido al aumento de población y de actividades productivas. Así, surge la necesidad de explorar fuentes alternativas de agua fresca o reutilizada. Las aguas grises tratadas representan una buena oportunidad. Las aguas grises domiciliarias son todas aquellas aguas que corresponden a descargas de tinajas, duchas, lavaderos, lavatorios y otros sin contenido fecal.

En el presente estudio se propone la recuperación de agua desde una corriente pretratada de aguas grises, utilizando el proceso de destilación por membranas con capa de aire (AGMD), en dos configuraciones y geometrías diferentes, de alta eficiencia de transferencia. La destilación por membranas es una técnica de separación para la recuperación de agua, que puede hacer uso de energía térmica de baja calidad para calentar agua y evaporarla a través de membranas porosas hidrofóbicas que sirven de medio de contacto y soporte interfacial de alta área específica ( $\text{m}^2/\text{m}^3$ )

De manera específica, se evaluaron dos configuraciones de módulos de destilación por membrana con dos geometrías y configuraciones diferentes: (i) De placa plana, denominado M-AGMD y (ii) de membrana de fibras huecas helicoidales, denominado AGMD-HM. Para ambos módulos se utilizaron membranas de PTFE, planas para el módulo M-AGMD y de fibras huecas para el módulo AGMD-HM, con áreas de contacto de  $1,98 \cdot 10^{-3} \text{ m}^2$  y  $5,26 \cdot 10^{-3} \text{ m}^2$  respectivamente.

Se plantearon experimentos para cuantificar la densidad de flujo de permeado de agua y el flujo de calor asociado al proceso, ambos en función de las variables operativas. Las variables de operación fueron la temperatura de alimentación (40 a 60 °C en M-AGMD y 60 a 80 °C, en AGMD-HM), el flujo de alimentación (10 a 20 L/h en M-AGMD y 3,8 a 5,7 L/h en AGMD-HM) y la temperatura de enfriamiento (10 a 20 °C en M-AGMD y 10 °C en AGMD-HM). Entre los resultados principales, se pudo observar que, a una temperatura de agua de alimentación de 60 °C, las densidades de flujo transmembrana de agua fueron en promedio de  $6,07 \text{ L h}^{-1} \text{ m}^{-2}$  para el módulo plano M-AGMD y de  $3,23 \text{ L h}^{-1} \text{ m}^{-2}$  para el módulo AGMD-HM de arreglo helicoidal, y para este último a 80 °C fue de  $7,98 \text{ L h}^{-1} \text{ m}^{-2}$ . La temperatura de alimentación es la variable más significativa sobre la productividad de permeado, la cual presentó una relación proporcional con la diferencia de presión de vapor entre la interfase líquido-vapor y la superficie del condensado.

Para el módulo M-AGMD, se propuso un modelo matemático basado en ecuaciones clásicas de transferencia de masa y calor, el cual se utilizó para predecir el flujo transmembrana de vapor de agua, obteniéndose un error relativo promedio de 11,88 % al validarlo con los datos experimentales.



## Modelo 1-D de transferencia de calor en el almacenamiento de hidrógeno verde en adsorbentes porosos

Kieran Conradie<sup>1</sup>, Felipe Huerta<sup>1</sup>

<sup>1</sup>*Departamento de Ingeniería Química y Bioprocesos, Pontificia Universidad Católica de Chile, Santiago, Chile*

*kieran.conradie@uc.cl*

El almacenamiento eficiente de energía es esencial para aprovechar fuentes renovables intermitentes como la solar y eólica. El hidrógeno ( $H_2$ ) destaca como vector energético por su alta densidad gravimétrica (120 MJ/kg) y su producción limpia vía electrólisis renovable. Sin embargo, su baja densidad volumétrica como gas a temperatura y presión estándar (0,01 MJ/L) dificulta su almacenamiento. Entre las tecnologías para almacenar hidrógeno: compresión, licuefacción, hidruros metálicos y adsorción física esta última destaca por usar materiales porosos a presiones moderadas. En comparación al hidrógeno gaseoso comprimido, el almacenamiento de hidrógeno en tanques con carbón activado provee una mayor seguridad y densidad gravimétrica a la misma presión. Sin embargo, el calor de la adsorción reduce su rendimiento al liberar grandes cantidades de calor del orden de 7 kJ/mol de  $H_2$  adsorbido. Esto motiva el desarrollo de modelos precisos para optimizar el diseño y condiciones de operación de tanques de almacenamiento.

Durante el proceso de carga de un tanque de almacenamiento cilíndrico relleno de un material poroso, el hidrógeno es acumulado en el espacio vacío del tanque y el resto es adsorbido por un adsorbente. En este caso el adsorbente seleccionado es carbón activado y a una temperatura y presión dada el carbón es capaz de adsorber una cierta cantidad de hidrógeno por kilo de carbón activado y puede ser modelado mediante una isoterma de sorción. A medida que el proceso de carga se desarrolla, la presión del sistema aumenta y esta puede ser predicha mediante un balance de masa macroscópico. Como se está trabajando con un gas también es útil incorporar una ecuación de estado para modelar otras propiedades del hidrógeno como la densidad. Adicionalmente, el proceso de adsorción libera calor, produciendo un aumento de temperatura dentro del tanque y como el exterior está a una temperatura distinta se produce un gradiente de temperatura dentro del tanque. Este trabajo presenta un nuevo modelo de transferencia de calor 1-D no estacionario para la adsorción de hidrógeno en tanques cilíndricos con carbón activado. La ecuación diferencial parcial que gobierna el perfil de temperatura se discretizó espacialmente utilizando diferencias finitas para generar una ecuación diferencial ordinaria por nodo espacial. Las ecuaciones algebraicas de este sistema son la isoterma de adsorción y la ecuación de estado seleccionada, que restringen la evolución del sistema. El modelo completo constituye un sistema de ecuaciones diferenciales algebraicas (DAE). La solución numérica al sistema DAE se implementó en Julia, lenguaje compilado en tiempo real que permite reducir en más de dos órdenes de magnitud el tiempo de simulación en comparación a lenguajes interpretados como MATLAB® o Python. Además, la implementación se realizó de manera completamente implícita para facilitar el uso de otras ecuaciones de estado e isotermas de adsorción.

Debido a la naturaleza del proceso de carga no existe un estado estacionario, pero se logró determinar que el perfil radial de temperatura alcanza un estado pseudo estacionario. Al alcanzar el estado pseudo estacionario, existe un alto gradiente radial de temperatura de 476 K/m producto de la baja conductividad térmica del carbón activado. El modelo otorga la cantidad de hidrógeno adsorbida, la presión del tanque y la densidad del hidrógeno gaseoso, permitiendo la posibilidad de predecir la masa de hidrógeno almacenado en el sistema en función del tiempo.

## Simulación y análisis de la adsorción de moléculas inhibidoras en $\text{ZrO}_2$ y $\text{ZnO}$ en procesos de Deposición de Capas Atómicas de Área Selectiva (ASD).

F. Martínez<sup>1</sup>, M. Picuntureo<sup>1</sup>, T. Sandoval<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Universidad Técnica Federico Santa María, Departamento de Ingeniería Química y Ambiental, Chile.

*francisco.martinezp@usm.cl*

En la industria electrónica, el proceso de fabricación de chips se encuentra en una etapa crítica. La Ley de Moore predice una tendencia en aumentar la capacidad de procesamiento de estos dispositivos, mediante el aumento del número y la disminución del tamaño de los transistores que lo componen, proyectándose en un futuro cercano, llegar a los límites en los esquemas de fabricación convencional. Sin embargo, esta tendencia, junto con el aumento de la producción, ha generado diversos desafíos ambientales; por ejemplo, se ha percibido que el consumo energético de los procesos de producción utilizados actualmente ha aumentado significativamente a lo largo de los años, lo que implica una huella de carbono en crecimiento. Por esta razón, es necesario innovar y desarrollar nuevas técnicas, destacando actualmente la deposición de capas atómicas de área selectiva (ASD). La ASD se caracteriza por un control de la superficie a escala nanométrica, lo que permite el uso de moléculas como bloques de construcción a través del diseño preciso de la química de superficies [1]. Una técnica prometedora para ejecutar la ASD es desactivar el crecimiento de ALD en una superficie objetivo mediante la adsorción de un inhibidor molecular pequeño (SMI), dirigiendo la adsorción del precursor en la superficie deseada. Esta técnica minimiza el uso de precursores costosos y escasos, reduce las pérdidas de material, y, posiblemente podría reducir los requisitos energéticos de la industria electrónica [2]. Sin embargo, este proceso requiere un profundo conocimiento de las interacciones entre los compuestos reaccionantes, destacando la importancia de los óxidos metálicos ( $\text{MO}_x$ ), ya que, juegan un papel importante en la fabricación de chips de dispositivos al ser utilizados como dieléctricos y aislantes, entre otros. Es por esto que, en los últimos años, las herramientas de simulación han ganado relevancia debido a su capacidad para diseñar y predecir los procesos que rigen la deposición de materiales. En este trabajo, se utilizará la teoría funcional de la densidad (DFT) y el software Schrödinger con el paquete Quantum Espresso para estudiar el mecanismo de reacción de diversos SMIs en superficies  $\text{MO}_x$ . Se propone optimizar la celda unitaria de la superficie más estable de los óxidos  $\text{ZrO}_2$  y  $\text{ZnO}$ , y, luego, construir e hidroxilar el “slab” de dichos materiales. Posteriormente, se simulará la adsorción entre diferentes grupos funcionales (aldehído, ácido carboxílico, cetona, etc) y las superficies de  $\text{MO}_x$ . Exploraremos las estructuras de  $\text{ZrO}_2$  y  $\text{ZnO}$  para calcular los parámetros químicos, energéticos y electrónicos (acidez, estados de banda, etc) que caracterizan su reactividad frente a moléculas inhibidoras que podrían utilizarse en el proceso de ASD. Específicamente, mediante el estudio de los óxidos de Zn y Zr, se espera determinar el efecto de los cambios en la acidez de sus grupos hidroxilo en la superficie sobre la adsorción, lo que podría generar predictores para análisis a gran escala.



## Direct production of acetic acid from green hydrogen and CO<sub>2</sub>

Martínez, D.A.<sup>1</sup>, Cornejo, I.A.<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Universidad Técnica Federico Santa María, Department of Chemical and Environmental Engineering, Chile.

diego.martinezp@usm.cl

Currently, the global energy framework is characterized by the promotion of green industries that support environmental decarbonization. From this perspective, green hydrogen is an energy vector of great interest. However, due to challenges such as material embrittlement that complicate the transport and storage of this product, the production of higher-value compounds such as methanol and ammonia has been encouraged. Specifically, methanol is a green fuel that forms the basis of the chemical industry for various higher-value-added products, such as formaldehyde, acetic acid, and other fuels. This work aims to promote the green industry by analyzing the production of acetic acid from green hydrogen and captured carbon dioxide, with methanol as an intermediate product, comparing the traditional synthesis route with the direct production via bifunctional catalysis. This consists of including catalysts for the production of methanol and acetic acid within a single reactor as shown in Figure 1a, considering that there is no catalyst poisoning and that both reactions are compatible in terms of pressure and temperature. The work is carried out through process simulation using Aspen Plus V14, validating the reaction kinetics with previous studies [1][2]. It is hypothesized that this synthesis route will increase the yield of acetic acid, as it overcomes the equilibrium limitations of methanol production, leaving the process limited only by reaction kinetics. Methanol production typically involves gas recirculation to improve yield; however, this is not considered in this study. The results support the hypotheses presented above as shown in Figure 1b, achieving a 90% yield in the direct production of acetic acid compared to a 35% yield via the traditional synthesis route, suggesting that gas recirculation could be eliminated, thereby reducing both CAPEX and OPEX. The preliminary feasibility of the direct production of acetic acid from green hydrogen and captured carbon dioxide is thus concluded, and further studies are recommended to validate the benefits of this synthesis route. This agrees with the literature on other recently proposed bifunctional catalysts, for example, for the simultaneous production of methanol and dimethyl ether [3].

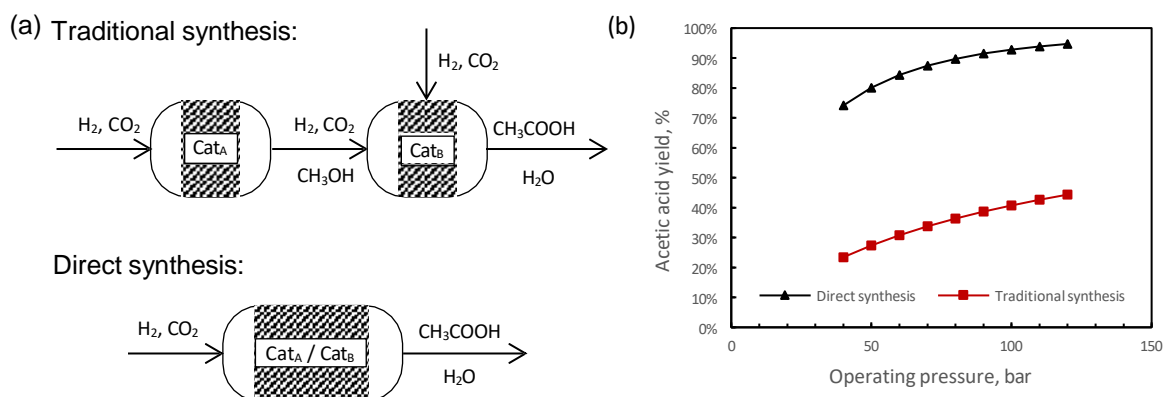


Figure 1: (a) Comparison of the traditional and direct synthesis route, (b) Acetic acid yield.

## Síntesis y caracterización de un electrocatalizador $\text{SnO}_2\text{@h-BN/GO}$ para la reducción de $\text{CO}_2$ a formiato.

K. Briones<sup>1</sup>, I. Díaz<sup>2</sup>.

<sup>1</sup>*Departamento de Ingeniería Química y Bioprocesos, Universidad de Santiago de Chile.*

*Katalina.briones@usach.cl*

El presente trabajo se centró en el diseño, síntesis y evaluación de un electrocatalizador innovador basado en nitruro de boro dopado con óxido de estaño y soportado en grafeno ( $\text{SnO}_2\text{@h-BN/GO}$ ), orientado a la reducción electroquímica de dióxido de carbono ( $\text{CO}_2$ ) hacia formiato. El objetivo fue desarrollar un cátodo estable y activo capaz de promover una conversión eficiente y selectiva de  $\text{CO}_2$ , contribuyendo a generar productos de valor agregado con aplicaciones en la industria química y energética, donde el formiato se utiliza como portador de hidrógeno, materia prima en síntesis orgánica y aditivo en combustibles. De esta forma, se busca avanzar hacia soluciones sostenibles que aporten a la mitigación del cambio climático y a la valorización del  $\text{CO}_2$ .

La síntesis del material permitió incorporar con éxito el óxido de estaño a la matriz h-BN/GO, logrando un catalizador homogéneo y con propiedades estructurales adecuadas. La caracterización fisicoquímica se realizó mediante Microscopía Electrónica de Transmisión, Difracción de Rayos X, Espectroscopía Infrarroja por Transformada de Fourier y Análisis Termogravimétrico, confirmando tanto la presencia del metal como la interacción efectiva con la matriz. Estas técnicas evidenciaron una estructura estable, con defectos activos que resultan beneficiosos para promover la reactividad en la reducción de  $\text{CO}_2$ .

Posteriormente, el comportamiento electroquímico del catalizador se evaluó mediante voltametría cíclica y cronoamperometría en una celda tipo H. Los resultados mostraron que, bajo condiciones de operación controladas, el electrocatalizador presentó un inicio de reducción favorable y la formación predominante de formiato ( $\text{HCOO}^-$ ) y gas hidrógeno ( $\text{H}_2$ ) como productos principales. La comparación con sistemas similares de la literatura permitió corroborar que el  $\text{SnO}_2\text{@h-BN/GO}$  opera con sobrepotenciales moderados y selectividad consistente hacia el formiato, validando el rol del dopaje con Sn en la modulación de la actividad catalítica.

El análisis de eficiencia faradaica evidenció un rendimiento cercano al 82% hacia la formación de formiato, mientras que el resto de la corriente se asoció principalmente a la evolución de hidrógeno. Este desempeño confirma la capacidad del material para impulsar la conversión de  $\text{CO}_2$  hacia compuestos de interés, posicionándolo como una alternativa viable y con potencial de optimización para incrementar la selectividad hacia productos de mayor valor agregado.

En síntesis, esta investigación no solo demostró la factibilidad de elaborar un material catalítico eficiente a partir de h-BN/GO dopado con  $\text{SnO}_2$ , sino que también aportó evidencia experimental sólida sobre su desempeño electroquímico. Los resultados abren la posibilidad de futuras mejoras en la composición y el diseño del catalizador, orientadas a incrementar la eficiencia y sostenibilidad de los procesos de reducción electroquímica de  $\text{CO}_2$ , consolidando así un aporte significativo en el desarrollo de tecnologías limpias para la mitigación del cambio climático.

## Influencia del pH en la electro reducción de nitrato a amonio con electrocatalizador de cobalto.

**Nicolás Rojas López<sup>2</sup>, Patricia Díaz González<sup>1</sup>,  
Martín Faúndez Leiva<sup>1</sup>, Emilio Carrasco<sup>1</sup>, Daniel Ramírez Ruiz<sup>2</sup>.**

<sup>1</sup>Laboratorio de Electroquímica y Nanociencias, Instituto de Química y Bioquímica, Universidad de Valparaíso, Chile,

<sup>2</sup>Escuela de Ingeniería Química, Pontificia Universidad Católica de Valparaíso, Chile.,

Dirección: Av. Gran Bretaña 1111, Playa Ancha, Valparaíso

Correo electrónico: [nicolas.rojas.i01@mail.pucv.cl](mailto:nicolas.rojas.i01@mail.pucv.cl)

### Introducción

La reducción electroquímica de nitrato hacia amonio y amoniaco ha ganado relevancia en los últimos años por su potencial en la economía circular. Es fundamental analizar la influencia del pH en el sistema electroquímico, pues la competencia de la reacción de interés con la reacción de evolución de hidrogeno (**HER**) es fundamental en la cinética y la eficiencia faradaica (Ahmadi & Mohammadreza, 2024). Varios autores destacan el acople de celdas solares al sistema electroquímico para reducir costos operacionales y así fomentar su implementación.

### Metodología

El sistema experimental consta de una celda electroquímica tipo “H” con de cobalto metálico como cátodo, platino como ánodo y un electrolito con una concentración de nitrato 0,5 [M] utilizando la misma solución en ambas cámaras. Las mediciones de las voltámetros fueron realizadas a una velocidad de barrido de 50 mV s<sup>-1</sup> y 1 mV s<sup>-1</sup>. Para estandarizar la cinética se fijó una densidad de corriente de 5 mA cm<sup>-2</sup> para todas las cronoamperometrías, aplicando el voltaje correspondiente mediante control potencioestático. Las fotoelectrolisis se llevan a cabo conectando la celda “H” a 4 paneles solares de perovskita CsPbBr<sub>3</sub> en paralelo, con una área total de 4 cm<sup>2</sup>, estas son iluminadas con un simulador solar que emite una irradiancia continua de 1000 W m<sup>-2</sup>.

### Resultados obtenidos

El nitrato reacciona naturalmente con el cobalto, lo que deriva en la formación espontánea de hidróxido de cobalto y nitrito en la interfase, siendo este último un intermediario crucial en la formación de amonio (Yang, y otros, 2024). Este comportamiento se evidencia en las voltamperometrías, pues el pico de reducción desaparece progresivamente tras la electrolisis. A medida que disminuye el pH, la eficiencia faradaica del proceso supera el 90%, ya que la menor actividad de protones favorece la conversión de nitrato y nitrito a amonio. No obstante, la conductividad de la solución disminuye en medios más ácidos con el paso del tiempo, pues la razón de producción/consumo de iones para la reacción global es de 1:11, esto provoca que el sistema este controlado por difusividad a densidades de corriente menores a 5 mA cm<sup>-2</sup>. Las fotoelectrolisis en medio ácido muestran estabilidad en la corriente del sistema, sin embargo, a medida que pasa el tiempo la eficiencia faradaica disminuye y la tasa de formación de amonio disminuye, donde se alcanza un máximo a las 4 horas con una tasa de generación de amonio de 0,094 mg NH<sub>4</sub><sup>+</sup>cm<sup>-2</sup>h<sup>-1</sup>.

### Conclusión

La reducción de nitrato con cobalto metálico tiene una alta dependencia del pH, con la disminución de este se logra una mejor eficiencia faradaica a cambio de una menor conductividad límite. Las fotoelectrolisis en medio ácido mostraron una alta eficiencia faradaica, lo que permite una mayor selectividad hacia amonio.

## Evaluación de ciclo de vida de la producción de biochar mediante pirólisis de guano de ave

Francisco Oelker<sup>1</sup>, Sebastián Larrere<sup>2</sup>, Claudio Zaror<sup>1</sup>, Cristina Segura<sup>3</sup>, Yannay Casas-Ledón<sup>2,4</sup>

<sup>1</sup>*Departamento de Ingeniería Química, Facultad de Ingeniería, Universidad de Concepción, Concepción, 4030000, Chile*

<sup>2</sup>*Departamento de Ingeniería Ambiental, Facultad de Ciencias Ambientales y Centro EULA-Chile, Universidad de Concepción, Concepción, 4030000, Chile.*

<sup>3</sup>*Unidad de Desarrollo Tecnológico-UDT, Universidad de Concepción, Cordillera, 2634, Coronel, 4191996, Chile.*

<sup>4</sup>*Centro de Investigación del Agua para la Agricultura y la Minería (CRHIAM), ANID FONDAP, Victoria 1295, Concepción 4070411, Chile.*

*slarrere2017@udec.cl*

En Chile, el aumento en el consumo de huevo ha generado más residuos en la industria avícola, muchos sin un tratamiento adecuado, lo que afecta negativamente al medioambiente. Un caso relevante es el guano de ave ponedora (GAP), rico en nitrógeno y fósforo, que suele usarse crudo como fertilizante. Esta práctica puede causar malos olores, emisiones de gases, eutrofización, proliferación de insectos y presencia de roedores, lo que evidencia la necesidad de alternativas más sostenibles para su gestión. Entre las tecnologías disponibles para el manejo de este tipo de residuos se encuentran el compostaje y la digestión anaerobia. Una opción innovadora y con potencial sustentable es la pirólisis lenta, un proceso termoquímico que valoriza el GAP al transformarlo en tres productos con valor agregado: i) biochar, un carbón vegetal con alta superficie específica que mejora la calidad del suelo y puede contribuir al secuestro de carbono; ii) bio-oil, un líquido rico en ácidos orgánicos y compuestos fenólicos con potencial energético; y iii) syngas o gas de síntesis, usado principalmente como fuente de calor para el mismo proceso de pirólisis. Esta tecnología aprovecha residuos orgánicos y se alinea con la economía circular, al reintegrar recursos y reducir la dependencia de insumos fósiles, generando interés académico e industrial.

El objetivo de este estudio fue evaluar los aspectos ambientales de implementar una planta de pirólisis lenta para el procesamiento de GAP, con énfasis en la producción de biochar como enmienda agrícola y en el aprovechamiento calórico de los coproductos. Se integró un modelo matemático basado en datos experimentales y simulaciones realizadas en el software Aspen Plus V14. Para el análisis ambiental, se aplicó la metodología de Evaluación de Ciclo de Vida (LCA) utilizando el método ReCiPe *hierarchical midpoint*, habilitado por el software SimaPro 9.6.0.1, considerando como límites del sistema de la cuna a la puerta, desde la recolección de guano de ave, el transporte hacia la planta, el secado y la posterior pirólisis. De la pirólisis, los coproductos de bio-oil y syngas pasan por una cámara de combustión que genera calor para el secado y la pirólisis, evaluando todo el proceso con base en una unidad funcional correspondiente a la producción de 1 tonelada de biochar.

La evaluación ambiental reveló que la etapa de combustión de los coproductos de la pirólisis es responsable de la mayor parte de los impactos representando entre el 6% y el 92% de las 17 categorías de impacto evaluadas. Esto se debe principalmente al uso de diésel para suplir el déficit energético en el secado y la pirólisis del GAP. Las mayores contribuciones de esta etapa se evidenciaron en las categorías de Calentamiento Global (92 %, con 2473,07 kg CO<sub>2</sub> eq) y Agotamiento de Recursos Fósiles (88 %, con 449,3 kg oil eq). En términos generales, también se identificaron aportes relevantes de la pirólisis (4–56 %), el transporte (0–52 %) y el secado (2–32 %) a diversas categorías de impacto. Dado que los rendimientos de la pirólisis fueron de 51,2 % en peso de biochar, 20,7 % de syngas y 28,1 % de bio-oil, los resultados sugieren que estudios futuros deberían enfocarse en el aprovechamiento eficiente de estos coproductos. Los resultados entregan



Escuela de  
**Ingeniería  
Química**



evidencia cuantitativa sobre el desempeño ambiental del proceso de pirólisis lenta aplicado al GAP, aportando una base técnica para su análisis crítico y su eventual integración en estrategias de valorización de residuos bajo un enfoque de economía circular.

## Evaluating High-Pressure Operation for Methanol Production via Catalytic CO<sub>2</sub> Hydrogenation

Elizabeth Holloway<sup>1</sup>, Lindley Maxwell<sup>2</sup>, Iván Cornejo<sup>1</sup>

<sup>1</sup>*Departamento Ingeniería Química y Ambiental, Universidad Técnica Federico Santa María, Chile.*

<sup>2</sup>*Centro de Investigación Científico y Tecnológico de la Región de Antofagasta (CICITEM), Chile.*

*elizabeth.holloway@usm.cl*

The production of methanol from renewable hydrogen and captured CO<sub>2</sub> is becoming increasingly important as a strategic pathway for industrial decarbonization. This approach enables the valorization of CO<sub>2</sub> as a feedstock, transforming it into a high-value chemical product. Moreover, green methanol offers logistical advantages over hydrogen, as it can be stored and transported more safely and with higher energy density. However, its high production cost, primarily driven by the price of green hydrogen, still limits its competitiveness compared to fossil-based methanol.

This study presents a techno-economic analysis aimed at reducing the levelized cost of green methanol by optimizing operating conditions in a plant simulated with Aspen Plus V14. The model includes feedstock conditioning, a catalytic CO<sub>2</sub> hydrogenation reactor, and the separation and recycling of unconverted gases. The methodology involves a parametric analysis of temperature and pressure in the reactor to identify optimal operating conditions and evaluate their effect on CO<sub>2</sub> conversion and methanol selectivity. This analysis is complemented by a detailed economic assessment using Aspen Process Economic Analyzer to estimate capital and operating expenses (CAPEX and OPEX), considering costs of USD 3/kg for green H<sub>2</sub> and USD 200/ton for captured CO<sub>2</sub>.

The effect of operating at high pressure (100–340 bar)—a range traditionally avoided due to safety concerns—was specifically analyzed. Results indicate that, while the overall energy efficiency remains nearly constant because electrolysis dominates the energy demand, conversion and selectivity increase significantly at higher pressures, leading to a reduction in the levelized cost of green methanol. The product achieves technical-grade purity (>98%) and a carbon-negative balance. Although still more expensive than fossil methanol, its negative carbon footprint and potential as a premium product make it an environmentally and economically promising alternative, whose future competitiveness will largely depend on continued reductions in green hydrogen cost.



## Efecto de la acidez de los $\text{MO}_x$ en los mecanismos de reacción de pequeñas moléculas inhibidoras (SMI's) en procesos de deposición selectiva por capas atómicas (AS-ALD).

Jesús Donoso<sup>1</sup>, Matías Picuntureo<sup>1</sup>, Tania Sandoval<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Departamento de Ingeniería Química y Ambiental, Universidad Técnica Federico Santa María, Santiago, Chile.

*jesus.donosop@usm.cl*

La continua miniaturización de los dispositivos electrónicos exige el desarrollo de nuevas técnicas de fabricación con una precisión a nivel atómico para superar limitaciones de la litografía convencional que presenta un desafío de sustentabilidad. El proceso de fabricación se ha vuelto cada vez más intensivo en energía y recursos, con un notable aumento de emisiones por oblea en los nodos tecnológicos más avanzados. En este contexto, la Deposición Selectiva de Área (AS-ALD) emerge como una estrategia "bottom-up", al ser un proceso aditivo que reduce el desperdicio de precursores y simplifica la fabricación. La estrategia implementada para lograr esta selectividad se basa en el uso de pequeñas moléculas inhibidoras (SMI's) que pasivan selectivamente ciertos tipos de superficies, y bloquea la deposición de materiales en zonas de no crecimiento. Sin embargo, se debe tener en cuenta que la eficacia de estos inhibidores depende críticamente de las interacciones químicas entre estos y los sitios activos de la superficie a través de diversas reacciones como son las de carácter ácido-base entre los grupos hidroxilo ( $-\text{OH}$ ) presentes en las superficies de los óxidos metálicos ( $\text{MO}_x$ ) y ciertos grupos funcionales.

Este trabajo busca estudiar de manera teórica como la reactividad de los SMI's con diferentes grupos funcionales, es afectada por la acidez superficial de óxidos como el  $\text{HfO}_2$  y el  $\text{TiO}_2$ . El objetivo es determinar las estructuras de mínima energía de los inhibidores y las superficies, para luego analizar la interacción molécula-superficie e identificar los descriptores claves, como la energía de adsorción, lo que permitirá establecer una correlación entre la acidez de los  $\text{MO}_x$ .

La investigación se aborda mediante cálculos de la Teoría del Funcional de la Densidad (DFT) utilizando el funcional PBE-D3, un conjunto de base de ondas planas y pseudopotenciales PAW. La metodología consiste en la optimización de los modelos en bulto y de superficie ("slabs"), seguido del cálculo de las energías de adsorción de las SMI's.

Como resultado principal, se ha establecido y validado un nivel de teoría DFT (PBE-D3) robusto para describir los óxidos de estudio, esto a través de tests de convergencia para los parámetros de energía de corte ( $\text{HfO}_2$ : 45 Ry ,  $\text{TiO}_2$ : 45 Ry ) y la malla de puntos-k (Monkhorst-Pack para  $\text{HfO}_2$ :  $5 \times 5 \times 5$  y  $\text{TiO}_2$ :  $6 \times 6 \times 9$ ). A partir de esto, los resultados para los parámetros de red de la celda unitaria de  $\text{HfO}_2$  fueron,  $a$ : 5,08 Å ,  $b$  = 5,14 Å ,  $c$  = 5,26 Å y  $\beta$  = 99,72° y para el  $\text{TiO}_2$ ,  $a$ ,  $b$ : 4,62 Å ,  $c$  = 2,96 Å. Estos resultados muestran una excelente concordancia (<1% de error relativo) con los valores experimentales, validando la fiabilidad de los parámetros obtenidos. A partir de estas celdas, se construyeron modelos de los slabs para las superficies más estables de cada óxido, como la faceta Monoclínica (-111) para el  $\text{HfO}_2$  y Rutilo (110) para el  $\text{TiO}_2$ . Estos modelos fueron posteriormente hidroxilados y estructuralmente relajados, obteniendo superficies químicamente realistas y computacionalmente validadas. Finalmente se estudió la estabilidad de los hidroxilos y caracterizó su reactividad explorando posibles reacciones contra distintas moléculas inhibidoras pequeñas.

*Se agradece el financiamiento del proyecto ANID-FONDECYT N°1231197, así como a Schrödinger, LLC por proporcionar la licencia académica para el software utilizado en esta investigación.*



## Simultaneous In-situ Chemical Kinetics and Electrochemistry Analysis, Toward Photocatalyzed Sodium Borohydride Hydrolysis as Energy Vector

César. Zúñiga<sup>1</sup>, Yurieth. Quintero<sup>1</sup>, Rodrigo. Quezada<sup>1</sup>, Federico<sup>2</sup>. Tasca, Humberto.  
Estay<sup>1</sup>, Andreina. García<sup>1,3</sup>

<sup>1</sup>Advanced Mining Technology Center (AMTC), Universidad de Chile, Av. Tupper 2007, 8370451 Santiago, Chile.

<sup>2</sup>Facultad de Química y Biología, Universidad de Santiago de Chile, Av. Lib. Bernardo O'Higgins 3363, Santiago 8320000, Chile.

<sup>3</sup>Mining Engineering Department, FCFM, Universidad de Chile, Av. Tupper 2069, 8370451 Santiago, Chile.

cesar.zunigal@amtc.uchile.cl

Currently, global warming and environmental pollution are related to the use of fossil fuels for energy purposes. Energy conversion devices have emerged as a promising alternative to generate clean electrical energy from chemical reactions, where oxygen is reduced and hydrogen molecules ( $H_2$ ) are oxidized to produce water. Therefore,  $H_2$  demand is increasing, and the worldwide market will be plausible when the conditions are “\$1 for 1 kg for clean hydrogen in 1 decade”, according to the Department of Energy of the United States (DOE). Despite chemical challenges, searching for optimal and cheaper catalysts to promote  $H_2$  production by water electrolysis, transportation issues have not been completely solved. The storage capacity of  $H_2$  as an energy vector in gaseous form goes from 7 to 70 kg  $m^{-3}$ ; nevertheless, when it is stored in a solid state, as metal hydride, it is stored close to 120 kg  $m^{-3}$ . Particularly, sodium borohydride  $NaBH_4$  has a hydrogen storage capacity of 10.8%, whose release can be easily achieved by hydrolysis of  $NaBH_4$ ; however, at room conditions, a low yield of less than 10% (7-8%)<sup>5</sup> is achieved. Therefore, to optimize the hydrogen release of  $NaBH_4$ , heterogeneous catalysis has been explored using several kinds of nanoparticles based on (i) noble metals-alloys, (ii) transition metals alloys, and (iii) photocatalytic oxides, which are frequently evaluated by the classical water displacement technique<sup>4,5</sup>. Until today, the involved hydrolysis reaction has not been deeply explored simultaneously and in situ, considering the evaluation of locally generated  $H_2$ -overpressure along with its influence on  $H_2$ -concentration in solutions, detected through electrochemical techniques, and photocatalytic effect by  $SnO_2$  nanoparticles ( $SnO_2$  NPs). In this work, in *situ* parameters such as local pressure for the electrochemical detection of  $H_2$  concentration, and the photocatalytic effect of  $SnO_2$  NPs were studied under dark and UV-light conditions. In dark conditions, the results indicate that the presence of  $SnO_2$  NPs increases the percentage of  $H_2$  conversion from the hydrolysis of  $NaBH_4$  in 104.8% by the catalytic activity of  $SnO_2$  NPs. On the other hand, UV-light conditions had a negligible impact on the  $NaBH_4$  hydrolysis. In contrast, in the presence of  $SnO_2$  NPs under UV-light increased  $H_2$  conversion in 11.6% compared to the dark condition with the NPs and a 128.6% increase compared to the catalyst-free condition. Along with this, the electrochemical detection of the oxidation current for the  $H_2$  presence (HOR, hydrogen oxidation reaction) under UV-light conditions increased the total acquired current by 75% compared to the dark condition in the presence of  $SnO_2$  NPs. Therefore, photoelectrochemical analysis of hydrogen production and its detection from  $NaBH_4$  indicates that there is a favorable catalytic and photocatalytic effect of  $SnO_2$  under the studied conditions.

### Acknowledgment

The authors are grateful for the funding provided by ANID AFB230001, Exploration project 13220059 ANID, and Fondecyt Grants 1220988.

## ESTUDIO DEL EQUILIBRIO SOLIDO-LIQUIDO Y PROPIEDADES FÍSICOQUÍMICAS DE DISOLVENTES EUTÉCTICOS PROFUNDOS TIPO V

Karen Mena Torrez <sup>1</sup>, Yecid P. Jimenez<sup>1,2</sup>

<sup>1</sup>*Departamento de Ingeniería Química y Procesos de Minerales, Facultad de Ingeniería, Universidad de Antofagasta, Av. Angamos 601, Antofagasta, Chile*

<sup>2</sup>*Centro de Economía Circular en Procesos Industriales (CECPI), Facultad de Ingeniería, Universidad de Antofagasta, Av. Angamos 601, Antofagasta, Chile*

[karen.mena.torrez@ua.cl](mailto:karen.mena.torrez@ua.cl)

### RESUMEN

Los disolventes eutécticos profundos (DES) han emergido en la última década como alternativas sostenibles a los disolventes orgánicos tradicionales, debido a su baja toxicidad, estabilidad y sencilla preparación. Entre sus distintas clasificaciones, los DES tipo V formados exclusivamente por precursores no iónicos han despertado especial interés, ya que amplían la versatilidad de estos sistemas más allá de las combinaciones clásicas de sales cuaternarias.

En este trabajo se presentan resultados experimentales y de modelado orientados a la caracterización de distintos DES tipo V, con énfasis en su comportamiento de fase, densidad, índice de refracción, velocidad del sonido y viscosidad, dado que la determinación precisa de sus propiedades a diversas temperaturas es fundamental para su aplicación industrial.

Los diagramas de fase obtenidos permitieron identificar la composición eutéctica y evaluar la estabilidad de los sistemas bajo diferentes condiciones de temperatura. Paralelamente, el modelado molecular realizado mediante COSMOtherm permitió obtener los perfiles sigma de las moléculas y predecir las curvas de equilibrio sólido-líquido, lo que facilitó la interpretación de las interacciones entre los componentes y la validación de los diagramas de fase experimentales.

Los resultados muestran que, aunque la temperatura influye significativamente en las propiedades físicas de los DES tipo V, estos se presentan como excelentes candidatos para la extracción líquido-líquido. Este estudio aporta una base de datos esencial para el diseño racional de nuevos DES y abre la posibilidad de su futuro escalamiento a procesos industriales.

## Desarrollo y caracterización de membranas a partir de poliestireno expandido y solventes verdes.

Fernanda Troncoso<sup>1</sup>, Paula Guerra<sup>2</sup>, Jaime Chacana<sup>3</sup>

<sup>1</sup>Tesista, Depto. Ingeniería Química y Ambiental, Universidad Técnica Federico Santa María, Chile.

<sup>2</sup>Académica, Depto. Ingeniería Química y Ambiental, Universidad Técnica Federico Santa María, Chile. <sup>3</sup>Académico, Depto. Ingeniería Química y Medio Ambiente, Universidad Católica del Norte, Chile.

*fernanda.troncoso@sansano.usm.cl*

Producto de la escasez hídrica, hoy en día se ha vuelto fundamental el desarrollo de nuevas tecnologías para obtener agua de fuentes no convencionales. Una de las tecnologías emergentes, son las membranas, las cuales son ampliamente utilizadas en procesos de desalinización y filtración. Sin embargo, si nos centramos en el proceso fabricación, queda mucho por mejorar debido a la baja sostenibilidad, ya que se utilizan polímeros fósiles vírgenes, además, del uso de solventes orgánicos derivados del petróleo, que son altamente inflamables, irritantes y tóxicos para el medio ambiente y la salud humana.

En los últimos años los estudios sobre el desarrollo de membranas sustentables han ido en aumento, pero estos abordan de manera parcial el problema, ya que algunos se centran en el uso de polímeros reciclados y otros en el uso de solventes verdes. Por ello, se propone investigar la combinación de ambas soluciones, desarrollando membranas sustentables, a partir de polímeros reciclados y solventes verdes, como posible solución a los procesos de fabricación convencionales.

El objetivo es desarrollar membranas filtrantes a partir de poliestireno expandido (EPS) y solventes verdes mediante el método *Non-Solvent Induced Phase Separation* (NIPS) bajo distintas condiciones experimentales que logren maximizar su rendimiento y propiedades fisicoquímicas. Estas se evalúan mediante pruebas de rendimiento, en donde se realizan estudios de permeabilidad, rechazo de sales y disminución de turbidez, por último, se caracterizan las membranas que presenten mejor rendimiento con estudios de morfología, análisis FT-IR y porosidad, que permitan clasificarlas y proyectar su potencial aplicación a gran escala, por ejemplo, como membranas de micro, ultra o nanofiltración.

Inicialmente se evaluaron condiciones experimentales de concentración de EPS (15% y 20% p/p) y espesores (200 y 300  $\mu\text{m}$ ). Las membranas obtenidas presentaron estructuras planas y superficies uniformes, sin rupturas visibles. Sin embargo, en el caso de 15% p/p de EPS se ven más delgadas y frágiles, por ende, la concentración de polímero afecta directamente a la resistencia mecánica. La variación de espesor no mostró diferencias estructurales significativas.

El desempeño se evaluó mediante ensayos de permeabilidad utilizando agua tipo II a 1 bar. Solo la membrana de 15% p/p EPS y 200  $\mu\text{m}$  presentó valores de permeado de 1946 L/m<sup>2</sup>hbar en una de sus réplicas, mientras que las demás no presentan permeado. Esto puede deberse a poros demasiado pequeños o la ausencia de porosidad efectiva. Por otro lado, no se observaron fallas estructurales, lo que permite considerar las membranas para pruebas a mayores presiones.

Se logró desarrollar membranas filtrantes mediante el método NIPS a partir de poliestireno expandido y solventes verdes, en donde todas las combinaciones propuestas permitieron la producción de membranas estructuralmente viables. La concentración de polímero afecta directamente la resistencia mecánica de las membranas, lo que significa que a mayor concentración de polímero mayor resistencia. De las pruebas de permeabilidad no se presentan resultados de permeado, por lo que los poros son demasiado pequeños y se requiere mayor presión o no hubo formación de poros, y la ausencia de fallas estructurales permite que sean sometidas a ensayos con mayores presiones, permitiendo evaluar con mayor precisión su potencial aplicación en procesos de separación.

## Evaluación del eucaliptol como biosolvente para la extracción de contaminantes en polietileno de baja densidad posconsumo.

I. San Martín<sup>1-2</sup>, S. Alejandro<sup>2</sup>, D. Salinas<sup>3</sup>, M. Rivas<sup>1-2</sup>, R. Briones<sup>1</sup>,

<sup>1</sup>Centro de Investigación de Polímeros Avanzados CIPA, Concepción, Chile, <sup>2</sup>Facultad de Ingeniería, Departamento de Ingeniería de procesos y Bioproductos, Universidad del Bío-Bío, <sup>3</sup> Facultad de Ciencias, Departamento de Química, Universidad del Bío-Bío.

[isis.san2001@alumnos.ubiobio.cl](mailto:isis.san2001@alumnos.ubiobio.cl); [r.briones@cipachile.cl](mailto:r.briones@cipachile.cl)

El polietileno de baja densidad (LDPE) posconsumo, ampliamente utilizado en envases de alimento y embalajes, puede contener residuos de contaminantes como compuestos orgánicos volátiles y ftalatos que dificultan su reutilización segura. Frente a esto, surge la necesidad de buscar alternativas de descontaminación que no impliquen el uso de solventes tóxicos ni afecten la integridad del polímero. Esta investigación preliminar evaluó la capacidad del eucaliptol, un biosolvente derivado de aceites esenciales que, debido a su ligera polaridad, alta pureza y compatibilidad teórica con el polietileno de baja densidad lo convierten en una opción para extraer contaminantes del LDPE posconsumo sin disolver el polímero ni modificar sus propiedades fisicoquímicas.

Inicialmente se analizaron ocho solventes (convencionales y biosolventes), considerando propiedades fisicoquímicas, parámetros de solubilidad (Hansen y Hildebrand) y ensayos de solubilidad. A partir de estos criterios se seleccionó el eucaliptol para la etapa experimental. El tratamiento del LDPE posconsumo consistió en lavar el material, secar a 45 °C, cortar y utilizar molienda criogénica hasta obtener partículas de 600 µm. Posteriormente, se realizaron extracciones sólido-líquido por métodos convencional (80 °C, durante 60 minutos con una agitación de 250 rpm), y asistido por ultrasonido (a temperatura ambiente, durante 30 minutos con una frecuencia de 37 kHz). En todos los casos se evitó la disolución del polímero, logrando separar exitosamente dos fracciones: una líquida, analizada por GC-MS para detectar los compuestos extraídos, y otra sólida, caracterizada mediante FTIR para evaluar posibles modificaciones estructurales, además se realizó TGA para estudiar la estabilidad térmica del polímero tratado. Los análisis cromatográficos permitieron identificar compuestos orgánicos volátiles (VOCs) extraídos desde la matriz del LDPE posconsumo; entre ellos se detectaron tridecano, butano, 2,2-dimetil, Estos hidrocarburos se asocian principalmente a residuos de oligómeros o productos de degradación térmica del polímero, lo que evidencia la liberación de fracciones de baja masa molecular durante el tratamiento, lo que confirma la presencia de contaminantes en el polímero. Se observó que el eucaliptol fue capaz de remover estos compuestos mediante extracción sólido-líquido, ya sea por método convencional y asistido por ultrasonido, su eficacia se relaciona con la afinidad del solvente hacia los contaminantes hidrocarbonados presentes en el LDPE, junto con su capacidad para interactuar parcialmente con la matriz polimérica. En términos de área relativa total, el eucaliptol alcanzó valores de 35,06 % con extracción convencional y 34,56 % con ultrasonido. El análisis espectroscópico por FTIR permitió observar que, en todos los casos, el material tratado conservó las bandas características del LDPE, sin aparición de nuevas señales ni desplazamientos significativos, lo que indica que no hubo alteraciones estructurales tras los procesos de extracción. Además, no se identificaron bandas residuales atribuibles a los solventes utilizados, lo que demuestra que el tratamiento de secado posterior a la extracción fue eficiente. Los ensayos termogravimétricos (TGA) complementaron los resultados estructurales, revelando que el LDPE tratado con eucaliptol presentó temperaturas máximas de degradación similares al polímero sin tratar, lo que confirma que ni el tipo de solvente ni el método de extracción comprometieron significativamente la estabilidad térmica del material. En conjunto, los resultados respaldan el uso del eucaliptol como solvente verde para la remoción de contaminantes desde el plástico.

**Agradecimientos:** CIPA, ANID Regional, R23F0005; Fondecip EQM170077.

## Estudios hidrodinámicos, mediante experimentos y simulaciones, de burbujas expuestas a una columna líquida descendente para conocer la transferencia de gases a la fase líquida

J. Saleh-Cumsille<sup>1</sup>, S. Sepúlveda<sup>2</sup>, C. Maggi<sup>2</sup>, P. Moreno-Casas<sup>1</sup>, F. Scott<sup>1</sup>, A. Vergara-Fernández<sup>1\*</sup>

<sup>1</sup>*Green Technology Research Group, Facultad de Ingeniería y Ciencias Aplicadas, Universidad de Los Andes, 7550000, Chile.*

<sup>2</sup>*Facultad de Ingeniería y Ciencias Aplicadas, Universidad de Los Andes, 7550000, Chile.*

*jisaleh@miuandes.cl*

En procesos de conversión química o biológica de gases, en los que se requiere de transferencia de gases poco solubles en medios acuosos, tales como hidrógeno ( $H_2$ ) u oxígeno ( $O_2$ ), estos se limitan por transferencia de masa en lugar de la reacción química o bioquímica en sí, lo que constituye un cuello de botella para el desarrollo de una serie de tecnologías sustentables. El principal indicador de la tasa de absorción es el coeficiente volumétrico de transferencia de masa ( $k_L a$ ), el que se descompone en el coeficiente de transferencia de masa ( $k_L$ ) y el área interfacial específica ( $a$ ). Una alternativa atractiva para mejorar el " $k_L$ " y fundamentalmente el " $a$ ", es el reactor de co-corriente en flujo descendente (CDCR, por sus siglas en inglés). Los parámetros hidrodinámicos internos del reactor, tales como la retención del gas (o gas holdup), la distribución de tamaños de burbujas, el perfil de velocidad de la columna líquida descendente, y las velocidades instantáneas de las burbujas, son las que determinan el  $k_L a$ . En este trabajo, se propone una metodología basada en velocimetría de imágenes con partículas (PIV) y de velocimetría de seguimiento de partículas (PTV), para determinar el perfil de velocidades del líquido y movimientos instantáneos de las burbujas, además del diámetro de burbujas esféricas. Para desarrollar los experimentos, se construyó una columna rectangular de vidrio con tapas diseñadas en el material impermeable PETG, y se acopló a una línea de agua trabajando a flujos de líquido descendente de entre 6 a 18 L/min a través de la columna rectangular. Se hizo un montaje en una cámara oscura utilizando una cámara de alta velocidad, rayos láser, y una luz led, permitiendo los estudios con imágenes. Para realizar estudios de PIV, se utilizó la extensión de Matlab PIVlab. Para realizar seguimiento de burbujas (PTV) y estimar las dimensiones de las burbujas, se desarrolló un código en Python, extrayendo las características de las burbujas mediante procesamiento y análisis de imágenes. Los resultados permitieron validar una simulación de dinámica computacional de fluidos (CFD), que fue confeccionada utilizando el software OpenFOAM, y puede ser utilizada para predecir el comportamiento de burbujas en una columna líquida descendente a diferentes condiciones de diseño y operación del reactor. También, puede ser usada para estimar la tasa del transporte de gases desde las burbujas a la fase líquida utilizando modelos teóricos de transferencia de masa, alimentados por los parámetros hidrodinámicos, los que serán testeados y validados en el trabajo futuro.

### Agradecimientos:

Se agradece al financiamiento brindado por la ANID, mediante: la Beca de Doctorado Nacional N°21241720, el proyecto Anillo ATE220045, y el proyecto Fondecyt Regular N°1240411.



## Procesos de extracción de contaminantes en HDPE mediante solvente verde asistidos con ultrasonido y microondas

M. Rivas<sup>1-2</sup>, S. Alejandro<sup>2</sup>, D. Salinas<sup>3</sup>, I. San Martín<sup>1-2</sup>, R. Briones<sup>1</sup>.

<sup>1</sup>Centro de Investigación de Polímeros Avanzados CIPA, Concepción, Chile <sup>2</sup>Facultad de ingeniería, Departamento de Ingeniería de procesos y Bioproductos, Universidad del Bío-Bío, <sup>3</sup>Facultad de ingeniería, Departamento de Química, Universidad del Bío-Bío

[Marcelorivas.gz@gmail.com](mailto:Marcelorivas.gz@gmail.com); [rbriones@cipachile.cl](mailto:rbriones@cipachile.cl)

El polietileno de alta densidad (HDPE), ampliamente utilizado en envases, embalajes y productos químicos, presenta el desafío de su revalorización debido a que puede ocasionar riesgos ambientales y para la salud asociados a sustancias no intencionalmente añadidas (NIAS), como ftalatos, compuestos orgánicos volátiles (VOCs) e hidrocarburos aromáticos policíclicos (PAHs). Estos contaminantes provienen de la degradación del polímero en el proceso de reciclaje y de la interacción entre el plástico y su entorno. Métodos como el ultrasonido o microondas son una alternativa más llamativa para los procesos de extracción, debido a que requieren menor tiempo de extracción en comparación con técnicas convencionales e implican menos variables de proceso y menores costos que otras técnicas como las aceleradas por presión (ASE) y los fluidos supercríticos. Es por esto que la presente investigación propone una alternativa sostenible para la descontaminación de HDPE mediante el uso de un solvente verde asistido por ultrasonido o microondas, con el objetivo de validar su capacidad de extracción y evaluar el efecto en las propiedades del material. Se seleccionó un solvente verde entre  $\alpha$ -pineno, aceite de eucalipto y eucaliptol mediante análisis por GC-MS. Se eligió aquel que mostró menor interferencia en la identificación de contaminantes. Se eligió tolueno como solvente control, según reportes en literatura. Se realizaron pruebas de solubilidad para conocer el comportamiento del plástico a diferentes temperaturas. Luego, se compararon tres métodos de extracción sólido-líquido en HDPE reciclado; extracción convencional (80 °C, 30-60 min), extracción con asistencia de ultrasonido (37 kHz, 20 °C, 30-60 min) y extracción con asistencia de microondas (2,45 GHz, 17 % de potencia, 10-20 min). El método que mostró mayor área relativa de contaminantes pasó a un diseño experimental (screening full factorial de dos niveles) en HDPE posconsumo; se analizó la fracción líquida por GC-MS, mientras que la fracción sólida fue analizada por espectroscopia infrarroja por transformada de Fourier (FT-IR), análisis termogravimétrico (TGA) y calorimetría diferencial de barrido (DSC). Los resultados indican que el eucaliptol fue el solvente con menor interferencia en GC-MS. Los ensayos de solubilidad evidenciaron que a HDPE a 80 °C, el HDPE permaneció insoluble tanto en eucaliptol como en tolueno. El método que mostró mayor porcentaje de áreas relativas totales fueron las extracciones con asistencia de microonda: 0,69 % de Ftalato, 41,36 % de VOCs. Es por esto que, se diseñó un diseño experimental variando potencia y tiempo. En la condición de 37 % por 20 minutos se alcanzaron  $\approx 100^\circ\text{C}$ , lo que provocó la disolución del polímero. Las condiciones válidas únicamente identificaron VOCs. Las extracciones con eucaliptol mostraron mayores porcentajes de áreas totales de VOCs que el tolueno. En la fracción sólida para los mejores resultados con eucaliptol (17 % de potencia por 20 minutos y 37 % de potencia por 10 minutos), el análisis FT-IR mostró las mismas bandas características; la muestra a 17 % de potencia por 20 minutos se muestra una banda tenue a los 880  $\text{cm}^{-1}$ , atribuible a un grupo aromático del solvente. TGA: Las temperaturas de degradación máxima fueron 481,72 °C (sin tratar), 478,50 °C (17 % de potencia por 20 minutos) y 476,33 °C (37 % de potencia por 10 minutos), mostrando una ligera reducción en la estabilidad térmica. DSC:  $T_m \approx 131,66\text{-}132,44^\circ\text{C}$ , sugiriendo que la cristalinidad del HDPE no se vio afectada. La extracción por microondas con eucaliptol mostró un mayor porcentaje de área relativa de recuperación de contaminantes frente a los otros métodos. Este desempeño se atribuye al calentamiento interno y a la rotación de dipolos características de las microondas, facilitando la ruptura de enlaces débiles y la liberación de compuestos atrapados en la matriz plástica. Asimismo, las propiedades del eucaliptol (baja polaridad, afinidad con contaminantes y alta constante dieléctrica) optimizan la absorción de energía aumentando la eficiencia del proceso. Estos resultados confirman

el potencial de esta alternativa como estrategia sustentable para revalorizar HDPE posconsumo.



## Adsorption of Aromatics on $\text{In}_2\text{O}_3$ in $\text{CO}_2$ Hydrogenation Catalytic Systems

R. Unzueta, P. Tapia, B. Sanhueza, T. Sandoval, I. Cornejo

*Departamento de Ingeniería Química y Ambiental, Universidad Técnica Federico Santa María, Chile.  
rodrigo.unzueta@usm.cl*

The hydrogenation of  $\text{CO}_2$  to methanol using green  $\text{H}_2$  is a key pathway in the transition to a low-carbon energy system. However, its limited equilibrium conversion under practical conditions challenges industrial scalability. A promising strategy to improve carbon efficiency is to couple methanol synthesis with methanol-to-hydrocarbons (MTH) conversion into a bifunctional catalyst. This enables direct gasoline production in a single reactor while improving  $\text{H}_2$  utilization. In recent years,  $\text{In}_2\text{O}_3$  has emerged as a potential catalyst for methanol synthesis due to the crucial role of oxygen vacancies in stabilizing  $\text{CO}_2$  activation, as well as favoring methanol formation over the competing reverse water-gas shift reaction. These two characteristics makes it an attractive option for bifunctional processes.

Aromatic species formed during MTH are important intermediates that may interact with the methanol-synthesis catalyst. If they adsorb on  $\text{CO}_2$ -activation sites, activity may be limited. This study evaluates benzene adsorption on c- $\text{In}_2\text{O}_3$  (110) pristine (P) and oxygen-defective (D) surfaces using density functional theory (DFT) calculations, to understand the thermodynamics of adsorption.

All calculations were performed with the BAND-AMS2024 package, employing the PBE functional with D3(BJ) dispersion corrections. Computational parameters, including a TZP basis set and a  $\Gamma$ -center  $3 \times 3 \times 1$  k-point mesh, were selected based on convergence tests to ensure reliable results.

The results show that benzene adopts a slightly tilted configuration in both models. Adsorption energies are -1.16 and -1.02 eV, with C-In distances of 2.77 and 2.92 Å for the P- and D-surfaces, indicating a cation- $\pi$  interaction. Periodic energy decomposition analysis (PEDA) shows stabilization mainly from electrostatics (-1.5 eV), orbital interactions (-1.2 eV), and dispersion (-0.55 eV); and an offset by Pauli repulsion (+2.2 eV). This balance gives intermediate-strength physisorption, stronger than van der Waals ( $\sim$  -0.5 eV) but weaker than chemisorption ( $>$  -1.5 eV on unsaturated oxide sites). These values fall within the range reported for benzene adsorption on hematite, where cation- $\pi$  and van der Waals interactions yield -0.28 to -1.52 eV.

Geometry optimizations confirm the tilted configuration, and small lateral displacements converged back to the same minima, confirming that the interaction is directional rather than purely dispersive. The P-surface shows stronger interaction and shorter C-In distance than the defective, likely due to geometric distortions or less favorable ring alignment at the vacancy site. In both cases, benzene lies tilted and anchored by directional cation- $\pi$  contacts without any sign of C-H activation, confirming physisorption. This tilted, nearly flat orientation suggests a propensity for site blocking that could hinder  $\text{CO}_2$  hydrogenation activity. Overall, the results indicate that c- $\text{In}_2\text{O}_3$  exhibits a non-negligible affinity for aromatics, and that operating conditions where such physisorption is less favorable may help mitigate this effect.

## Tuning Bifunctional Catalyst Ratios to Enhance Hydrogen Conversion and Acrylonitrile Selectivity

C. Reinao<sup>1</sup>, P. Díaz<sup>1</sup>, G. Núñez<sup>1</sup>, I. Cornejo<sup>1</sup>

*<sup>1</sup>Departamento de Ingeniería Química y Ambiental Universidad Técnica Federico Santa María, Chile.  
consuelo.reinao@usm.cl*

More sustainable chemical processes are vital to cut greenhouse gas emissions and improve efficiency. Hydrogen from renewable electrolysis enables an alternative route for acrylonitrile production, a key material for fibers and plastics. The traditional process involves two consecutive stages: first, ammonia (NH<sub>3</sub>) is synthesized from H<sub>2</sub> and N<sub>2</sub>, and then the stream is fed to a second reactor where acrylonitrile (ACN) is produced via propylene ammoxidation, generating by-products such as acetonitrile or acrolein. An alternative route integrates both steps in a bifunctional reactor, combining the catalysts in a specific configuration. This approach can reduce intermediate steps and costs. Also, reaction performance can be tailored by varying the mass ratio of each catalyst, potentially enhancing efficiency and selectivity.

This study investigates the bifunctional synthesis of acrylonitrile by tuning the ammonia-to-acrylonitrile catalyst ratio and analyzing its effect on hydrogen conversion and acrylonitrile selectivity. The methodology involved simulating a bifunctional batch reactor in Aspen Plus V14 with validated kinetic models. A parametric study varied the catalyst mass ratio from 20/80 to 80/20 (NH<sub>3</sub>/ACN), where conversion and selectivity were analyzed over time at 350 °C and 1 atm. Results showed that lower ammonia catalyst proportions accelerated the reaction, reaching 70 % conversion in 40 min for the 20/80 ratio (Fig 1a). This indicates faster equilibrium, with reactant availability becoming the main limitation as the series reaction rapidly consumes the intermediate. The opposite, lower acrylonitrile catalyst proportions produced slower but steadier rates, with the 80/20 ratio reaching 70 % conversion at 120 min. This configuration may be optimal to avoid rapid depletion. Overall, the results highlight a trade-off between conversion rate and reaction stability, enabling selection of catalyst ratios that balance both. Fig 1b shows the selectivity profiles: the 40/60 ratio maintained 70-75 % selectivity over long reaction times, indicating balanced performance between conversion and yield. Higher acrylonitrile fractions showed sharp initial peaks followed by gradual declines, likely due to secondary reactions, underscoring the importance of catalyst ratio optimization to minimize by-products.

## Mitigación del estrés por cobre en tomates mediante el uso de bacterias aisladas desde el relave Cauquenes

Jaime Ortega<sup>1,2,3</sup>, Gabriel Gálvez<sup>1,2</sup>, Gladis Serrano<sup>1,2</sup>, Samuel Parra<sup>3</sup>, Claudia Stange<sup>3</sup>, Mauricio Latorre<sup>1,2,4</sup>

<sup>1</sup>Laboratorio de Bioingeniería; Instituto de ciencias de la ingeniería; Universidad de O'Higgins, Rancagua, Chile.

<sup>2</sup>Centro de biología de sistemas para el estudio de comunidades extremófilas de relaves mineros (SYSTEMIX), Universidad de O'Higgins, Rancagua, Chile.

<sup>3</sup>Centro Biología Molecular Vegetal, Departamento de Biología, Facultad de Ciencias, Universidad de Chile, Santiago, Chile

<sup>4</sup>Laboratorio de bioinformática y expresión génica, INTA, Universidad de Chile, Santiago, Chile.

*jaime.ortega@uoh.cl*

Los relaves, como resultado de las actividades mineras, constituyen un ambiente extremo caracterizado por altas concentraciones de metales y pH ácido. En particular, el relave Cauquenes, originado a partir de desechos de la mina El Teniente, destaca como uno de los más grandes del país. Se analizó la abundancia y biodiversidad bacteriana dentro de este relave, descubriendo especies reportadas por su capacidad de promover el crecimiento vegetal (PGP). En este estudio, se aislaron bacterias con características potenciales de PGP para ser utilizadas en la mitigación del estrés por cobre (Cu) en tomates. Para ello, se generó una colección de aislados nativos y no redundantes a partir de muestras provenientes del relave Cauquenes, evaluando su resistencia Cu. Posteriormente, se realizaron ensayos para determinar sus características bioquímicas potencialmente PGP. Específicamente, se evaluó la capacidad de producción de ácido indol acético (IAA), la actividad 1-aminociclopropano-1-ácido carboxílico (ACC) deaminasa, la solubilización de fosfatos y la capacidad de fijación de nitrógeno. Los resultados mostraron que, del total de 12 aislados, 12 producían IAA y solubilizaban fosfatos, 11 mostraban la presencia de actividad ACC deaminasa y 10 mostraban fijación de nitrógeno. Posteriormente, se inocularon semillas de tomate con cada aislado y se sembraron en condiciones *in vitro*, evaluando el tamaño del tallo y de la raíz. De estos aislados, 4 aumentaron el tamaño del tomate en un escenario sin estrés de Cu. Posteriormente, 5 aislados aumentaron el tamaño de la planta en tomates tratados con una concentración subletal de Cu (150  $\mu\text{M}$   $\text{CuSO}_4$ ). Del mismo modo, 4 aislados provocaron un aumento en el tamaño de las plantas tratadas con una concentración letal de Cu (200  $\mu\text{M}$   $\text{CuSO}_4$ ). Uno de los 12 aislados (G5, *Paenarthrobacter nitroguajacolicus*) fue capaz de estimular el crecimiento de la planta en ambas condiciones de toxicidad, por lo que se seleccionó para inocular tomates creciendo en suelos con toxicidad por Cu (5 mM  $\text{CuSO}_4$ ), provocando un aumento en el tamaño de la planta en comparación con la condición sin inocular. En conjunto, los resultados indican que el relave Cauquenes es un reservorio de bacterias con características PGP que, gracias a su resistencia al Cu, podrían ser útiles para mejorar el desarrollo de las plantas en suelos contaminados con este metal.

Financiamiento: ANILLO ANID ACT210004; CMM ACE210010; MiCRG ICN2021\_044; Fondo Basal FB210005; FONDECYT 1230194; BASAL UOH-BioSav.

## Síntesis de 5-HMF a partir de residuos agroindustriales de la uva: un enfoque integrado de catálisis química y enzimática con evaluación del ciclo de vida

C. Armijo<sup>1</sup>, L. Tavernini<sup>1</sup>, P. Bobillier<sup>1</sup>, P. Urrutia<sup>1</sup>, L. Wilson<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Escuela de Ingeniería Bioquímica, Pontificia Universidad Católica de Valparaíso 2340000, Chile.

claudia.armijo.g@mail.pucv.cl

La industria vitivinícola genera una cantidad considerable de biomasa, sólo en el año 2024 se alcanzó una producción promedio de 231 millones de hectolitros de vino, con una producción nacional de 930 mil m<sup>3</sup>, generando más de 500.000 toneladas de residuos orgánicos (OIV). Estos residuos poseen componentes con propiedades valiosas, en donde la presencia de azúcares solubles (como glucosa y fructosa) y celulosa aumentan el atractivo de valorizar esta biomasa para la síntesis de productos de alto valor agregado. La fructosa ha cobrado gran relevancia debido a su reacción de deshidratación química para la producción de 5-hidroximetilfurfural (HMF), el cual, está clasificado como una de las doce moléculas biológicas principales derivadas de la biomasa, ya que es una plataforma versátil para sintetizar una amplia gama de compuestos químicos, incluidos polímeros, productos farmacéuticos, biocombustibles, aditivos y productos químicos finos. El presente estudio tuvo como objetivo valorizar el orujo de uva para la síntesis de HMF, evaluando pretratamiento, hidrólisis enzimática y deshidratación química e integrando análisis de ciclo de vida (ACV), con miras a escalabilidad y sostenibilidad.

Un pretratamiento de 3 ciclos consecutivos de 1 hora, a 55 °C con agua fue realizado para extraer azúcares solubles. Posteriormente, el orujo pretratado fue hidrolizado con celulasas comerciales (Cellic® CTec3), en donde se evaluó efecto de la temperatura y el pH. El HMF fue sintetizado por medio de la deshidratación química, en presencia del catalizador Amberlyst® 15, de los azúcares extraídos, se evaluaron las fracciones obtenidas en la etapa de pretratamiento e hidrólisis enzimática de forma independiente, a 120 °C por 2 horas en un reactor presurizado. Las concentraciones de glucosa, fructosa y HMF fueron determinadas por HPLC. Se empleó un enfoque de “cuna a puerta” para el ACV basado en las normas ISO 14040 y 14044 para la gestión ambiental y la unidad funcional se estimó de 1 kg de HMF. La simulación de los procesos de biorrefinería fue implementada en Python 3.9 utilizando la biblioteca de código abierto BioSTEAM.

El pretratamiento seleccionado fue de un ciclo a 55 °C, cuyo rendimiento de extracción de glucosa y fructosa fue de 295,41 y 314,71 mg g<sup>-1</sup> orujo seco, respectivamente. En la etapa de hidrólisis, los mayores rendimientos de glucosa fueron alcanzados a 50 °C y pH 5, con un valor de 179,23 mg g<sup>-1</sup> orujo seco. La deshidratación química obtuvo valores similares de rendimiento de HMF (%) de 10,9 y 11,2 para las fracciones de azúcares solubles extraídas en el pretratamiento y el hidrolizado, respectivamente. Sin embargo, la conversión de fructosa en la fracción de pretratamiento fue un 60% mayor a la conversión obtenida en la fracción de hidrolizado. Los resultados del ACV revelaron que la eficiencia del proceso es un factor clave para evaluar la sostenibilidad medioambiental. Se encontró una clara correlación inversa entre la conversión del proceso y el potencial de calentamiento global (GWP, en inglés). En donde, para un escenario desafiante en donde la conversión se fijó en un valor de 45%, y tres casos: (i) Sin valorización de orujo, (ii) Valorización de la fracción pretratada y (iii) Valorización del hidrolizado, los valores de GWP obtenidos fueron de 6,69, 1,06 y 0,48 kg CO<sub>2E</sub> kg<sup>-1</sup>UF, respectivamente para cada caso. Así, la valorización del orujo de uva blanca para la síntesis de HMF es una estrategia altamente viable y sostenible a nivel local. Financiamiento: Proyecto FONDECYT N° 1241317.

## **Study of the Effect of 3D Printing Parameters on the Dielectric Constant in Piezoelectric Polylactic Acid/Barium Titanate Composites via Fused Granular Fabrication**

**Dreidy Vásquez<sup>1</sup>, Rodrigo Ruz<sup>1</sup>, Francisco Pizarro<sup>2</sup> y Rodrigo Ortiz<sup>1</sup>**

<sup>1</sup>*Escuela de Ingeniería Química, Pontificia Universidad Católica de Valparaíso, Valparaíso 2362804, Chile.*

<sup>2</sup>*Escuela de Ingeniería Eléctrica, Pontificia Universidad Católica de Valparaíso, Valparaíso 2362804, Chile.*

[dreidy.vasquez@pucv.cl](mailto:dreidy.vasquez@pucv.cl)

This research aims to study the fabrication of electronic devices using pellet extrusion 3D printing with composite material. The process employed a polymer-based composite material that incorporated a substantial amount of barium titanate powder, reaching 80 wt.%. A thorough examination was conducted to understand the various factors influencing the printed components, using a design of experiments (DOE) approach. This method identifies the optimal printing parameters for a Custom Fused Granular Fabrication printer, such as layer height (0.32), barrel temperature (240°C), flow rate (500), and printing speed (2 mm/s). The dielectric constant of the polylactic acid - barium titanate composite reached 8.47 and a loss tangent of 0.099 in the X-band, making it suitable for applications involving high frequencies with a lower cost process and using a more sustainable polymer.

## Nanocelulosa funcionalizada como refuerzo en adhesivos bio-basados: hacia alternativas sostenibles para la industria de la madera

C. Fritz<sup>1,2</sup>, J.F. Olivera<sup>1,3</sup>

<sup>1</sup>*Departamento de Desarrollo en Productos Forestales, Facultad de Ciencias Forestales y de la Conservación de la Naturaleza, Universidad de Chile, Santiago 8820808, Chile.*

<sup>2</sup>*Centro Nacional de Excelencia para la Industria de la Madera (CENAMAD), Proyecto FB210015 (ANID), Pontificia Universidad Católica de Chile, Santiago 7780366, Chile.*

<sup>3</sup>*Center of Innovation and Applied Science, Santiago, Chile*

*cfritz@uchile.cl*

La transición hacia materiales más sostenibles y de bajo impacto ambiental es un desafío clave para la ingeniería química y los sectores productivos. En este contexto, los adhesivos de base biológica surgen como una alternativa innovadora para reemplazar formulaciones tradicionales dependientes de recursos fósiles. Este trabajo presenta el desarrollo de un sistema adhesivo de poli(acetato de vinilo) (PVAc) reforzado con nanopartículas de celulosa (CNP), obtenidas a partir de subproductos de la industria agrícola y forestal, contribuyendo a la valorización de residuos lignocelulósicos.

Las CNP extraídas se obtuvieron en formato de nanocristales y nanofibras de celulosa para evaluar el efecto de estos nanomateriales en la estabilización de la emulsión final. Las CNP fueron caracterizadas química y morfológicamente, y posteriormente incorporadas al PVAc mediante polimerización en emulsión in situ. Se evaluaron tanto en su estado original como después de su funcionalización superficial con agentes de acoplamiento de silano, con el objetivo de mejorar la compatibilidad y la interacción interfacial. Los adhesivos resultantes fueron sometidos a ensayos estandarizados de unión en madera, análisis de propiedades mecánicas y pruebas de durabilidad frente al agua.

Los resultados muestran que la incorporación de CNP, en especial cuando son funcionalizadas, genera mejoras significativas en la resistencia y estabilidad del adhesivo, logrando aumentos relativos en resistencia del 20% respecto a la muestra control, posicionándolos como alternativas potenciales competitivas frente a productos comerciales. Este enfoque no solo aporta innovación tecnológica, sino que también promueve la sostenibilidad mediante el uso de recursos renovables y la reducción de la huella ambiental en la industria de la madera.



## Transformando residuos en oportunidades: explorando el potencial de la biofabricación con micelio

C. Fritz<sup>1,2</sup>, J.F. Olivera<sup>1</sup>

<sup>1</sup>*Departamento de Desarrollo en Productos Forestales, Facultad de Ciencias Forestales y de la Conservación de la Naturaleza, Universidad de Chile, Santiago 8820808, Chile.*

<sup>2</sup>*Centro Nacional de Excelencia para la Industria de la Madera (CENAMAD), Proyecto FB210015 (ANID), Pontificia Universidad Católica de Chile, Santiago 7780366, Chile.*

*cfritz@uchile.cl*

La creciente demanda por alternativas sostenibles a los materiales convencionales ha posicionado a los biocompuestos basados en micelio (MBCs) como candidatos prometedores dentro de la bioeconomía circular. Este trabajo es una compilación de varios estudios realizados en los últimos 3 años en la Facultad y que entrega información acerca del potencial de subproductos para producir MBCs. De esta forma, se evalúa el desarrollo, trabajabilidad y la caracterización de MBCs producidos con subproductos agroforestales locales, específicamente cáscaras de avellana europea (*Corylus avellana*), aserrín de pino radiata (*Pinus radiata*), paja de trigo (*Triticum aestivum*) y cascarilla de arroz (*Oryza sativa*), colonizados por *Ganoderma* sp.

Se analizaron propiedades de trabajabilidad de estos materiales, tales como capacidad de resistir máquinas de corte y adherencia con pinturas. Además, se analizaron propiedades físicas (densidad, contracción, absorción de agua, hidrofobicidad), mecánicas (módulo de ruptura, módulo de elasticidad y resistencia a la tracción interna) y de biodegradación (ASTM D5988-18) para evaluar su desempeño e impacto ambiental. La fabricación de MBCs exhibe desafíos que son analizados en estos estudios, con el objetivo de aportar con conocimientos para enfrentarlos. Los resultados mostraron que, en general, las formulaciones mixtas alcanzaron mayor resistencia mecánica en comparación con los biocompuestos de un solo sustrato por sí solo. Al emplear cáscara de avellana europea se lograron valores de MOR y MOE de 43 kPa y 34 kPa, respectivamente, mientras que al incorporar un 25% de pino radiata estos valores subieron a 56 kPa y 43 kPa, respectivamente. Sin embargo, el tipo de sustrato influyó significativamente en las propiedades, ya que con rastrojo de trigo se obtuvo un MOR de 343 kPa, mientras que al incorporar un 50% de rastrojo de avena esta propiedad bajó a 75 kPa. En general, todos los sustratos permitieron el desarrollo de bloques de micelio con superficies hidrofóbicas y absorción moderada de agua, mientras que las pruebas de biodegradación confirmaron su completa descomposición en aproximadamente un año. Estos hallazgos destacan el potencial de residuos agroforestales, por ejemplo, la cáscara de avellana, el aserrín, la paja de trigo y la cascarilla de arroz, como materias primas para generar materiales innovadores, biodegradables y de bajo impacto, contribuyendo a la transición hacia soluciones sostenibles en envases, aislación y aplicaciones constructivas no estructurales. También se detectaron desafíos como la alta variabilidad del material, problemas asociados con la contaminación y la falta de normalización que regulen su fabricación y caracterización; limitaciones como la falta de conocimiento profundo del comportamiento a largo plazo; y oportunidades como la valorización de residuos agroforestales, sustitución de materiales petroquímicos e integración con manufactura digital y aplicaciones en arquitectura sostenible.



## CINÉTICA Y OPTIMIZACIÓN DEL PROCESO DE ESTERIFICACIÓN ENZIMÁTICA DEL ÁCIDO SUCCÍNICO EN EL LÍQUIDO IÓNICO [P<sub>6,6,6,14</sub>][PHOS] UTILIZANDO NOVOZYM 435 EN REACTORES BATCH

N. Monsalve<sup>1</sup>, P. Lozano<sup>2</sup>, S. Nieto<sup>2</sup>, R. Cabezas<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Universidad Católica de la Santísima Concepción, Concepción, Chile

<sup>2</sup>Universidad de Murcia, Murcia, España

nmonsalve@qaciencias.ucsc.cl

La esterificación enzimática del ácido succínico (SA) con etanol para producir succinato de dietilo (DS) y agua representa una estrategia innovadora y sostenible para la obtención de ésteres, aprovechando la biocatálisis en medios no convencionales. Este estudio se centró en determinar las constantes cinéticas de esta reacción utilizando lipasa inmovilizada Novozym 435 como catalizador y el líquido iónico hidrofóbico Triexiltetradecilfosfonio bis(2,4,4-trimetilpentil)fosfinato ([P<sub>6,6,6,14</sub>][PHOS]) como medio de reacción. Los experimentos se realizaron en un reactor batch a dos temperaturas de operación (60 °C y 70 °C), con concentraciones iniciales de SA entre 10 y 60 g/L. Para mejorar la eficiencia de la reacción y desplazar el equilibrio hacia la formación de DS, se emplearon tamices moleculares para remover continuamente el agua, subproducto del proceso de esterificación.

La reacción siguió una cinética de tipo Michaelis–Menten con un mecanismo de complejo ternario. Se determinaron valores típicos de los parámetros cinéticos, con V<sub>max</sub> entre 0,15 y 0,25 mmol·min<sup>-1</sup>·g<sup>-1</sup> de enzima, y constantes K<sub>m</sub> de 10–20 mM para SA y 30–40 mM para etanol. Una ventaja única de [P<sub>6,6,6,14</sub>][PHOS] es la capacidad aceptora de puentes de hidrógeno de su anión, lo que permite una disolución eficiente del SA en el líquido iónico, superando una limitación frecuente de otros líquidos iónicos hidrofóbicos. Además, el carácter hidrofóbico del medio estabilizó la conformación activa de la enzima al preservar su capa de agua circundante, reduciendo la inhibición por sustrato y manteniendo una alta actividad catalítica.

De manera destacada, el DS, producto de la reacción, resultó insoluble en el líquido iónico, lo que permitió su separación espontánea del medio a medida que se formaba. Esta auto-separación no solo redujo la necesidad de etapas complejas de purificación, sino que además favoreció la remoción continua del producto, mejorando la eficiencia global en el sistema batch. La combinación de tamices moleculares para la eliminación de agua y la auto-separación del DS resalta la eficiencia de este sistema integrado para la producción de ésteres.

En conclusión, este estudio demuestra la idoneidad de [P<sub>6,6,6,14</sub>][PHOS] como medio de reacción para la esterificación enzimática, ofreciendo un entorno estable y eficiente para la evaluación cinética y la intensificación del proceso. La capacidad del líquido iónico de disolver SA y, al mismo tiempo, facilitar la separación de DS evidencia su doble función como solvente y agente potenciador del proceso. Estos hallazgos aportan información valiosa para el diseño y optimización de reactores batch en procesos de esterificación y subrayan el potencial de los líquidos iónicos como alternativas verdes en la producción sostenible de compuestos químicos de alto valor.

## Diseño de un mecanismo para la optimización de la transferencia de oxígeno e hidrógeno en un *Cocurrent Downflow Contactor Reactor* (CDCR)

V. Vila<sup>1</sup>, A. Vergara<sup>1,2</sup>

<sup>1</sup>Universidad de los Andes, Facultad de Ingeniería y Ciencias Aplicadas.

<sup>2</sup>Green Technologies Research Group (G-Tech)

*vavila@miuandes.cl*

En la actualidad, la optimización del tratamiento de gases contaminantes representa un área emblemática de la ingeniería química, donde el establecimiento adecuado tanto del tipo de medio como de las condiciones de operación, son imprescindibles para la obtención de un proceso armónico con los resultados más favorables. Diversos parámetros son considerados y controlados: la temperatura, la presión, tipo de reactor, reacción a llevar a cabo, entre otros. Sin embargo, existen limitaciones que condicionan la eficiencia del proceso, destacando la transferencia de masa. Asimismo, los compuestos de trabajo, que corresponden al oxígeno e hidrógeno, poseen baja solubilidad en agua, cuyos valores a 25°C y presión atmosférica es de 8.7 mg/L y 1,62 mg/L respectivamente, por lo que cumplen un rol significativo en la obtención de valores deseados para las variables recientemente mencionadas. Frente a este contexto, se propone en esta investigación el uso de un *Cocurrent Downflow Contactor Reactor* (CDCR), un reactor cuyo flujo descendente e hidrodinámica para mezclar gas y líquido, permiten alcanzar valores altos para el  $k_La$ , es decir, con el fin de intensificar la transferencia de estos compuestos en el líquido.

Se implementó un diseño experimental orientado a evaluar la influencia del caudal de gas (0.3, 0.6 y 0.9 L/min) y líquido (8, 10 y 13 L/min) en la entrada del sistema, considerando el hidrógeno como el gas de estudio. El coeficiente volumétrico de transferencia de masa  $k_La$  se determinó mediante el método *gassing out*. Los valores obtenidos de  $k_La$  bajo las distintas condiciones experimentales fueron posteriormente evaluados mediante análisis estadístico.

## Diseño de una planta de producción de amoníaco verde

M. Trujillo<sup>1</sup>, G. Núñez<sup>1</sup>

<sup>1</sup> *Departamento de Ingeniería Química y Ambiental, Universidad Técnica Federico Santa María, Campus San Joaquín, Santiago.*

*gonzalo.nunezm@usm.cl*

La transición energética global, impulsada por la necesidad de reducir las emisiones de gases de efecto invernadero, posiciona a Chile como un actor clave en la producción de combustibles limpios gracias a sus vastos recursos renovables. En este contexto, la producción local de amoníaco verde emerge como una estrategia fundamental para descarbonizar sectores industriales y sustituir importaciones. Actualmente, Chile depende completamente de las importaciones de amoníaco derivado de fósiles, habiendo importado 366.147 toneladas en 2022, destinadas principalmente a la fabricación de explosivos para la minería y fertilizantes. Este trabajo presenta la evaluación técnica y económica del diseño de una planta de amoníaco verde a escala industrial, orientada a satisfacer la demanda del sector de fertilizantes nitrogenados, estimada en 400.000 ton/año.

El diseño se desarrolló mediante simulación de procesos en Aspen Plus V14, utilizando el paquete termodinámico de Peng-Robinson, adecuado para describir el comportamiento no ideal de la mezcla gaseosa a las altas presiones del proceso. La planta se estructuró en tres secciones principales: pretratamiento, reacción y separación. Se diseñó un tren de compresión de dos etapas con enfriamiento intermedio para elevar la mezcla de materias primas ( $H_2$  y  $N_2$ ) de 30 a 200 bar. El corazón del proceso, el reactor Haber-Bosch, se modeló como un sistema de reactores de flujo en pistón (PFR) adiabáticos en serie con enfriamiento intermedio, simulando un reactor comercial multilecho con un catalizador de magnetita. Esta configuración, operando con una temperatura de entrada de 340 °C, permite alcanzar una conversión de nitrógeno del 30% por pasada, controlando la naturaleza exotérmica de la reacción para no exceder la temperatura máxima del catalizador (550 °C). La planta fue dimensionada para una capacidad de producción de 1.071 ton/día. La eficiencia del diseño del reactor se validó mediante el cálculo de la Velocidad Espacial Horaria de Gas (GHSV), obteniendo un valor de 11.405 h<sup>-1</sup>, el cual es consistente con tecnologías industriales modernas y asegura un uso eficiente del catalizador. La separación del producto se realiza en un separador flash operando a 0 °C y 200 bar, logrando una pureza del 99,5% (grado comercial), apta para el mercado de fertilizantes.

La evaluación económica determinó una inversión de capital (CAPEX) de 92 MMUSD y un costo de operación (OPEX) de 350 MMUSD/año. El elevado OPEX se debe principalmente al costo de la materia prima principal, el hidrógeno verde, estimado en 5 USD/kg. Considerando una vida útil de 25 años y una tasa de descuento del 8%, se obtuvo el resultado principal: un costo unitario de producción de 907 USD por tonelada. Este valor, aunque superior a las alternativas basadas en combustibles fósiles (423 USD/ton para amoníaco gris y 665 USD/ton para azul), es competitivo dentro del rango internacional actual para el amoníaco verde (720-1400 USD/ton). El estudio confirma la viabilidad técnica del proyecto y establece una base económica robusta para el desarrollo de una industria nacional de amoníaco verde.

## ÁREA TEMÁTICA

MEDIO AMBIENTE, ENERGÍA Y RECURSOS HÍDRICOS



**XXII**  
Congreso  
Chileno de  
Ingeniería  
Química

## Predicción de la Producción de Vapor de una Caldera Recuperadora mediante *Machine Learning*

Walter Fernández<sup>1</sup>, Fredy Troncoso<sup>2</sup>, Eduardo Keim<sup>3</sup>

<sup>1</sup>*Departamento de Ingeniería en Madera, Facultad de Ingeniería, Universidad del Bío-Bío, Concepción, Chile.*

<sup>2</sup>*Departamento de Ingeniería Industrial, Facultad de Ingeniería, Universidad del Bío-Bío, Concepción, Chile.*

<sup>3</sup>*Bioforest S.A., Arauco, Coronel, Chile.*

*wafernan@alumnos.ubiobio.cl*

La industria de la celulosa Kraft, se ve afectada económicamente por la producción no constante de vapor de la caldera recuperadora, al no alcanzar la capacidad de diseño, afectando negativamente la venta de energía eléctrica al Sistema Eléctrico Nacional (SEN). El objetivo de esta investigación es aplicar algoritmos de *machine learning* para clasificar la producción de vapor a partir de las propiedades del licor negro y los aires de combustión de la caldera recuperadora.

Se empleó la metodología KDD (*Knowledge Discovery in Databases*), que incluye la selección y limpieza de datos históricos de las variables, la transformación y selección de variables, la aplicación de algoritmos de *machine learning*, y la evaluación e interpretación de los resultados. Además, se emplearon técnicas como *cross validation* para garantizar la robustez de los modelos, la normalización para evitar problemas de escala entre los datos, y la técnica SMOTE para balancear las clases de la variable de éxito (producción de vapor).

Los datos empleados se obtuvieron del sistema de información de la industria de celulosa Kraft, se descargaron un total de 420.000 datos por variables, de un total de 9 variables, con una frecuencia de 1 minuto y en el periodo de marzo a diciembre de 2023. Los algoritmos empleados en esta investigación fueron: SVM, AutoMLP, k-NN, Naive Bayes y Árbol de Decisiones. La variable de éxito, (producción de vapor) se definió en función de la problemática, la producción de vapor no constante.

Los resultados obtenidos muestran que la producción de vapor de la caldera recuperadora se puede clasificar con éxito empleando algoritmos de *machine learning*, logrando poderes de predicción de clasificación mayores al 90 %. El algoritmo k-NN obtuvo un *accuracy* del 97,8 % y un área bajo la curva ROC (AUC) de 0,98. El análisis de la matriz de correlación mostró que el flujo de licor negro a quemado es la variable más importante en la producción de vapor, debido a los sólidos que aportan la energía necesaria para el proceso. Los aires de combustión también mostraron influencia en la variable de éxito debido a que una de sus funciones es el control térmico de la caldera recuperadora. Como conclusiones generales de esta investigación, se puede mencionar la capacidad de los algoritmos de *machine learning* para identificar patrones y clasificar la producción de vapor de la caldera recuperadora. La implementación en la industria del algoritmo k-NN permitiría optimizar la operación de la caldera recuperadora, maximizando la producción de vapor. Se estima que operar la caldera recuperadora en el rango de alta producción de vapor, podría generar un beneficio económico a la empresa de hasta 3,7 MM USD al año.

Como trabajo futuro, se recomienda implementar el algoritmo k-NN en el sistema de control de la caldera recuperadora y evaluar su desempeño en condiciones reales.

## 3D/2D CFD particle-resolved and porous media modeling of the heterogeneous combustion of carbon char in a fixed-bed reactor

A. Arriagada<sup>1,2</sup>, M. Toledo<sup>1</sup>, R.E. Hayes<sup>2</sup>, P. Nikrityuk<sup>2</sup>

<sup>1</sup>*Department of Mechanical Engineering, Universidad Técnica Federico Santa María, Av. España 1680, Valparaíso, Chile.*

<sup>2</sup>*Department of Chemical and Materials Engineering, Donadeo Innovation Centre for Engineering, University of Alberta, 9211-116 St., Edmonton, AB, T6G1H9, Canada.*  
*andres.arriagada@usm.cl*

Hybrid porous media reactors have been studied for hydrogen production under gasification regimes. From a numerical perspective, heterogeneous combustion processes are complex due to the multiphase phenomena involved in the thermal decomposition of carbon. This work numerically investigates carbon char gasification using both particle/macro-pore-resolved and porous media models (PMM) in 3D/2D chemically reacting fixed-bed (CRFB) configuration for non-porous char, and a single carbon char particle, in order to assess the accuracy and applicability of simplified PMMs. The effects of Reynolds number ( $Re_{in}$ ), inflow gas temperature ( $T_{in}$ ), and oxidative atmosphere ( $Y_{O_2,in}$ ) are evaluated, along with the feasibility of a 2D axisymmetric PMM to represent a 3D particle-resolved approach of carbon char gasification. Additionally, a macro-pore-resolved approach is compared against a PMM using a single carbon char particle to assess the effect of intrinsic chemical reactions. Simulations were performed using the commercial software Ansys Fluent, implementing a six semi-global kinetic scheme, consisting of carbon monoxide combustion, forward and backward water-gas-shift reaction, Boudouard reaction, and two other heterogeneous reactions. The fixed-bed was composed of 85 spherical particles with a 5.6 mm diameter, located in the bed zone and subsequently placed in a stationary position. Results from the CRFB simulations showed a significant role of the inflow gas temperature in the gasification process, particularly for  $T_{in} = 1300$  K. Minimal deviations in the mass fractions of all species were observed for  $Y_{O_2,in} = 0.05$ , being 3.6% for CO, 5.5% for CO<sub>2</sub> and 0.76% for temperature within the porous zone. At a particle scale, results showed good agreement specially for  $T_{in} = 2000$  K, where the maximum deviation in CO<sub>2</sub> was 1.54%. The effect of variable porosity, tortuosity, effective diffusivity, dispersion, and thermal conductivity is further discussed. Tailoring a PMM approach, making results close to those obtained using a PRS model, opens new possibilities for the accurate and efficient modeling of CRFBs aimed at renewable hydrogen generation.



## A Novel validation of the Gas Flow in CFD-CT Simulations of Packed Bed Biofilters via Residence Time Distributions

Felipe A. Carreño-López<sup>a,\*</sup>, Patricio A. Moreno-Casas<sup>a</sup>, Felipe Scott<sup>a</sup>, Jon Iza<sup>c</sup>, José Sierra- Pallares<sup>d</sup>, Raúl Muñoz<sup>b</sup>, Alberto Vergara-Fernández<sup>a</sup>.

<sup>a</sup>Green Technology Research Group, Facultad de Ingeniería y Ciencias Aplicadas, Universidad de los Andes.

<sup>b</sup>Institute of Sustainable Processes, Universidad de Valladolid, Spain.

<sup>c</sup>University College of Engineering of Vitoria-Gasteiz, University of the Basque Country UPV/EHU, Spain

<sup>d</sup>Departamento de Ingeniería Energética y Fluidomecánica & ITAP, Escuela de Ingenierías Industriales, Universidad de Valladolid, Spain.

[\\*facarreno@miuandes.cl](mailto:facarreno@miuandes.cl)

Biofiltration and biotrickling filtration of volatile organic compounds (VOCs) have become an economical and ecologically friendly alternative for the treatment of air streams polluted with low VOC concentrations. Multiple mathematical models have been applied to describe the main processes involved in these bioreactors. However, the inherent difficulties of mimicking the complex porous bed in conventional simulations have typically resulted in models that do not include the fluid dynamic behavior in biofilters or biotrickling filters. In this context, Computational Fluid Dynamics (CFD) simulation has become a powerful modeling tool that allows the three-dimensional (3D) representation of the reactors. CFD is based on numerical methods to analyze fluids moving throughout packed bed columns. Recently, CFD coupled with computational tomography (CT) has been used to study preferential flows in a packed bed biofilter and to describe the gas-liquid mass transfer coefficient in a biotrickling filter, unveiling the potential of these techniques in the future design of gas-phase bioreactors. Despite the potential of CFD-CT, validation against experimental data becomes crucial to generate a reliable, reproducible, and scalable model. For instance, these models were validated against experimental data based on pressure drops and gas-liquid mass transfer coefficients. However, none of the above models could validate the modeled gas flow distributions inside the reactor, which is relevant to improving the design and selecting the proper operating conditions to avoid flow maldistribution and axial dispersion. This work explored the feasibility of validating the gas flow field distribution of a coupled 3D CFD-CT simulation of a packed bed column used in gas biofiltration using a novel experimental methodology based on the residence time distribution (RTD) characterization obtained from the measurements of a low-cost metal oxide, MOx, sensor. For this purpose, the methodology presented herein consists of four steps. Firstly, the sensor behavior is calibrated to ensure that the calibration captured the environmental and operational effects. Secondly, the RTD of an abiotic biofilter reactor packed with a fixed structure of polybutylene rings is evaluated. Thirdly, a realistic description of the packed bed structure is obtained by computational tomography, CT, and subsequently used to define the mesh of the computational domain to obtain the RTD of the gas flow by a 3D CFD simulation. The comparison between the experiments and the CFD simulations showed good agreement between both shapes of the RTD distribution with a relative difference of 4.2% for the mean RTD, denoting the potential of the proposed methodology to validate the CFD model and predict the moments of the RTD.

## Propuesta de Modelos de Negocios para el Desarrollo del Hidrógeno Verde en Chile

Salazar-Navarrete José Luis<sup>1</sup>, Díaz Aburto Isaac<sup>1</sup>, Vega Viveros Ricardo<sup>1</sup>,  
Vivanco-Soffia María Elena<sup>2</sup>

<sup>1</sup>*Departamento de Ingeniería Química y Bioprocesos, Universidad de Santiago de Chile.*  
[Jose.salazar@usach.cl](mailto:Jose.salazar@usach.cl)

<sup>2</sup>*Facultad de Ingeniería, Universidad Andrés Bello, Chile*

El hidrógeno verde (H<sub>2</sub>V) se presenta como una oportunidad estratégica para diversificar la matriz energética de Chile, avanzar en la carbono neutralidad y generar nuevas ventajas competitivas a nivel industrial. En este contexto, se hace necesario proponer estructuras de modelos de negocios que respondan a las particularidades del entorno chileno, integrando dimensiones tecnológicas, territoriales, económicas y sociales.

Este trabajo propone una arquitectura de modelos de negocios orientados a la implementación efectiva del H<sub>2</sub>V, articulando una mirada sistémica que considera desde la producción a gran escala hasta el consumo local descentralizado. La metodología empleada incluye el análisis de escenarios tecnológicos, revisión de capacidades energéticas regionales, mapeo de actores clave del ecosistema, y el diseño de propuestas estratégicas adaptativas que respondan a las necesidades de distintos sectores productivos.

Se presentan tres modelos principales: (i) **modelo de exportación**, con énfasis en el aprovechamiento del potencial eólico e hídrico de la Región de Magallanes para abastecer mercados internacionales de hidrógeno y sus derivados como el amoníaco verde; (ii) **modelo de sustitución industrial**, que busca reemplazar combustibles fósiles en industrias intensivas en energía como la minería, con proyectos piloto en el norte del país; y (iii) **modelo de desarrollo territorial**, que promueve la generación distribuida y el uso comunitario de H<sub>2</sub>V en zonas rurales o aisladas, facilitando la inclusión energética y la resiliencia local.

Los resultados obtenidos a partir del cruce de variables territoriales, técnicas y económicas indican que la implementación exitosa de estos modelos dependerá de una gobernanza robusta, marcos normativos adecuados, incentivos financieros y un ecosistema de innovación alineado con los objetivos de sostenibilidad. La integración de herramientas como certificación de origen renovable, esquemas de financiamiento climático y mecanismos de compra pública pueden acelerar la adopción de estas soluciones.

En conclusión, se plantean propuestas concretas y diferenciadas para el despliegue del hidrógeno verde en Chile, que permiten avanzar hacia una economía energética más limpia, resiliente y competitiva, con impactos positivos tanto en la descarbonización como en el desarrollo territorial inclusivo.

## EVALUACIÓN TÉCNICO-ECONÓMICA PARA LA DEPURACIÓN DE ÁCIDO CARBÓNICO, MEDIANTE EL USO DE HUMEDALES ARTIFICIALES PARA LA UNIVERSIDAD TECNOLÓGICA METROPOLITANA

B Castro<sup>1</sup>, C López<sup>1</sup>

*<sup>1</sup>Departamento de Química, Facultad Ciencia Naturales, Matemática y del Medio Ambiente, Universidad Tecnológica Metropolitana, las palmeras 3360, Ñuñoa Santiago, Chile.  
bcastroc@utem.cl*

En el laboratorio de operaciones unitarias (LOPUTEM) se lleva a cabo la experiencia de “columna de absorción” perteneciente a la carrera de ingeniería química, en donde se absorbe  $\text{CO}_2$  en agua produciendo ácido carbónico  $\text{H}_2\text{CO}_3$ . El  $\text{H}_2\text{CO}_3$  es un ácido que en contacto con las cañerías de acero produce una reacción corrosiva que afecta principalmente la superficie interna de las cañerías produciendo un precipitado de carbonato de hierro  $\text{FeCO}_3$ , que al desprenderse por acción del flujo desgasta la pared interna de la cañería, este proceso se conoce como “corrosión suave”. Cuando se termina la experiencia el agua se vierte directamente al alcantarillado sin un tratamiento previo, siendo las condiciones de salida de la columna de absorción: 210 litros y 36,85 (g) de  $\text{CO}_2$  disuelto. Para dar solución a la problemática se optó por la construcción de un humedal artificial, dado a que los humedales artificiales son sistemas de depuración pasivos de bajo coste en donde el contaminante es tratado a medida que se desplaza en el sistema. Para evaluar la efectividad del sistema, se realizó una búsqueda bibliográfica con el objetivo de seleccionar identificar los fenómenos asociados a la captura de carbono en humedales construidos y determinar los parámetros de calidad de agua afines que permitan teorizar una efectiva remoción del  $\text{H}_2\text{CO}_3$ .

De los procesos que participan en la captación de carbono se identificaron: el crecimiento de la biopelícula producto de la respiración celular de las plantas del humedal y los procesos metabólicos de las bacterias nitrificantes (Nitrobacter y Nitrosomas), las cuales degradan de forma acoplada amonio  $\text{NH}_4$  y nitrito  $\text{NO}_2$  a nitrato  $\text{NH}_3$ . Para que la degradación ocurra se requiere de un consumo de oxígeno y carbono inorgánico  $\text{CO}_2$ , por lo que el humedal a implementar fue del tipo subsuperficial vertical altamente utilizado en la remoción de amonio cuyo modelo de menor tamaño funciona con cargas y descargas lo que permite una oxidación del sustrato aportando el oxígeno necesario para las bacterias puedan operar.

Para el dimensionamiento, se utilizó la ecuación de Kickuth, un modelo basado en la demanda biológica de oxígeno ( $\text{DBO}_5$ ) dimensionó el área superficial del humedal siendo:  $0,334 \text{ (m}^2\text{)}$ , la profundidad  $0,7 \text{ (m)}$ , la porosidad del 30% y una temperatura operacional de  $20^\circ\text{C}$  estimando así una remoción teórica del 80% en base a los modelos de remoción de nitrógeno.

Para la construcción se utilizó el monto adquirido por la iniciativa universitaria “acción sustentable” en donde se otorgaron 1.700.000 en donde las condiciones de la comisión requerían que la construcción la realizara un tercero por lo que se buscó la cotización de un proveedor capaz de satisfacer las condiciones propuestas siendo el coste total de 1.600.000 CLP. Estando el humedal propuesto espera a ser entregado a la universidad.

## Degradación fotocatalítica eficiente de tetraciclinas utilizando LDH soportados en hidrochar

Jeffrey Saúl Cedeño-Muñoz<sup>1,2</sup>, Bryan Jesus Zumarraga-Valencia<sup>2</sup>, Adriana Margarita Tucker-Quiñónez<sup>2</sup>, Jaime E. Cevallos-Mendoza<sup>3</sup>, Bryan Fernando Rivadeneira-Mendoza<sup>3</sup>, Joan Manuel Rodríguez-Díaz<sup>2,3</sup>

<sup>1</sup>Laboratory of Thermal and Catalytic Processes (LPTC-UBB), Department of Process Engineering and Bioproducts, Engineering Faculty, Universidad del Bio-Bio, Concepción 4030000, Chile.

<sup>2</sup>Departamento de Procesos Químicos, Alimentos y Biotecnología, Facultad de Ingenierías y Ciencias Aplicadas, Universidad Técnica de Manabí, Portoviejo, Ecuador.

<sup>3</sup>Laboratorio de Análisis Químicos y Biotecnológicos, Instituto de Investigación, Universidad Técnica de Manabí, Portoviejo, Ecuador.

[jeffrey.cedeno2401@alumnos.ubiobio.cl](mailto:jeffrey.cedeno2401@alumnos.ubiobio.cl)

La presencia persistente de antibióticos del grupo de las tetraciclinas (TCs) en cuerpos de agua favorece la propagación de bacterias multirresistentes y pone en jaque las tecnologías convencionales de tratamiento, como la adsorción en carbones activados, los procesos biológicos inhibidos por la toxicidad de las TCs y los procesos oxidativos avanzados (POA) homogéneos basados en  $\text{H}_2\text{O}_2/\text{UV}$ , limitados por costes y generación de lodos. El objetivo de este trabajo fue desarrollar y evaluar un fotocatalizador híbrido sostenible, Mg-Fe-LDH@HC, capaz de integrar adsorción y fotocatalisis para la remoción de TCs bajo condiciones ambientales.

El soporte carbonoso (HC) se obtuvo de tallos de Zea mays mediante carbonización hidrotermal (190 °C, 24 h, relación sólido/líquido 1:5), múltiples lavados con agua desionizada y secado a 80 °C. Sobre este HC se sintetizó Mg-Fe-LDH por coprecipitación ( $\text{MgCl}_2 + \text{FeCl}_3$ , pH 10, 2 h, 300 rpm); el precipitado se centrifugó, lavó diez veces y se secó (80 °C, 24 h). SEM/EDX evidenció una dispersión homogénea de  $\text{Mg}^{2+}/\text{Fe}^{3+}$  sobre la matriz carbonosa; DRS mostró un band gap indirecto de 1,81 eV con máxima absorción a 408 nm, y el  $\text{pH}_{\text{ZPC}}$  (8,64).

Durante la etapa de preadsorción (0,7 g L<sup>-1</sup> de catalizador, disolución tricomponente OTC/TC/CTC 50  $\mu\text{M}$  cada una, 25 °C, 250 rpm), se alcanzó el equilibrio en 120 min; los datos siguieron la cinética de Elovich y la isoterma de Langmuir, confirmando adsorción monomolecular sobre sitios energéticamente homogéneos. A continuación, la suspensión se irradió con UV-C (254 nm, 15 W) y se dosificaron 8  $\mu\text{M}$  de  $\text{H}_2\text{O}_2$ . El sistema Mg-Fe-LDH@HC +  $\text{H}_2\text{O}_2$  + UV eliminó el 99,09 % de las TCs en 120 min, muy por encima de los procesos individuales realizados bajo idénticas condiciones (UV: 12,16 %;  $\text{H}_2\text{O}_2$ : 21,37 %; LDH@HC adsorción: 51,65 %). Los ensayos con atrapadores ( $\text{AgNO}_3$ , IPA, EDTA-2Na, ácido ascórbico) revelaron que los electrones fotoexcitados y los radicales superóxido son las especies reactivas dominantes.

La estabilidad operacional se probó en cinco ciclos consecutivos: la eficiencia descendió de 96 % a 85 %, pero se recuperó hasta 90 % tras regenerar el material en la solución precursora del LDH, lo que confirma su reutilización con margen de mejora en la durabilidad estructural.

El estudio demuestra que la combinación de hidrochar y LDH Mg-Fe proporciona un sistema fotocatalítico de alta capacidad de adsorción y degradación de tetraciclinas, con un balance óptimo de propiedades estructurales y electrónicas que favorecen la generación de especies reactivas, posicionándolo como una alternativa sostenible y eficiente para el tratamiento de aguas contaminadas por antibióticos emergentes,

## Evaluación de Configuraciones Energéticas Óptimas para Diversos Perfiles de Demanda Usando un Modelo de Optimización

Y. Masip<sup>1</sup>, S. Nuñez<sup>2</sup>, R. Carmona<sup>3</sup>

<sup>1</sup>*Pontificia Universidad Católica de Valparaíso, Escuela de Ingeniería Mecánica, Quilpué, Valparaíso, Chile*

<sup>2</sup>*Pontificia Universidad Católica de Valparaíso, Escuela de Ingeniería Química, Quilpué, Valparaíso, Chile*

<sup>3</sup>*Pontificia Universidad Católica de Valparaíso, PhD Student. Doctorado Industria Inteligente, Escuela de Ingeniería Mecánica, Quilpué, Valparaíso, Chile*

[yunesky.masip@pucv.cl](mailto:yunesky.masip@pucv.cl)

En este trabajo se presenta una metodología de optimización energética basada en escenarios, utilizando el modelo Calliope, para evaluar el desempeño técnico-económico de sistemas híbridos fotovoltaicos con almacenamiento en baterías y conexión a red. A partir de 6.617 perfiles reales de consumo eléctrico proporcionados por una empresa distribuidora, se analizaron cinco configuraciones tecnológicas bajo distintos supuestos de demanda, costos y condiciones regulatorias, incluyendo la implementación de la Ley 21.667. La optimización se realizó mediante perfiles horarios completos, escenarios reducidos obtenidos por técnicas de clustering y modificaciones estocásticas del perfil semanal de consumo. Los resultados muestran que el 81,7% de los perfiles analizados alcanzan un costo nivelado de energía (LCOE) negativo en configuraciones con venta de excedentes y almacenamiento, siendo más favorable para usuarios residenciales y comerciales pequeños. En contraste, los perfiles industriales presentan mayores costos nivelados (hasta 0,25 USD/kWh) cuando operan sin conexión a red, requiriendo capacidades de batería del orden de 300 kW. Además, la variación aleatoria de la demanda puede generar desviaciones de hasta 55% en el LCOE, evidenciando la sensibilidad del sistema ante cambios en el comportamiento del usuario. Estos resultados destacan la relevancia de incorporar la estabilidad de la demanda en el diseño de estrategias energéticas y la importancia de los mecanismos tarifarios y de subsidio para incentivar la adopción de sistemas híbridos. La metodología propuesta ofrece una herramienta replicable para orientar la planificación de generación distribuida y la toma de decisiones regulatorias en función del tipo de usuario y su comportamiento energético.

## Optimización del Reemplazo de Generación Hidroeléctrica por Energías Renovables No Convencionales en la Región del Biobío ante Escenarios de Megasequía

Y. Masip<sup>1</sup>, S. Nuñez<sup>2</sup>, M. Burgos<sup>1</sup>, E. Villazon<sup>1</sup>

<sup>1</sup>*Pontificia Universidad Católica de Valparaíso, Escuela de Ingeniería Mecánica, Quilpué, Valparaíso, Chile*

<sup>2</sup>*Pontificia Universidad Católica de Valparaíso, Escuela de Ingeniería Química, Quilpué, Valparaíso, Chile*

[yunesky.masip@pucv.cl](mailto:yunesky.masip@pucv.cl)

En el contexto actual de cambio climático, Chile enfrenta importantes desafíos energéticos debido a su histórica dependencia de la hidroelectricidad, la cual ha sido severamente afectada por eventos prolongados de megasequía desde el año 2010. Esto ha generado una disminución significativa de los recursos hídricos disponibles para la generación eléctrica en el Sistema Eléctrico Nacional (SEN). Esta situación ha impulsado la necesidad de diversificar la matriz energética mediante la incorporación de fuentes renovables no convencionales (ERNC), como la energía solar fotovoltaica y la eólica con el fin fortalecer la resiliencia del sistema eléctrico nacional ante los fenómenos climatológicos extremos y el cambio climático. En base a esto, el presente trabajo se centra en optimizar, mediante modelos de simulación energética y análisis geoespacial, el reemplazo de generación hidroeléctrica por tecnologías renovables en Chile, basados en un caso de estudio para la región del Biobío. Siendo una de las regiones con más hidro-dependencia para la generación eléctrica acoplada al sistema eléctrico nacional.

El estudio aplica un enfoque cuantitativo mediante la modelación energética de la red eléctrica de la región caso de estudio basados en el modelo Calliope. Se evaluaron tres escenarios de sustitución de generación hidroeléctrica por energías renovables estacionales (solar y eólica) y sistemas de almacenamiento en baterías (BESS) frente a eventos de megasequía. El desarrollo de estos escenarios se apoyó en el uso combinado de herramientas de Sistemas de Información Geográfica (QGIS) y un método que incluye un algoritmo para clasificar y jerarquizar zonas con base a criterios ambientales y técnicos, en las cuales es viable instalar una planta de energía renovable. Estos emplazamientos óptimos cercanos a subestaciones existentes facilitan la conexión al SEN.

Se destaca que, el escenario de resiliencia energética, suple la totalidad de la generación hidroeléctrica actualmente presente en la región estudiada, con una capacidad instalada de aproximadamente 2911 MW. Esta capacidad se reemplaza mediante una combinación estratégica de nuevas plantas solares fotovoltaicas y eólicas, respetando la proporción de generación observada en el escenario base de 11,9% solar y 88,1% eólica. La distribución permite mantener el equilibrio entre ambas fuentes renovables y los sistemas BESS, favoreciendo la complementariedad de sus perfiles de generación y contribuyendo a la continuidad del suministro eléctrico. Los hallazgos del estudio entregan una hoja de ruta técnica y territorial que permite orientar decisiones estratégicas del SEN y fortalecer políticas públicas energéticas ante el contexto de cambio climático.



## **Procesamiento de imágenes de la sedimentación en drenaje ácido como técnica mejorada de caracterización y medición de velocidad de sedimentación**

D. Ambiado<sup>1</sup>, P. Guerra<sup>1</sup>, I. Cornejo<sup>1</sup>

<sup>1</sup>*Departamento de Ingeniería Química y Ambiental, Universidad Técnica Federico Santa María, Avenida Vicuña Mackenna 2929, San Joaquín, Santiago, Chile.*

*diego.ambiado@usm.cl*

Una de las fuentes de contaminación más importantes a los cuerpos de agua es la generación de drenaje ácido de mina. Esta es una solución ácida sulfatada, con altas concentraciones de hierro, aluminio, sólidos totales disueltos y elementos trazas tóxicos. Al encontrarse en un medio acuoso natural afecta los procesos biogeoquímicos y el equilibrio del sistema. La sedimentación es una alternativa de tratamiento no invasiva para el medio ambiente, pero, cuando existe floculación entre las partículas presentes su caracterización se vuelve compleja. Esto motiva la investigación cuyo propósito es caracterizar la sedimentación de las partículas presentes en drenaje ácido y sus gradientes de velocidad a través de la implementación de visión artificial y técnicas asociadas al procesamiento de imágenes.

Se estudiaron 12 condiciones experimentales en duplicado para evaluar cómo afecta la concentración de hierro (baja y alta concentración), el pH (4 y 5) y la interacción hierro – aluminio en la sedimentación (nula, baja y alta concentración). La investigación contó con dos fases: (i) etapa en laboratorio, que consiste en la preparación de los drenajes ácidos, coagulación, floculación y, finalmente, disposición en columnas de sedimentación para ser grabadas; y (ii) etapa de análisis computacional, identificación de la interfase de sedimentación a partir del uso de filtros Haar, ajuste de los datos experimentales a un modelo tipo S, análisis estadístico (a partir de la obtención del coeficiente de determinación, gráfico de correlación y RMSE) y obtención de la velocidad de sedimentación.

Entre los resultados más importantes se observó que a menor pH se obtiene sedimentación más rápida y es consistente con la teoría debido a que los flóculos presentan una mayor estabilidad en el medio. La presencia de aluminio interfirió en la sedimentación y esto puede ser atribuible a las características de sus flóculos (no cristalinos y de menor densidad), los cuales provocar que la interacción con hierro afecte en la formación de complejos insolubles. Aun así, la mayor velocidad de sedimentación se registró en el experimento que poseía alta concentración de hierro con alta concentración de aluminio a pH 4 teniendo una magnitud de 0,936 mm/s. Esto puede indicar que el aumento de la concentración total de sólidos a menor pH puede promover el asentamiento de las partículas independiente del comportamiento del aluminio. En contraste, el experimento con menor velocidad (0,201 mm/s) se registró a las mismas condiciones de concentración y a pH 5. El fenómeno se explica debido a la existencia de mayor interferencia en la trayectoria de las partículas y mayor resistencia hidráulica.

El estudio del comportamiento de la sedimentación de partículas hierro y aluminio en conjunto es de vital importancia en un contexto donde existe gran industria minería, acumulación de desechos sulfurados y escasez de agua debido al cambio climático. De esta misma manera, la investigación entrega una herramienta útil para la identificación continua de una interfase de sedimentación, describiendo el proceso a partir de un procedimiento novedoso que integra diversas técnicas de procesamiento de imágenes y ajuste a un modelo experimental.

## Tilted solar UV radiation estimation and its role in advanced solar water treatment systems

Lisdelys González-Rodríguez<sup>1,2\*</sup>, Basharat Jamil<sup>3</sup>, Mehmet Ali Kallioğlu<sup>4</sup>, Alejandro Cabrera-Reina<sup>5,7</sup>, Aitor Marzo<sup>6,7</sup>, Wirmer García<sup>8,9</sup>, Matías Volke<sup>10</sup> Fabiola Lobos<sup>1</sup> and Agustin Laguarda<sup>11</sup>

<sup>1</sup>Facultad de Ingeniería y Negocios, Universidad de Las Américas, Sede Concepción, Concepción, Chile

<sup>2</sup>Centro de Modelación Ambiental y Dinámica de Sistemas (CEMADIS), Universidad de Las Américas, Santiago, Chile

<sup>3</sup>High Temperature Processes Unit, IMDEA Energy Institute, Av. Ramón de La Sagra, 3, Móstoles, 28935 Madrid, Spain

<sup>4</sup>Besiri OSB Vocational School, Batman University, 72060, Batman, Turkey

<sup>5</sup>Departamento de Ingeniería Química, Universidad de Almería, Ctra. Sacramento s/n, 04120, Almería, Spain

<sup>6</sup>Departamento de Óptica, Universidad de Granada, Granada, España

<sup>7</sup>CIESOL, Joint Centre of the University of Almería-CIEMAT, 04120, Almería, Spain

<sup>8</sup>Programa de Doctorado en Ciencias con Mención en Biodiversidad y Biorecursos, Facultad de Ciencias, Universidad Católica de la Santísima Concepción, Concepción, Chile

<sup>9</sup>Data Observatory Foundation, ANID Technology Center No. DO210001, Santiago, Chile

<sup>10</sup>Facultad de Ingeniería, Universidad de Concepción, Concepción, Chile

<sup>11</sup>Laboratorio de Energía Solar, Facultad de Ingeniería, Universidad de la República (Udelar), Montevideo, 11700 Uruguay

[lgonzalezr@udla.cl](mailto:lgonzalezr@udla.cl)

Information on solar ultraviolet radiation (UVR) on the Earth's surface is essential for fields such as health/materials sciences, and energy. UVR measurements are commonly taken on a horizontal plane, which is also the reference plane for the available database estimates. However, for many applications, such as water treatment, information on UVR in the tilted plane may provide more insightful results. There is a lack of studies in the literature that address the problem of UVR on inclined surfaces. In this study, an isotropic transposition model was used to estimate UVR in tilted surfaces in six different cities along the Chilean territory with potential applications in solar water treatment. In this context, isotropic refers to the diffuse and direct radiation component modeling. In addition, mathematical models were developed to forecast Chilean cities' monthly and yearly optimum tilt angles. We validated the empirical models using the coefficient of determination ( $R^2$ ), root mean square error (RMSE), mean absolute percentage error (MAPE), sum of squared residual errors (SSRE), residual standard error (RSE), and mean bias error (MBE). The efficiency of the solar photo-Fenton process for treating paracetamol-contaminated wastewater using a compound parabolic collector photoreactor tilted at different angles, was evaluated through simulation. The gains increased at the highest latitude were 30.13 % for monthly, 21.05 % for seasonal, and 9.23 % for yearly adjustments. The empirical models developed were found to be highly accurate ( $R^2 \geq 0.81$ ,  $RMSE \leq 0.98^\circ$ ,  $MAPE \leq 2.70\%$ ,  $SSRE \leq 0.01^\circ$ ,  $RSE \leq 0.02^\circ$ , and  $MBE \leq 0.001^\circ$ ). Using the local latitude as the photoreactor tilt angle (the current general design strategy) resulted in lower efficiency ( $m^3$  of wastewater treated per month) than using the optimal tilt angle for the month with the lowest UVR (winter), and the entire year. These results highlight the importance of fine-tuning the photoreactor tilt angle locally and, consequently, the need to develop UVR models that account for this variable.

## Simulación computacional del llenado del *metal-organic framework* UiO-66 con agua líquida.

Gerson Valenzuela<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Departamento de Ingeniería Química, Universidad de La Frontera, Temuco.

*gerson.valenzuela@ufrontera.cl*

**Introducción:** Los metal-organic frameworks (MOFs) son materiales híbridos que presentan gran área superficial, un amplio rango de tamaño de poro y química superficial ajustable. Sus propiedades los han vuelto atractivos en aplicaciones como almacenamiento de gas, adsorción, intercambio iónico, catálisis, entre otras [1]. Los MOFs son sólidos cristalinos constituidos de *clusters* interconectados por *linkers*. En particular el MOF UiO-66, que está constituido de un cluster de  $Zr_6O_4(OH)_4$  y linkers de ácido tereftálico, presenta estabilidad en agua y es térmicamente estable hasta 450 °C [2] siendo un material prometedor para mejorar la adsorción en procesos de separación por membrana. El siguiente estudio reporta la dinámica del llenado con agua líquida del UiO-66 seco usando simulación computacional por dinámica molecular. El estudio y sus resultados son parte del proyecto fondecyt N° 11230774.

**Métodos:** En este proyecto se ha diseñado la metodología para simular celdas unitarias del UiO-66 en contacto con agua líquida usando el software NAMD. El método se encuentra publicado en ref. [3]. Las simulaciones del estudio se desarrollaron en el ensamble NVT a 305 K con 2000 moléculas de agua en contacto con ocho celdas unitarias del UiO-66. El modelo de agua fue el TIP3P, mientras que el UiO-66 se modeló bajo el campo de fuerza de Zhang et al. [4]. La simulación se desarrolló hasta por 30 nanosegundos verificando el llenado del UiO-66. Softwares VMD y MDAnalysis se utilizaron para el análisis de resultados.

**Resultados:** La simulación mostró que el llenado del material requiere 7 nanosegundos para alcanzar una carga estable de agua, de aproximadamente 175 moléculas de agua por celda unitaria del UiO-66. Se identificaron dos sitios de adsorción en el UiO-66, correspondientes a un tipo de oxígeno del linker y un tipo de oxígeno del cluster. Estos forman puentes de hidrógeno (HBs) con las moléculas de agua, siendo predominante el oxígeno dentro del cluster en cuanto a la cantidad de HBs. El sitio metálico del cluster no presenta interacción con el agua. Las moléculas de agua se agrupan preferentemente en el centro de los poros del material, evitando el centro de los clusters y el grupo orgánico de los linkers.

**Conclusiones:** Se ha modelado, por primera vez en NAMD, un proceso de llenado del UiO-66 con agua líquida mediante dinámica molecular. Esta modelación permitió cuantificar la carga de agua dentro del espacio poroso del MOF, así como evaluar el rol de diferentes sitios del material en la adsorción del agua. Esta modelación se puede extender a sistemas con iones u otras moléculas orgánicas, siendo un método efectivo para estudiar el uso de MOFs en procesos de separación por membrana para tratamiento de agua.

## Influencia de la modificación ácida de la zeolita natural chilena en la co-hidropirólisis de biomasa/plástico mediante Py-GC-MS

B. Puentes<sup>1,2</sup>, S. Alejandro<sup>1,2</sup>, L. Azócar<sup>3</sup>

<sup>1</sup>Laboratorio de Cromatografía Gaseosa y Pirólisis Analítica, Universidad del Bío-Bío, Concepción, Chile.

<sup>2</sup>Departamento de Ingeniería de Procesos y Bioproductos, Universidad del Bío-Bío, Concepción, Chile.

<sup>3</sup>Centro de Energía, Universidad Católica de la Santísima Concepción, Concepción, Chile.

*bastian.puentes1601@alumnos.ubiobio.cl*

Las zeolitas son materiales cristalinos microporosos, que se emplean frecuentemente como catalizadores en procesos termoquímicos como la pirólisis, debido a su elevada estabilidad térmica, capacidad de intercambio iónico y la capacidad de ajustar su acidez superficial. La modificación de zeolitas a través de tratamientos con ácidos fuertes permite mejorar sus propiedades catalíticas al incrementar la relación Si/Al, generando sitios ácidos más fuertes y también, favorecer la formación de mesoporos en su estructura. Estas modificaciones estructurales y químicas incrementan la actividad de la zeolita en reacciones de craqueo, deshidratación y aromatización, esenciales en la obtención de compuestos químicos de interés en la pirólisis de biomasa y plásticos. El objetivo de este trabajo fue evaluar la influencia de la modificación ácida de una zeolita natural chilena en la distribución de compuestos químicos obtenidos en la hidro y co-hidropirólisis catalítica de mezclas biomasa/plástico.

Se prepararon catalizadores basados en la modificación de zeolita natural chilena (ZN) con ácido clorhídrico (HCl) al 2,4 M para obtener zeolita modificada con ácido (ZH2.4). Debido a la modificación se disminuyó en un 29,04% el contenido de aluminio en la zeolita natural. Se ha reportado que como resultado del tratamiento ácido ocurre un aumento del área superficial, lográndose generalmente un aumento del volumen total de poros, una remoción del aluminio de la estructura de la zeolita natural, como consecuencia de un proceso de decationización y desaluminización. En la misma línea se tuvo un aumento de la relación Si/Al en la ZH2.4, donde aumentó en un 46,49% con respecto a su contraparte sin modificar. Se realizaron ensayos SEM-EDX para observar la morfología, la distribución de los metales a escala micro, así como para realizar un mapeo elemental de las zeolitas y la homogeneidad en la superficie. En el caso de las zeolitas modificadas se pueden observar pequeños orificios en las superficies de las partículas, las cuales deberían ser el resultado de la modificación con HCl. En el caso de la ZH2.4, se puede observar un orificio de mayor tamaño que pudiera estar relacionado con la disolución de la sílice amorfa en la superficie. Se realizaron ensayos TGA para los diferentes catalizadores, donde se observa una baja pérdida de peso en todas las muestras, la que puede estar asociada a la desorción de moléculas más volátiles, esta pérdida se aprecia en los catalizadores de ZN y ZH2.4. Entre 150-550°C se observa una pérdida progresiva de masa, que se asocia principalmente a la deshidroxilación de los grupos OH estructurales de la zeolita, así como la pérdida de compuestos residuales que pudieron quedar en su superficie. Se reportó una mayor pérdida de masa, la que puede estar dada por una menor estabilidad por parte de la ZN y ZH2.4.

Para estudiar el efecto de estos catalizadores se evaluó su contribución en la hidro y co-hidropirólisis catalítica con biomasa/plástico, y como estos afectaban en la composición de la corriente gaseosa resultante utilizando un sistema de pirólisis analítica (Py-GC/MS). De manera general, se observó una disminución de las principales familias de compuestos oxigenados, y un aumento en el contenido de hidrocarburos aromáticos y alifáticos, los que pueden estar dados por los nuevos sitios activos de Brönsted y Lewis generados en la zeolita modificada. El tratamiento ácido de la zeolita natural chilena permitió mejorar sus propiedades catalíticas, favoreciendo la disminución de compuestos oxigenados y el incremento de hidrocarburos, lo que evidencia la influencia de la modificación ácida en la distribución de productos de la co-hidropirólisis biomasa/plástico.

## Proyecto ZLD (Zero Liquid Discharge): minimización de salmueras en plantas desalinizadoras

H. Valdés<sup>1,2,4</sup>, N. Cancinos<sup>3,4</sup>, S. Tosso<sup>4,5</sup>, C. Mora<sup>4</sup>, A. Saavedra<sup>6</sup>

<sup>1</sup>*Departamento de Computación e Industrias, Facultad de Ciencias de la Ingeniería, Universidad Católica del Maule, Talca, Chile. [hvaldes@ucm.cl](mailto:hvaldes@ucm.cl)*

<sup>2</sup>*Centro de Innovación en Ingeniería Aplicada (CIIA), Facultad de Ciencias de la Ingeniería, Universidad Católica del Maule, Talca, Chile*

<sup>3</sup>*Escuela de Ingeniería Civil industrial, Facultad de Ciencias de la Ingeniería, Universidad Católica del Maule, Talca, Chile.*

<sup>4</sup>*Circular and Sustainable Engineering Systems Group (CISES), Facultad de Ciencias de la Ingeniería, Universidad Católica del Maule, Talca, Chile.*

<sup>5</sup>*Programa de Doctorado en Ingeniería, Facultad de Ciencias de la Ingeniería, Universidad Católica del Maule, Talca, Chile.*

<sup>6</sup>*Departamento de Ingeniería Química y Bioprocesos, Universidad de Santiago de Chile, Estación Central, Chile.*

La desalinización de agua de mar es un proceso de flujo en el cual se generan el líquido purificado (permeado) y el rechazo salino (salmuera) que se descarga continuamente. El rechazo concentrará los solutos (predominantemente sales) literalmente duplicando el contenido salino del agua de alimentación. Esta situación provoca impactos ambientales que están siendo actualmente abordados, mediante la minimización de los volúmenes de salmueras y también procesando tales concentrados bajo el concepto de “minería de rechazos”. Sobre esta base, se está desarrollando el proyecto ZLD que se ha planteado como objetivo minimizar al máximo la cantidad de salmuera integrando dos procesos en serie. En primer lugar, el concentrado proveniente de la osmosis inversa se procesa empleando destilación por membranas lo que permite recuperar una mayor cantidad de agua permeada, incrementando la concentración de los componentes en el flujo residual. Posteriormente, se incorpora una etapa de cristalización por membrana, donde no sólo se obtiene más agua permeada, sino que también se genera un líquido ultra concentrado en solutos los que pueden cristalizar de manera total o diferenciada, facilita la recuperación de minerales de interés. Este proyecto, que propende a la minimización o eliminación total de salmueras, se distingue por el uso de dos tecnologías emergentes. El módulo de destilación por membrana tiene una configuración innovadora en el mercado de módulos de membranas debido a que su diseño fluidodinámico le permite incrementar las velocidades de permeación del evaporado, y ha sido diseñado y fabricado en dependencias de la Universidad Católica del Maule. Para la segunda etapa, se plantea utilizar una membrana de óxido de grafeno, polímero emergente que presenta aún desafíos por resolver para una aplicación efectiva y estable en estos procesos. Esta investigación representa los primeros pasos en la valorización económica de los concentrados provenientes de plantas desalinizadoras. Algunos resultados experimentales preliminares demuestran la factibilidad de la tecnología, alcanzando flujos de permeado entre 2 y 4 kg/m<sup>2</sup>h, estimándose que puedan incrementarse en cerca de 10 veces sobre la base de procesar a menores presiones, mayores temperaturas y velocidades de flujo de las muestras de concentrados.

## Producción *mejorada* de hidrocarburos aromáticos (BTX) mediante co-hidropirólisis biomasa-plástico sobre un catalizador Ni/MOF-derivado

C. Romero-Unda<sup>1</sup>, K. Fernández-Andrade<sup>1</sup>, S. Alejandro-Martín<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Laboratorio de Cromatografía Gaseosa y Pirólisis Analítica (LCGPA), Univ. del Bío-Bío, Concepción, Chile.

[carlos.romero1701@alumnos.ubiobio.cl](mailto:carlos.romero1701@alumnos.ubiobio.cl)

La co-hidropirólisis catalítica se postula como una vía de alto potencial para la generación de químicos finos a través de la valorización de residuos plásticos y lignocelulósicos. Los catalizadores derivados de estructuras metal-orgánicas (MOF) ostentan el potencial de mejorar la selectividad hacia arenos debido a la alta dispersión de los nodos metálicos en su superficie, lo que favorece las reacciones de aromatización. En este estudio, se investiga el impacto del níquel soportado en carbo-alúmina ( $\text{Ni/C-Al}_2\text{O}_3$ ) en la selectividad a compuestos aromáticos (benceno, tolueno y xileno(s)) obtenidos mediante co-hidropirólisis de biomasa/plástico. El MIL-53(Al) se termolizó a  $800^\circ\text{C}$  para producir la matriz carbonosa ( $\text{C-Al}_2\text{O}_3$ ) y luego se impregnó con un 15 %m/m Ni por humedad incipiente. Se emplearon XRD, SEM-EDX, TEM, TPD- $\text{NH}_3$  y Fisisorción- $\text{N}_2$  para caracterizar los catalizadores. Los ensayos de co-hidropirólisis se realizaron a  $550^\circ\text{C}/150$  psi  $\text{H}_2$  en un sistema Py-GC/MS (CDS5200 - Clarus689/SQ-8T), combinando madera de Roble Chileno (*Nothofagus obliqua*), polietileno de alta densidad (HDPE) y baja densidad (LDPE). La formación de alúmina amorfa y la presencia de  $\text{Ni}^0$  se confirmaron mediante los patrones de XRD y micrografías SEM-EDX (dispersión superficial uniforme). Debido a la descomposición orgánica, la carbo-alúmina presentó un área superficial menor y un tamaño de poro mayor en comparación con su precursor. La impregnación metálica no tuvo un impacto significativo en las propiedades texturales, aunque sí en las químicas (redistribución sitios ácidos en superficie). Como resultado, el  $\text{Ni/C-Al}_2\text{O}_3$  demostró ser eficaz en las reacciones de hidrodesoxigenación/aromatización, lo que condujo a la reducción de los compuestos oxigenados (1% total en muestra) y un aumento notable de los hidrocarburos aromáticos (72% en muestra). En resumen, la ruta térmica empleada proporcionó un catalizador novel, activo en la co-hidropirólisis de biomasa/plástico. La adición de níquel resultó vital en la aromatización de las especies, abriendo una nueva ruta para la obtención de químicos finos y/o combustibles sostenibles.



## **Evaluación ambiental de la producción de combustible de aviación a partir de residuos de plástico**

**Yannay Casas-Ledón<sup>1,2</sup>, Juan Parra<sup>3</sup>, Sebastián Larrere<sup>1,3</sup>, Cristina Segura<sup>3</sup>**

<sup>1</sup>*Departamento de Ingeniería Ambiental, Facultad de Ciencias Ambientales-Centro EULA, Universidad de Concepción, Concepción, Chile. [ycasas@udec.cl](mailto:ycasas@udec.cl)*

<sup>2</sup>*Centro de Recursos Hídrico para la Agricultura y la Minería (CRHIAM), ANID Fondap, Victoria 1295, Concepción 4070411, Chile.*

<sup>3</sup>*Unidad de Desarrollo Tecnológico-UDT, Universidad de Concepción, Cordillera 2634, Coronel, 4191996, Chile*

El uso masivo de plásticos, especialmente derivados de fuentes fósiles, ha generado una alarmante acumulación de residuos que afectan gravemente a los ecosistemas terrestres y acuáticos. Los métodos tradicionales de gestión de estos residuos, como la incineración y el vertido, presentan importantes impactos ambientales. Frente a esta problemática, la economía circular plantea soluciones sostenibles como la valorización energética a través de procesos como la pirólisis, permitiendo transformar los desechos plásticos en nuevos recursos, reduciendo así la dependencia de materias primas vírgenes y disminuyendo la contaminación. En este sentido, este estudio evalúa ambientalmente la valorización de residuos plásticos mediante pirólisis para producir combustibles de aviación, aplicando análisis de ciclo de vida (ACV). Se utilizó el método ReCiPe v2016 (midpoint y endpoint), bajo la perspectiva jerárquica, y los escenarios fueron simulados en SimaPro. El presente estudio compara diferentes escenarios para la producción de combustibles de aviación mediante la pirólisis de varios plásticos residuales y mezclas entre ellos, como son polipropileno (PP), polietileno de baja densidad (LDPE). Para evaluar el impacto ambiental se ha seleccionado como unidad funcional 1 MJ de combustible producido y los límites del sistema abarcan desde “de la cuna a la puerta”, es decir desde que se transporta el plástico residual hasta que se produce el combustible de aviación.

El análisis ambiental comparativo de los distintos escenarios de valorización de residuos plásticos demuestra que el escenario con 100% de polipropileno (PP) presenta el menor impacto ambiental total. Este desempeño se explica principalmente por su alto rendimiento en la producción de combustible de aviación, alcanzando un 45% frente al 20,4% del escenario con 100%LDPE. Adicionalmente, se observa que las mezclas de plásticos generan mayores impactos ambientales. La sustitución del combustible pesado por diésel convencional genera beneficios ambientales en todas las categorías evaluadas, especialmente en aquellos escenarios con mayor rendimiento de combustible pesado como el 100% LDPE y 70% PP–30% LDPE. No obstante, los rendimientos de la pirólisis y la refinación constituyen factores determinantes en el perfil ambiental total.

Las etapas más críticas en términos de impacto ambiental son la generación de electricidad, la producción de hidrógeno, el transporte y la pirólisis, mientras que la refinación puede generar beneficios ambientales significativos al sustituir diésel convencional. La electricidad, debido a la matriz energética fósil de Chile, domina en la mayoría de las categorías de impacto, especialmente en calentamiento global y consumo de agua. Los resultados evidencian que la valorización de residuos plásticos constituye una alternativa competitiva para la producción de combustibles de aviación, con emisiones de gases efecto invernadero comparable o inferior a rutas de origen fósiles y otras renovables.

Agradecimientos: Los autores agradecen a la Agencia Nacional de Investigación y Desarrollo (ANID), proyectos ANID/FONDEF/ID23I10321 y ANID/FONDAP/1523A0001.

## A DFT Study of the Effect of Light Olefins on $\text{In}_2\text{O}_3$ in the Direct Conversion of $\text{H}_2$ and $\text{CO}_2$ to Hydrocarbons

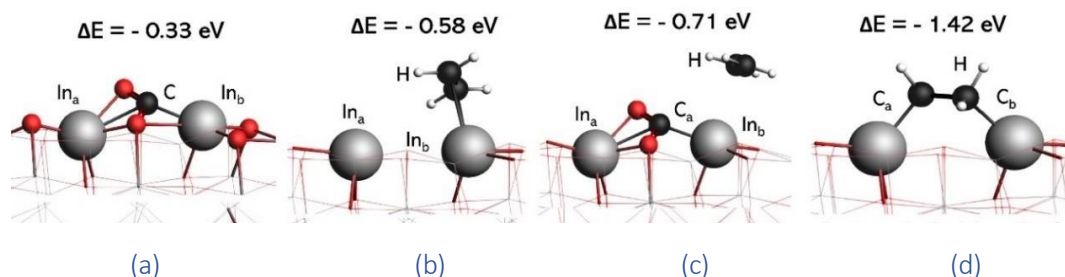
P. Tapia<sup>1</sup>, B. Sanhueza<sup>1</sup>, T. Sandoval<sup>1</sup>, I. Cornejo<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Departamento de Ingeniería Química y Ambiental, Universidad Técnica Federico Santa María, Chile.

pedro.tapiav@sansano.usm.cl

The growing interest in green hydrogen-based technologies has driven research into methanol synthesis from  $\text{CO}_2$  hydrogenation. However, its low conversion rate limits the economic competitiveness of the process. The combination of this synthesis with methanol-to-hydrocarbons (MTH) conversion via bifunctional catalysis enables the direct production of gasoline in a single reactor, promoting higher conversions and competitiveness at the expense of selectivity [1]. Despite experimental advances, significant gaps remain in understanding how the synergy between catalysts and intermediates influences product selectivity. Bridging this gap through deeper theoretical insights is essential for the rational design of more efficient bifunctional catalysts. In particular, olefins are of interest as intermediates prone to hydrogenation that are key to hydrocarbon synthesis; if hydrogenated prematurely, gasoline production becomes unfeasible [2].

This work investigates, through density functional theory (DFT), the effect of ethylene ( $\text{C}_2\text{H}_4$ ) on the hydrogenation of  $\text{CO}_2$  over the c- $\text{In}_2\text{O}_3$ (110) surface, a catalyst for methanol synthesis. Calculations were performed with AMS BAND using the PBE-D3(BJ) functional, employing a slab with 48 O atoms and 32 In atoms distributed over four layers. The bottom two layers were kept fixed, while the top two were relaxed to analyze the interaction. Adsorption energy calculations reveal a strong interaction between ethylene and the surface, with ethylene competing with  $\text{CO}_2$  for active sites. Its physisorption, both alone and with pre-adsorbed  $\text{CO}_2$  (Figures 1.b and 1.c), is more favorable than  $\text{CO}_2$  alone (Figure 1.a). Moreover, the chemisorption of ethylene (Figure 1.d) is even more stable than the previous cases; in this configuration, the ethylene double bond is activated, promoting its subsequent hydrogenation. This competition between  $\text{CO}_2$  and ethylene for hydrogenation may alter the reaction mechanisms previously proposed by other authors [3], and reduce the selectivity toward long-chain hydrocarbons due to premature olefin hydrogenation. The results offer a previously unreported theoretical basis for ethylene-surface interaction, helping to explain experimental observations and opening new avenues for studying bifunctional catalysis and reaction mechanism interference.



**Figure 1.** Adsorption energies and side views of optimized structures of  $\text{C}_2\text{H}_4$  and  $\text{CO}_2$  on the c- $\text{In}_2\text{O}_3$ (110) surface: (a) adsorbed  $\text{CO}_2$ , (b) physisorbed  $\text{C}_2\text{H}_4$ , (c) co-adsorbed  $\text{C}_2\text{H}_4$  and  $\text{CO}_2$ , and (d) chemisorbed  $\text{C}_2\text{H}_4$ .

## Techno-Economic Assessment of e-Gasoline Production from Green Hydrogen and CO<sub>2</sub>

F. Boggioni<sup>1</sup>, I. Cornejo<sup>1</sup>, D. Navia<sup>1</sup>, O. Silva<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Departamento de Ingeniería Química y Ambiental Universidad Técnica Federico Santa María, Chile.  
fabrizio.boggioni@usm.cl

The production of e-gasoline from green H<sub>2</sub> and captured CO<sub>2</sub> has gained significant attention in recent years, due to its potential to replace conventional gasoline with a carbon-neutral or carbon-reduced alternative that can be integrated into the already existing fuel infrastructure for its use in light-duty vehicles as a drop-in alternative. E-gasoline from H<sub>2</sub> and CO<sub>2</sub> can be produced via multiple routes, each influenced by different trade-offs. This study presents a techno-economic assessment of nine direct (via H<sub>2</sub> and CO<sub>2</sub> or syngas) and indirect (via methanol or DME intermediaries) e-gasoline production pathways, based on processes described in recent literature and present in the industry [1]. A superstructure-based optimization model was developed to identify the most cost-effective process configuration based on the minimization of the levelized cost of gasoline (LCOG), with a 3 USD/kg H<sub>2</sub> and 0.25 USD/kg CO<sub>2</sub> feed cost and a 20-year operation cycle.

All routes were simulated using Aspen Plus V14, incorporating reactor design based on kinetic models. The analysis included CAPEX and OPEX cost estimations, and a sensitivity analysis to assess the influence of raw material costs and production scale respectively was also included.

Results show that the RWGS–MeOH–MTG pathway is the most competitive, achieving a LCOG of 2.34 USD/l, approximately 5% lower than the conventional MeOH–MTG route. The improved performance is attributed to the inclusion of a Reverse Water-Gas Shift (RWGS) step, which generates syngas and allows for downsized and less expensive downstream units, while at the same time increasing methanol generation [2]. Uncertainty analysis revealed that green H<sub>2</sub> is the main cost driver, and under optimistic assumptions, the LCOG could drop to 0.99 USD/l, making synthetic gasoline price-competitive with fossil fuels. The sensitivity analysis also demonstrates that scaling up production results in modest cost reductions due to economies of scale. A tenfold increase in output leads to a decrease up to 8% in LCOG, reinforcing the idea that efforts must be focused on reducing raw material costs. The RWGS–MeOH–MTG route consistently outperforms other pathways across these scenarios, positioning it as a promising candidate for future industrial implementation.

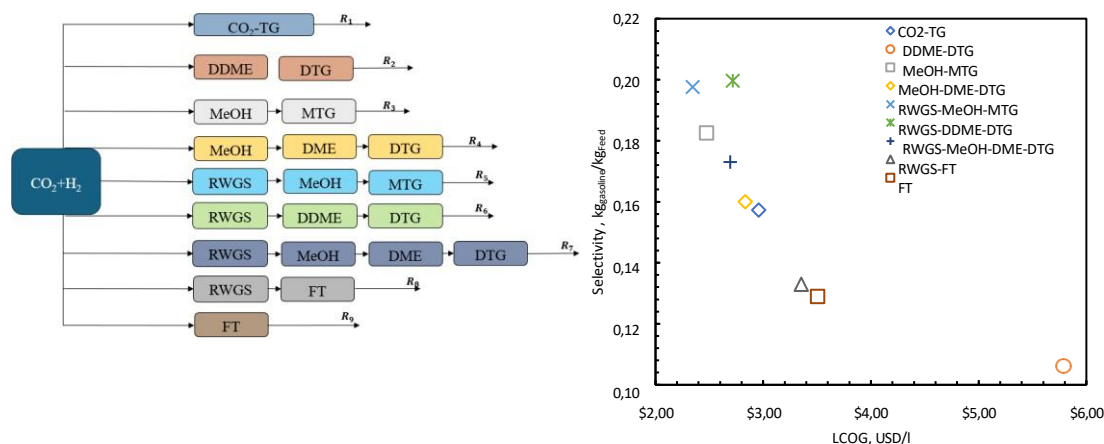


Figure 1: Scheme of the nine routes evaluated and LCOG for each of the nine routes studied.

## **Estimación espacio-temporal del aporte de biomasa residencial al MP2.5: Desarrollo y validación de una nueva metodología**

C. Estuardo Norambuena<sup>1,2</sup>, H. Jorquera<sup>1,2</sup>

<sup>1</sup> *Departamento de Ingeniería Química y Bioprocesos, Pontificia Universidad Católica de Chile, Avda. Vicuña Mackenna 4860, Santiago, 7820436, Chile*

<sup>2</sup> *Centro de Desarrollo Urbano Sustentable (CEDEUS), Los Navegantes 1963, Providencia, Santiago, 7520246, Chile*

*caestuardo@uc.cl*

Uno de los principales desafíos en la gestión de la calidad del aire es la cuantificación precisa de las fuentes emisoras de material particulado fino (MP<sub>2.5</sub>), dada su alta relevancia para la salud pública. La exposición a MP<sub>2.5</sub> se asocia con enfermedades respiratorias, hospitalizaciones e incluso mortalidad prematura. Entre sus fuentes más relevantes se encuentran el transporte, el uso de combustibles industriales y, en el caso de Chile, el uso residencial de leña, especialmente desde la VI Región hacia el sur del país.

La principal dificultad en el análisis y modelación del MP<sub>2.5</sub> es la incertidumbre en el aporte cuantitativo de cada una de esas fuentes de emisión a la concentración de MP<sub>2.5</sub> medida en algún sitio de monitoreo. Si bien en muchas zonas urbanas se cuenta con inventarios de emisiones atmosféricas, éstos suelen tener datos poco precisos, con una incertidumbre para la biomasa que puede superar el 50%, debido a la gran heterogeneidad en demanda (calidad de la vivienda), tecnología de combustión del calefactor y modo de operación de cada equipo. La alternativa clásica para estimar emisiones es aplicar modelos de reparto de fuentes (receptor models), pero éstos requieren conocer la composición química del MP<sub>2.5</sub>, lo cual es costoso de implementar e inviable si no hay muestras históricas almacenadas en filtros. Luego, existe una brecha de conocimiento respecto a los aportes históricos de las emisiones de consumo de leña al MP<sub>2.5</sub> en ciudades chilenas. Este trabajo propone una metodología alternativa basada en el algoritmo FUSTA (Fuzzy SpatioTemporal Apportionment), que permite identificar patrones temporales en las concentraciones de MP<sub>2.5</sub> a partir de técnicas de agrupamiento difuso. Aunque FUSTA ha sido aplicado a gases industriales como el SO<sub>2</sub>, no se había utilizado para estimar el aporte de la combustión de leña al MP<sub>2.5</sub>. Los clústeres difusos asignan una probabilidad de que un determinado punto (concentración) pertenezca a un determinado grupo (fuente), basándose en el conjunto de los parámetros que la acompañan (en este caso PM<sub>10</sub> y meteorología). Así FUSTA, asume los diversos grupos como fuentes que aportan a un contaminante, separando una concentración en función de la probabilidad de pertenecer a un determinado grupo.

En este estudio, se aplicó FUSTA a datos de concentración de MP<sub>2.5</sub> e información meteorológica provenientes del Sistema Nacional de Calidad del Aire (SINCA) para las ciudades de Temuco y Santiago (Chile). Se utilizaron datos entre el 2013-2022 para ambas ciudades. Por primera vez, se logró separar el aporte específico de la combustión de leña a las concentraciones de MP<sub>2.5</sub> a largo plazo, sin necesidad de inventarios de emisiones ni datos de composición química de modelos de receptor. Para la validación de los resultados se utilizaron campañas de modelo receptor previas realizadas en las ciudades estudiadas y publicadas anteriormente.

Los resultados obtenidos permiten no solo cuantificar dicho aporte, sino también realizar un seguimiento temporal del impacto de este sector, lo que hasta ahora no era posible. Esta herramienta ofrece un insumo robusto y novedoso para la evaluación y monitoreo de políticas públicas orientadas a la reducción de emisiones por combustión residencial de biomasa.

## **Evaluación de la remoción de cobre a partir de proceso MICP fotosintético de la microalga *Chlorella Vulgaris***

J. San Martín<sup>1</sup>, A. Kusianovich<sup>1</sup>, R. Soto-Ramírez<sup>1</sup>, A. Torres-Aravena<sup>1</sup>

<sup>1</sup>*Escuela de Ingeniería Bioquímica, Facultad de Ingeniería, Pontificia Universidad Católica de Valparaíso, Valparaíso 2362803, Chile*

*alvaro.torres@pucv.cl*

La contaminación por cobre (Cu) representa una preocupación creciente a nivel mundial debido a su toxicidad y capacidad de bioacumulación. En Chile, esta problemática se ve intensificada por la actividad minera y el uso extensivo de agroquímicos, lo que ha generado una contaminación significativa de ecosistemas acuáticos y suelos. Este trabajo propone una estrategia biológica para la remoción de cobre, basada en la precipitación de carbonatos inducida por microorganismos fotosintéticos (MICP) utilizando la microalga *Chlorella vulgaris*. En este sentido, La hipótesis plantea que la actividad fotosintética de *C. vulgaris*, mediada por la enzima anhidrasa carbónica, incrementa el pH del medio y, junto con los sitios de nucleación presentes en la superficie celular, favorece la formación y precipitación de carbonatos de cobre. Los objetivos del estudio fueron: (i) definir las condiciones óptimas de pH y concentración de Cu para los ensayos de MICP; (ii) evaluar la eficiencia de remoción de cobre mediante precipitación de carbonatos; (iii) determinar la capacidad de adsorción de cobre de *C. vulgaris*. La metodología experimental incluyó el cultivo y preparación de biomasa viva de *C. vulgaris*, la modelación de la especiación del cobre mediante el software Visual MINTEQ®, y la realización de ensayos batch para cuantificar la precipitación de carbonatos y la remoción del metal. Los resultados de simulación mostraron que es posible precipitar cobre como malaquita y azurita principalmente aun rango de pH de 6-8. Los resultados muestran que es posible remover cobre desde un 30 a 60% considerando concentraciones del metal de 0,5 a 50mM. Finalmente se demostró que el efecto de la adsorción del metal es significativo a concentraciones muy bajas (0,05mM), siendo entonces el principal responsable de la precipitación de cobre la actividad carbono-anhidrasa.



## **Estudio de la cinética de formación de compuestos plataforma durante la Hidropirólisis Catalítica de Roble Chileno (*Nothofagus obliqua*)**

Romina Vivallo Valenzuela<sup>1,2</sup>, Kevin Fernández Andrade<sup>1,2</sup>, Serguei Alejandro- Martín<sup>1,2</sup>

<sup>1</sup> Laboratorio de Cromatografía Gaseosa y Pirólisis Analítica, Universidad del Bío-Bío, Concepción - Chile

<sup>2</sup> Departamento de Ingeniería de Procesos y Bioproductos, Facultad de Ingeniería, Universidad del Bío-Bío, Concepción 4030000, Chile

*ravivallo@ubiobio.cl*

Frente a los desafíos energéticos actuales y como un esfuerzo por avanzar hacia soluciones energéticas sostenibles este estudio se centra en la hidropirólisis catalítica de Roble Chileno (*Nothofagus obliqua*) utilizando zeolita natural como catalizador. La motivación principal ha sido la exploración y mejora de la producción de biocombustibles a partir de la biomasa, superando las limitaciones de la inestabilidad de los productos o el bajo poder calorífico generado por métodos convencionales de pirólisis.

Para responder esta necesidad, se adoptó un enfoque científico que combina la caracterización experimental de los catalizadores, así como el análisis cinético avanzado de la descomposición de la biomasa. Se caracterizaron los catalizadores por medio de técnicas (Análisis Fisisorción N<sub>2</sub>, TEM, XRD y SEM-EDX) y se aplicó un modelo cinético de una sola etapa para evaluar la conversión de la biomasa en compuestos químicos útiles a diferentes temperaturas (450, 500 y 550 °C). Este enfoque permitió una comparación entre la hidropirólisis (catalítica y no catalítica) y la propuesta de esquemas de reacción para compuestos plataforma.

Los experimentos revelaron una influencia significativa de los catalizadores en la reducción de la energía de activación para la descomposición de la biomasa. Se encontraron diferencias notables en las energías de activación para la formación de compuestos fenólicos utilizando los catalizadores (15,49 kJ·mol<sup>-1</sup>, 24,75 kJ·mol<sup>-1</sup> y 14,20 kJ·mol<sup>-1</sup>) en comparación con la biomasa sin catalizador, percibiendo una tendencia en términos del modelo de las funciones de conversión del tipo Avrami-Erofeev (A2) y Power Law (P2) para experimentos de hidropirólisis no catalítica y catalítica, respectivamente. Además, se observó una consistencia en la formación de los compuestos fenólicos a partir de temperaturas de 500°C, sugiriendo requerimientos energéticos específicos para las reacciones catalíticas.

La propuesta del mecanismo de reacción representó las diversas rutas de descomposición de los compuestos de la biomasa y sus polímeros constituyentes. La identificación de los pasos claves que conducen la formación de productos plataforma en específicos proporciona una herramienta para optimizar las condiciones de operación y maximizar la producción de productos deseados. Los resultados obtenidos sugieren la incorporación de la zeolita natural como catalizador en la hidropirólisis catalítica y se destaca como un avance crucial para la conversión de la calidad de los bio-combustibles. La notable disminución en la energía de activación con el uso de catalizadores abre nuevas posibilidades para la optimización de la producción de estos líquidos pirolíticos. Este avance no solo realza el estudio cinético de la descomposición de la biomasa en presencia y ausencia de catalizadores en el proceso, sino que aporta valiosas perspectivas para futuras investigaciones en línea de la investigación de la hidropirólisis catalítica.



## Optimization of the Acrylonitrile Production Process via Bifunctional Reaction

V. Gutiérrez<sup>1</sup>, C. Reinao<sup>1</sup>, R. Castillo<sup>2</sup>, I. Cornejo<sup>1</sup>

<sup>1</sup>*Departamento de Ingeniería Química y Ambiental, Universidad Técnica Federico Santa María, Chile.*

<sup>2</sup>*Facultad de Química y de Farmacia, Pontificia Universidad Católica de Chile, Chile  
victoria.gutierrez@usm.cl*

Green hydrogen plays a key role in industrial decarbonization, particularly as a feedstock for high-demand chemicals such as ammonia. However, the Haber-Bosch process used for synthesizing it achieves low single-pass  $H_2$  conversion (15-30%) due to thermodynamic limitations, requiring high pressures and significant recirculation. One strategy to improve hydrogen utilization is to couple ammonia synthesis with a secondary reaction that consumes  $NH_3$  in situ, shifting the equilibrium. Acrylonitrile (ACN), a precursor for plastics, and carbon fibers, is produced via ammoxidation of propylene with  $NH_3$  and  $O_2$ , making it well-suited for coupling with ammonia synthesis. This work evaluates the feasibility of integrating ammonia synthesis and acrylonitrile production to enhance hydrogen utilization.

Two process routes for ACN production were simulated in Aspen Plus V14 using kinetic models for ammonia and ACN synthesis from the literature [1, 2]: a conventional indirect route (sequential  $NH_3$  synthesis and ammoxidation), and a proposed bifunctional route where both reactions occur in a single reactor. The indirect process uses three adiabatic reactors with intermediate cooling and separation, followed by an isothermal ammoxidation reactor at 2 bar and 300-500 °C, aligned with industrial processes. At 500 °C, it achieved 80%  $C_3H_6$  conversion (GHSV:  $1011\ h^{-1}$ ). The bifunctional reactor, fed with  $H_2$ ,  $N_2$ ,  $C_3H_6$ , and  $O_2$  under the same conditions, reached 74% conversion (GHSV:  $1273\ h^{-1}$ ). In both cases, conversion increased markedly with temperature and slightly with pressure. Despite its simpler design and lower pressure requirements, the bifunctional configuration achieves results comparable to the conventional route. This integration reduces equipment count, simplifies operation, lowers energy consumption, and improves overall hydrogen utilization efficiency. These results highlight the potential of bifunctional reactors to enhance green hydrogen valorization in industrial processes.

## Desafíos en la construcción del inventario de huella hídrica para la generación eléctrica en Chile

Mabel Vega-Coloma<sup>1\*</sup>, Tomás Oñate<sup>2</sup>

<sup>1</sup> *Departamento de Ingeniería de Procesos y Bioproductos, Facultad de Ingeniería, Universidad del Bío-Bío, Av. Collao 1202, Concepción.*

<sup>2</sup> *Departamento de Ingeniería Química, Facultad de Ingeniería, Universidad de Concepción, Edmundo Larenas s/n, Concepción.*

*\*mvega@ubiobio.cl*

Este trabajo tiene como propósito reportar los primeros resultados de la cuantificación del consumo de agua en el ciclo de vida de la generación eléctrica en Chile, con el objetivo de proporcionar información sólida para la toma de decisiones en la materia. El uso de agua depende estrechamente de su disponibilidad, la cual ha mermado por las continuas sequías asociadas al cambio climático. La escasez hídrica actual obliga a la competencia entre el consumo humano y productivos, en especial en sectores de alto crecimiento como la electricidad. En efecto, se espera que al año 2050 la demanda de electricidad aumente en torno a un 70%, donde las fuentes renovables tendrían un aporte sobre el 80%. Sin embargo, todas las tecnologías son dependientes del agua, sitio-específicas y altamente dispares. En efecto, en literatura se ha reportado que estos consumos están relacionados con el tipo de tecnología de generación y las prácticas propias de cada país donde se imponen restricciones ambientales, tecnológicas, económicas y sociales. En Chile a la fecha no se ha abordado esta problemática, brecha que el presente estudio aspira a cubrir proveyendo información basada en fuentes primarias, sobre los consumos directos e indirectos de las centrales solares fotovoltaicas (FV), eólicas, carbón y gas natural usando el enfoque de ciclo de vida (ISO 14.046:2014) con un alcance de la cuna a la puerta. Los datos fueron obtenidos principalmente de fuentes abiertas gubernamentales y se organizaron según etapas: directas e indirectas, además de segregarlos por tecnología y ubicación geográfica, reconociendo la relevancia de cada variable.

Los resultados parciales muestran que las centrales solares FV son las que en promedio consumen menos agua (85 m<sup>3</sup>/GWh) seguidas de las eólicas (141 m<sup>3</sup>/GWh). En el otro extremo se ubican las centrales a carbón (16.310 m<sup>3</sup>/GWh) seguidas del gas natural (10.201 m<sup>3</sup>/GWh). Sin embargo, estos promedios están asociados a una dispersión amplia, que iguala o supera el valor promedio, por lo que es necesario realizar análisis estadísticos para su adecuada interpretación. Por otro lado, la etapa del ciclo de vida que más consume agua en las centrales FV es la extracción y fabricación de materiales de construcción y soportes (41%), en las eólicas es la extracción de materiales y fabricación de aerogeneradores (50%), en las centrales a carbón es la extracción del combustible (96%), y en las centrales a gas corresponde a las etapas de construcción y operación (93%).

Estos resultados son altamente dependientes de la calidad de los datos entregados en los proyectos sometidos a evaluación ambiental, para la cual en muchas ocasiones es necesario recurrir a datos estándar, promedios del sector o dejar algunos consumos sin información. Este hallazgo obliga a mirar en detalle los contenidos de las Declaraciones y Estudios de Impacto Ambiental, los cuales no están armonizados, y la calidad de la información entregada queda a discreción del titular del proyecto. No obstante, se espera que con estos resultados se releve la necesidad de estandarizar los antecedentes cuantitativos que requiere el Sistema de Evaluación Ambiental (SEA), para así contar con una fuente de información estándar que permita la obtención de resultados fiables para la promoción de prácticas integralmente más sustentables. Asimismo, estos resultados permiten la construcción de antecedentes cuantitativos para planificar estratégicamente el uso del recurso hídrico para el sector eléctrico nacional.

## Explaining the influence of nanopore size distribution on the advantageous hydrogen to carbon dioxide selectivity across silica-based membranes

Guozhao Ji<sup>1</sup>, G. Olguín<sup>2</sup>

<sup>1</sup>Key Laboratory of Industrial Ecology and Environmental Engineering, School of Environmental Science & Technology, Dalian University of Technology, Dalian, 116024, China.

<sup>2</sup>Escuela de Ingeniería Química, Facultad de Ingeniería, Pontificia Universidad Católica de Valparaíso, Avenida Brasil 2162, Valparaíso, Chile.

*gianni.olguin@pucv.cl*

Hydrogen purification is a key factor for enhanced energy applications, including fuel cell technology. Membranes are used to separate hydrogen generated via thermochemical reactions both in-situ as per in membrane reactors or separately in two steps reactor-separator. In membrane reactors, they can significantly improve hydrogen production, reaching values even higher than equilibrium threshold via Le Chatelier's principle, also enriching hydrogen purity. Silica based membranes are widely used in separating H<sub>2</sub> and CO<sub>2</sub> at high temperatures due to the elevated difference between permeabilities. H<sub>2</sub> permeance across nanoporous silica-based membranes increases with temperature, while carbon dioxide permeance decreases, due to the opposite signs of activation energies for H<sub>2</sub> and CO<sub>2</sub> permeation. However, there has not been a precise explanation of the diverging permeance between H<sub>2</sub> and CO<sub>2</sub> with temperature. This study developed a gas permeation model encompassing different mechanisms: activated transport through nanopores, Knudsen diffusion and viscous flow for meso and macropores. The nanoporous structure of silica matrix was simulated by screening all possible pore size distributions (PSD) based on a combination of silica ring of different sizes. The gas permeation was then calculated via Oscillator model with an effective medium approach. By using real permeation data from different authors, the model was subsequently validated.

The preliminary results indicate that no PSD could allow positive activation energy for hydrogen and negative activation energy for carbon dioxide at the same time. After including Knudsen diffusion and viscous flow, the diverging permeance between H<sub>2</sub> and CO<sub>2</sub> with temperature was successfully interpreted. The PSD in nanopore range and the fractional contribution from Knudsen diffusion and viscous flow, which could best fit experimental activation energies for H<sub>2</sub> and CO<sub>2</sub> permeation, were identified. According to this, 5-membered rings were the dominant nanopore structure, which was responsible for the positive apparent activation energy for H<sub>2</sub>. The negative CO<sub>2</sub> apparent activation energy indicated that it was inevitable to have some Knudsen diffusion and viscous flow through some imperfections of the membrane. Our model reinforced the relevance of nanopores in determining high selectivity for small gas molecules such as H<sub>2</sub> and He. Also, it demonstrated the importance of high temperature in gas separation, as high temperature could minimize the undesirable gas flow through imperfections. The robust fit of the proposed model with empirical results is certainly promising, offering an alternative to accurately predict permeation values in advanced, which may help future nanoporous material development for gas separation.

## **Estudio de prefactibilidad técnico-económica del uso de cenizas volantes como mejorador del proceso de digestión anaerobia de aguas residuales de la industria vitivinícola**

M. Naipayan<sup>1</sup>, C. Huiliñir<sup>2</sup>, D. Jeison<sup>3</sup>

<sup>1</sup>*Pontificia Universidad Católica de Valparaíso, Escuela de Ingeniería Bioquímica  
[matias.naipayan.a@mail.pucv.cl](mailto:matias.naipayan.a@mail.pucv.cl)*

<sup>2</sup>*Universidad de los Andes, Facultad de Ingeniería y Ciencias Aplicadas*

<sup>3</sup>*Pontificia Universidad Católica de Valparaíso, Escuela de Ingeniería Bioquímica*

La digestión anaerobia (DA) es una tecnología usada para el tratamiento de residuos industriales líquidos (riles), la cual permite reducir la carga orgánica presente en el ril, así como la generación de biogas, con una concentración de metano entre 50-70%. Los riles vitivinícolas se caracterizan por tener una alta demanda química de oxígeno (DQO) y fácilmente biodegradables, además, poseen bajas concentraciones de nutrientes.

Se ha reportado que la adición de cenizas volantes (CV) en la DA permite un aumento de la remoción de DQO y un aumento del 12% de CH<sub>4</sub> por kg DQO removido. El presente trabajo busca evaluar el impacto de las CV en la prefactibilidad técnica-económica de una planta de DA para el tratamiento de riles vitivinícolas, al considerar este aumento de producción de gas metano.

En el estudio de mercado de los distintos productores de vino se calculó un caudal de trabajo de 70 m<sup>3</sup>/d con una DQO de 9 kg/m<sup>3</sup>. Las regiones óptimas para la instalación de un proyecto de DA para riles vitivinícolas son las regiones de O'Higgins y el Maule, donde se concentra el 70% de la producción de vino en Chile.

En la evaluación técnica, se calculó un porcentaje de remoción del 92% de materia orgánica desde el ril. Fue esencial considerar el impacto de las CV en la producción de CH<sub>4</sub>, ya que tienen un efecto directo en la potencia de entrada del cogenerador de energía eléctrica/térmica. La diferencia de energía eléctrica y térmica anual generada entre una planta con y sin CV es del 10,7% para las condiciones estudiadas.

Para el estudio económico del proyecto, el principal ingreso está asociado al ahorro por generación de energía eléctrica para autoconsumo, por lo que la elección del cogenerador es esencial para la rentabilidad del proyecto. Con un precio de \$140/kWh y una eficiencia de generación del 35%, el TIR es de 24 y 41 años para los casos con y sin CV, mientras que con un 40% el TIR es de 17 y 25 años. Para precios menores a \$130/kWh y eficiencia del 35%, el proyecto tiene un TIR sobre 26 años, por lo que no se considera viable en estas condiciones.

Al realizar ejecutar este proyecto se debe considerar que la eficiencia de energía eléctrica y térmica del cogenerador tiene un impacto importante en la rentabilidad del sistema. Además, disminuciones del costo de energía eléctrica puede generar que el proyecto no sea rentable en un plazo de 20 años. Adicionalmente, se recomienda realizar un estudio de localización más preciso, debido al alto número de productores de vinos en Chile y las condiciones particulares de estos.

## REMOCIÓN DE ARSÉNICO DESDE AGUAS NATURALES EMPLEANDO ELECTROCOAGULACIÓN ACOPLADA CON ULTRASONIDO

Pamela Lazo<sup>1</sup>, Alejandro Zambra<sup>2</sup>, Andrea Lazo<sup>2</sup>, Arnold Solano<sup>2</sup>, Maria Gabriela Lobos<sup>1</sup>, Henrik K. Hansen<sup>2</sup>

<sup>1</sup>Instituto de Química, Universidad de Valparaíso, Av. Gran Bretaña 1111, Valparaíso, 2360102, Chile.

<sup>2</sup>Departamento de Ingeniería Química y Ambiental, Universidad Técnica Federico Santa María, Av. España 1680, Valparaíso, 2390123, Chile.

*Alejandrozambra13@gmail.com*

La creciente escasez de agua dulce apta para consumo humano es uno de los principales desafíos a nivel global. Según la UNESCO, cerca del 46% de la población mundial se ve afectada por la falta de acceso a agua segura. Chile no es ajeno a esta situación, a futuro se proyecta, la necesidad de recurrir a fuentes hídricas de menor calidad, algunas de las cuales presentan concentraciones de arsénico que superan la normativa vigente, lo cual refuerza la necesidad de desarrollar tecnologías sostenibles y eficientes que permitan su remoción y garanticen la calidad del agua disponible.

El proceso de electrocoagulación (EC) ha sido ampliamente estudiado como una técnica eficiente para la remoción de contaminantes disueltos en el agua. Su atractivo radica en el bajo costo de operación, fácil automatización y baja generación de lodos, convirtiéndola en una tecnología adaptable a diversas condiciones de tratamiento. La eficacia del proceso depende de la optimización de parámetros operacionales como la densidad de corriente, el tiempo de tratamiento y la configuración de los electrodos. No obstante, el proceso convencional puede presentar limitaciones (pasivación del ánodo, aumento de la resistencia eléctrica) siendo el acoplamiento con métodos de oxidación avanzada como el ultrasonido (EC/US), una estrategia para mejorar la estabilidad del sistema y generar el radical hidroxilo.

El presente estudio evaluó la eficiencia de un proceso acoplado EC/US para la remoción de arsénico desde aguas naturales dopadas artificialmente. Se realizaron pruebas exploratorias para determinar el efecto del ultrasonido en la electrocoagulación, comparando tratamientos con y sin su aplicación. El sistema experimental consistió en un reactor acrílico de 1 L sumergido en un baño ultrasónico Cole Parmer (500 W), con ánodos de acero comercial A20 y cátodos de acero inoxidable AISI 316. Se trabajó con aguas sintéticas de 200 µg/L de As para definir la mejor secuencia de acoplamiento y luego con aguas naturales de Cabildo y Petorca, dopadas entre 200 y 1200 µg/L, variando la densidad de corriente (10–50 A/m<sup>2</sup>) y el tiempo de tratamiento (10–30 min). Las muestras obtenidas fueron filtradas, decantadas y analizadas mediante espectroscopía de fluorescencia atómica con generación de hidruros (HG-AFS).

Los resultados mostraron eficiencias de remoción superiores al 99,3%, con valores sobre el 99,5% tras 30 minutos de tratamiento y concentraciones finales de arsénico inferiores a 10 µg/L, cumpliendo la NCh409/1. Se observó una dependencia cinética a 50 A/m<sup>2</sup>, donde el incremento del tiempo de tratamiento mejoró la eficiencia de remoción. Por otra parte, al trabajar con distintas densidades de corriente no se observó un efecto en la eficiencia de remoción en el rango testeado. Con relación a la EC convencional, el sistema EC/US evidenció mayor estabilidad y eficiencia electroquímica.

Los ensayos se realizaron en modo batch, demostrando la viabilidad del sistema a escala de laboratorio. Sus características operacionales permiten proyectar su implementación en sistemas continuos y su escalamiento hacia aplicaciones piloto o industriales. Estos resultados confirman la factibilidad técnica y ambiental del proceso, posicionándolo como una alternativa efectiva, sostenible y escalable para la remoción de arsénico en aguas naturales. En conjunto, el proceso EC/US mostró un comportamiento electroquímico estable, alta reproducibilidad y bajo consumo energético, generando efluentes que cumplen con la normativa chilena, evidenciando potencial de aplicación en zonas con limitaciones hídricas.



## Biotemplated Mesoporous Nanosilica: Eco-Friendly Synthesis from Agro-Waste and Application as Adsorbent for Pharmaceutical Contaminants in Water

Carlos Augusto Morales-Paredes <sup>1,2</sup>, Luis Ramón Bravo-Sánchez <sup>3</sup>, Bryan Fernando Rivadeneira-Mendoza <sup>4</sup>, María Dolores Saquete <sup>1,5</sup>, Nuria Boluda- Botella <sup>1,5</sup>, Joan Manuel Rodríguez-Díaz <sup>2,4</sup>

<sup>1</sup> *Instituto Universitario de Ingeniería de los Procesos Químicos, Universidad de Alicante, Alicante, E-03080, España*

<sup>2</sup> *Laboratorio de Análisis Químicos y Biotecnológicos, Dirección de Investigación, Universidad Técnica de Manabí, Portoviejo 130104, Ecuador*

<sup>3</sup> *Facultad de Ciencias de la Vida, Universidad Estatal Amazónica, Puyo 160150, Ecuador*

<sup>4</sup> *Departamento de Procesos Químicos, Biotecnología y Alimentos, Facultad de Ingeniería y Ciencias Aplicadas, Universidad Técnica de Manabí, Portoviejo, 130104, Ecuador*

<sup>5</sup> *Instituto Universitario del Agua y las Ciencias Ambientales, Universidad de Alicante, Alicante, E-03080, España*

*lbravo@uea.edu.ec*

A mesoporous silica nanoadsorbent was developed through a green synthesis assisted by biotemplating, using agro-industrial residues: corn stalks as the source of biogenic silica and starch extracted from avocado seeds as the structuring biotemplate. The synthesis involved alkaline dissolution of biosilica, followed by a hydrolysis–condensation reaction at pH 2, an aging step at 120 °C for 18 hours, and final calcination at 550 °C. The resulting nanosilica exhibited a high specific surface area (300 m<sup>2</sup> g<sup>−1</sup>) and an ordered porous structure with a tridimensional cubic morphology confirmed by SEM and XRD. Its application was evaluated for the simultaneous adsorption of two emerging pharmaceutical contaminants—hydroxychloroquine (HCQ) and oseltamivir (OSEL)—widely used during the COVID-19 pandemic. Kinetic and equilibrium assays in binary systems revealed a maximum adsorption capacity of 71.8 mg g<sup>−1</sup> for HCQ and 32.1 mg g<sup>−1</sup> for OSEL, with removal efficiencies exceeding 97% in 20 and 30 minutes, respectively. The data fitted the pseudo-first-order kinetic model and the extended Freundlich isotherm, indicating a spontaneous, physical, and endothermic process ( $\Delta G^\circ = -10.99$  kJ mol<sup>−1</sup> for HCQ and  $-10.04$  kJ mol<sup>−1</sup> for OSEL;  $\Delta H^\circ < 40$  kJ mol<sup>−1</sup>). Microscopic modeling revealed multilayer formation with preferential HCQ–HCQ interactions at the active sites. The material maintained its performance over 10 reuse cycles, with removal efficiencies of 94% for HCQ and 88% for OSEL. Due to its high efficiency, low cost, and sustainability, this nanomaterial represents a viable alternative for the simultaneous removal of pharmaceutical pollutants in decentralized water treatment plants or rural systems impacted by contaminated effluents.

**Keywords:** mesoporous silica; pharmaceutical contaminants; competitive adsorption; microscopic modeling; sustainable nanomaterials.



## Modelado de la estratificación de oxígeno durante el almacenamiento de energías renovables en aire líquido

Cárdenas. J<sup>1</sup>, Huerta. F<sup>1</sup>

<sup>1</sup>*Departamento de Ingeniería Química y Bioprocesos, Pontificia Universidad Católica de Chile*  
*Juan.cardenasg@uc.cl*

El estudio de las diferentes aplicaciones de energía térmica y el desarrollo tecnológico en esta área cobran mucha relevancia si se quiere lograr una transición energética limpia, renovable y sustentable. Actualmente los combustibles fósiles y combustión a base de carbón contribuyen a más del 50% de la demanda actual de suministro energético, emitiendo más del 80% de CO<sub>2</sub> que llegan a la atmósfera [1]. Con el fin de reducir las emisiones de CO<sub>2</sub> se hace necesario el desarrollo de nuevas tecnologías de fuente renovable que tengan la capacidad de suplir la demanda energética global a una baja emisión de CO<sub>2</sub> a la atmósfera [2]. Posibles alternativas para producir y almacenar energía son corresponden a los procesos de licuefacción de líquidos criogénicos, como por puede ser hidrógeno, nitrógeno, gas natural o aire, de modo que sean fáciles de transportar para posteriormente ser expandidos y aprovechados como generadores de energía eléctrica.

*Liquid Air Energy Storage (LAES)* surge como una tecnología de almacenamiento criogénico de energía. Este proceso se basa en utilizar energía renovable en momentos donde el precio spot es muy bajo o cero para licuar aire [3]. Luego, en momentos de alta demanda energética y baja generación renovable, se re-gasifica y calienta el aire licuado para luego ser expandido en una turbina y generar trabajo eléctrico. La literatura se centra en optimizar los procesos de carga, descarga y minimizar las pérdidas de ebullición. Un aspecto que no ha sido explorado con suficiente precisión es la distribución de concentraciones de oxígeno y nitrógeno durante la evaporación de aire líquido. Al tratarse de una mezcla nitrógeno-oxígeno, la diferente volatilidad de los compuestos favorece la evaporación de nitrógeno, aumentando la concentración de oxígeno. Hay escasa investigación centrada en perfiles de concentración dentro del estanque [4] a escala de laboratorio. Este trabajo desarrolla un modelo de transferencia de masa para la fase líquida durante el almacenamiento de aire líquido con el fin de predecir con precisión la evolución de la concentración de oxígeno en el tanque.

El modelo se implementó en MATLAB y es una extensión del modelo 1-D no estacionario desarrollado por Huerta y Vesovic para la evaporación de líquidos criogénicos puros [5-7]. Las predicciones de presión y perfiles de temperatura obtenidas con tal modelo se han validado frente a simulaciones CFD y datos experimentales [5]. La ecuación diferencial parcial que gobierna el perfil de concentración se resolvió utilizando el método de líneas, discretizando el espacio en la dimensión axial. Este subsistema se acopló al sistema de ecuaciones diferenciales algebraicas (DAE) para líquidos criogénicos puros, y luego integró utilizando el algoritmo ODE15i de MATLAB. El modelo genera perfiles de concentración espacio-temporales de oxígeno y nitrógeno en función de la altura dentro de la fase líquida cualitativamente correctos. Se aplicó el modelo para reproducir una evaporación isobárica a escala experimental en un tanque vertical de 165 L [4]. Se observó una diferencia de la concentración de oxígeno en la interfase y en el seno de líquido de un 3%, en comparación a un valor de 0.7%. Esta discrepancia demuestra que, en la realidad, la convección natural homogeneiza la concentración de oxígeno en la mezcla de manera más eficiente que sólo considerando difusión.

## Evaluación de la Eficiencia de Transferencia de Masa de Oxígeno en Agua Mediante el Uso de Nanoburbujas de Oxígeno y Aire

L. Arias<sup>1</sup>, C. Carlesi<sup>1</sup>, J. Silva<sup>1</sup>, G. Aroca<sup>2</sup>

<sup>1</sup>Escuela de Ingeniería Química, Pontificia Universidad Católica de Valparaíso, Av. Brasil 2162, Valparaíso 2340025, Chile. (Fuente Arial cursiva, tamaño 10 puntos, espacio simple entre líneas, texto justificado).

<sup>2</sup>Escuela de Ingeniería Bioquímica, Pontificia Universidad Católica de Valparaíso, Av. Brasil 2085, Valparaíso 2340025, Chile

*[laura.arias.t@mail.pucv.cl](mailto:laura.arias.t@mail.pucv.cl)*

La tecnología de las nanoburbujas (NB) ha mostrado potencial para mejorar la transferencia de masa en sistemas de aireación, además de aumentar la solubilidad de gases poco solubles, lo que beneficia a múltiples procesos. En este trabajo se analizó el efecto de la tecnología de las NB de oxígeno y aire en la mejora de la transferencia de masa durante los procesos de absorción y desorción en el agua de grifo. Para ello se aplicó el sulfito de sodio que actúa como desoxigenante, reduciendo a valores cercano a cero el oxígeno disuelto presente en el agua y así estandarizar las condiciones de arranque de los ensayos. Se planteó que las NB de oxígeno, por su menor tamaño y mayor capacidad para aportar concentración de oxígeno disuelto (OD), mejorarían la eficiencia en la transferencia de masa y las concentraciones del OD en comparación con las de aire. Por lo cual, se diseñó un sistema experimental que permitió medir el coeficiente volumétrico de transferencia de masa ( $k_L a$ ) utilizando los gases en las NB, evaluando factores como la temperatura, la absorción y la desorción. Los resultados mostraron que las NB de oxígeno incrementaron el  $k_L a$  respecto a las de aire, con un valor de  $0.1752 \pm 0.0124 \text{ min}^{-1}$  en absorción con oxígeno frente a  $0.0737 \pm 0.0122 \text{ min}^{-1}$  con aire. Sin embargo, la temperatura mostró un efecto adverso en la solubilidad del oxígeno, reduciendo la eficiencia de la transferencia de oxígeno, además de su variación con el tiempo, requiriendo el ajuste del  $k_L a$  a un valor estándar de temperatura de 20°C. En desorción, con un valor de  $0.0452 \pm 0.0042 \text{ min}^{-1}$  con oxígeno frente a  $0.0416 \pm 0.0020 \text{ min}^{-1}$  con aire, no se observaron diferencias significativas entre NB de aire y oxígeno. Sin embargo, el uso de NB de oxígeno permitió alcanzar concentraciones iniciales de OD más altas, lo que se reflejó en valores mayores de OD durante el proceso de desorción. En conclusión, las NB de oxígeno mejoraron la transferencia de masa en procesos de absorción en comparación con las de aire, mientras que en desorción el efecto del tipo de gas fue mínimo. El mayor tiempo de permanencia y las altas concentraciones de OD de las NB se relacionó con la mayor solubilidad y potencial zeta del oxígeno. Este estudio contribuyó al conocimiento sobre el uso de NB, demostrando que mejoran la transferencia de masa.

## Ajuste de la reactividad catalítica de superficies 2D de $\text{SiO}_2$ para la reducción ambiental de $\text{CO}_x$

V. Iturra<sup>1,2</sup>, B. Sanhueza<sup>2</sup>, F. Gracia<sup>1</sup>, T. Sandoval<sup>2</sup>

<sup>1</sup>*Departamento de Ingeniería Química, Biotecnología y Materiales, Universidad de Chile, Santiago, Chile.*

<sup>2</sup>*Departamento de Química y Ambiental, Universidad Técnica Federico Santa María, Santiago, Chile.*

*victoriaiturra11@gmail.com*

El calentamiento global es uno de los mayores desafíos actuales, causado principalmente por el aumento de gases de efecto invernadero como el dióxido de carbono ( $\text{CO}_2$ ). Una estrategia para mitigar este es reutilizarlo como materia prima para generar compuestos de valor, tales como E-fuels. Sin embargo, muchos de estos procesos aún se encuentran en etapa temprana de exploración y presentan grandes desafíos para su implementación a gran escala. En la mayoría de los procesos de conversión intervienen catalizadores, cuya estructura química y electrónica puede modificarse para dirigir la formación de distintos productos. No obstante, su aplicación extensiva se ve restringida por su baja disponibilidad y elevado costo, lo que motiva la búsqueda de materiales alternativos con actividad catalítica y mayor accesibilidad. En este contexto, se propone el uso de superficies cristalinas de dióxido de silicio ( $\text{SiO}_2$ ), un material abundante y de bajo costo. Para potenciar su desempeño, se considera su forma bidimensional (2D), con el fin de incrementar la densidad de sitios activos. Sin embargo, sus propiedades inerte, hidrofóbica y aislante limitan la actividad catalítica intrínseca, por lo que resulta necesario modificar su estructura electrónica. Este estudio explora diversas modificaciones estructurales reportadas previamente como viables desde el punto de vista experimental, incluyendo: hidroxilación, dopaje, vacancias y amorfización. Para evaluar su reactividad, se analizaron las energías de adsorción de moléculas de  $\text{CO}$ ,  $\text{CO}_2$  y  $\text{H}_2\text{O}$ , sin profundizar en los mecanismos de reacción completos, ya que dichas energías constituyen un indicador confiable de la interacción molécula-superficie con un costo computacional razonable. Para esto, se realizaron simulaciones Ab-initio mediante teoría del funcional de la densidad (DFT), utilizando el software VASP(6.1.2) con un funcional PBE y la corrección de dispersión D3 de Becke- Johnson. Tras un test de convergencia, se definieron los parámetros de cálculo: una malla  $k$  de  $2 \times 2 \times 1$  centrada en el punto Gamma, un corte de energía de 450 eV y un vacío de 20 Å. La supercelda utilizada contiene 36 átomos de silicio y 72 de oxígeno, con dimensiones en los ejes  $x$  e  $y$  de 15,89 Å x 15,88 Å. Los cálculos se realizaron a 0 K y sin considerar la presión, lo que, si bien no reproduce condiciones operacionales reales, permite identificar tendencias en la reactividad superficial. Nuestros resultados muestran que la superficie prístina no posee una interacción significativa con las moléculas seleccionadas, con energías cercanas a 0 eV y distancias (superficie-molécula) mayores a 3 Å, confirmando su carácter inerte. La hidroxilación mejora la estabilidad superficial y favorece puentes de hidrógeno con  $\text{H}_2\text{O}$ , disminuyendo la energía de adsorción a través de un efecto cooperativo. El efecto de dopandos de Aluminio, genera una mayor proximidad del  $\text{CO}$  y  $\text{CO}_2$  a la superficie ( $< 2$  Å), pero las interacciones siguen siendo débiles. La presencia de vacancias promueve una adsorción más fuerte de  $\text{CO}$ , y facilita la disociación de  $\text{CO}_2$ , con energías altamente favorables. La superficie amorfa favorece la adsorción de agua y la hidroxilación de la superficie, lo cual promueve la adsorción del  $\text{CO}_2$ , sugiriendo que esta superficie es más estable que la prístina. Si bien no se realizó un análisis comparativo con catalizadores de referencia, nuestros resultados entregan un marco teórico para la modificación de superficies de  $\text{SiO}_2$  para su uso como superficie catalítica y entrega una evaluación sistemática de su efecto en la adsorción de moléculas  $\text{CO}_x$ . En base a las interacciones favorables encontradas, una investigación futura, para confirmar los resultados, sería estimar  $G_{\text{ads}}$  en las temperaturas y presiones de operación.

## Application of Cu/Fe Metal Oxides as Catalysts for Amoxicillin Degradation in Continuous Flow Systems

Bryan Fernando Rivadeneira-Mendoza<sup>1</sup>, Alejandro Josué García-Guerrero<sup>1</sup>, Roy Cristhian Armas-Alvarado<sup>1</sup>, Joan Manuel Rodríguez-Díaz<sup>1, 2</sup>

<sup>1</sup>*Laboratorio de Análisis Químicos y Biotecnológicos, Instituto de Investigación, Universidad Técnica de Manabí, S/N, Avenida Urbina y Che Guevara, Portoviejo, 130104, Ecuador*

<sup>2</sup>*Departamento de Procesos Químicos, Biotecnología y Alimentos, Facultad de Ingenierías y Ciencias Aplicadas, Universidad Técnica de Manabí, Portoviejo, Ecuador*

*joan.rodriguez@utm.edu.ec*

Amoxicillin (AMX) is a widely used antibiotic frequently detected in surface waters and wastewater treatment plant (WWTP) effluents, with concentrations ranging from 0.31 ng L<sup>-1</sup> to 0.03171 mg L<sup>-1</sup>, highlighting the limitations of conventional treatment methods for its effective removal. This study evaluated the performance of a novel Cu/Fe-based oxide material, modified for the efficient elimination of AMX. Characterization techniques (FTIR, XRD, and TEM) confirmed the presence of mixed metal oxides. In batch mode, kinetic and isotherm data fitted to the pseudo-second order and Toth models, respectively, suggested physical interactions between AMX and the heterogeneous active sites of the nanomaterial, with a maximum adsorption capacity of 37.86 mg g<sup>-1</sup>. A single-step photocatalytic degradation process removed more than 99% of AMX, with first-order kinetics indicating that the degradation rate depends on the AMX concentration. In continuous mode at a flow rate of 0.2 mL min<sup>-1</sup>, the breakthrough point (5% AMX in the effluent) was reached after 540 minutes of adsorption. In a two-stage treatment (ADS/AOP), breakthrough occurred at 1700 minutes, while in a single-stage AOP it was reached at 1800 minutes. Photodegradation experiments identified h<sup>+</sup> as the most influential reactive oxygen species (ROS). These findings demonstrate that continuous-flow AOPs, under visible light and in the presence of Cu/Fe oxide-based catalysts, are an efficient technology for the removal of AMX from aqueous environments.

## Estudio de factores de la precipitación de carbonatos microbiológicamente inducida aplicada al rechazo de aguas subterráneas

Y. Jara<sup>1</sup>, P. Poirrier<sup>1</sup>, A. Torres<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Escuela de Ingeniería Bioquímica, Facultad de Ingeniería, Pontificia Universidad Católica de Valparaíso.

*yasmin.jara@pucv.cl*

En Chile debido a la escasez hídrica, la mayoría del agua para consumo humano se obtiene de fuentes subterráneas, cuya calidad peligra por la contaminación con metales pesados. Globalmente se utilizan tecnologías robustas como la osmosis inversa (OI) para asegurar la calidad del agua. Sin embargo, este proceso genera un rechazo con los contaminantes concentrados que podría ser aprovechada en lugar de disponerse sin estabilizar como suele ser común. Frente a esto, la precipitación de carbonatos microbiológicamente inducida (MICP) por vía ureolítica ha demostrado ser útil en la remoción de metales pesados en medios acuosos. No obstante, a la fecha no existen reportes su aplicación al rechazo de aguas subterráneas ni tampoco información sobre las dosis necesarias de sus principales componentes: urea y calcio. Por ello, en este trabajo se estudió la incidencia de ambos en el desempeño del MICP aplicado al rechazo para encontrar la mejor dosis.

Para esto, se caracterizó el rechazo simulando un proceso de osmosis inversa con el programa TORAY DS2 utilizando el agua subterránea promedio de los pozos de la región de Coquimbo monitoreados por la Dirección General de Aguas de Chile en 2017. Esto, considerando una producción de permeado de 36 m<sup>3</sup>/h equivalente al consumo de 5000 habitantes con una recuperación del 75% y un pretratamiento de resina descalcificadora para evitar incrustaciones. Posteriormente, se simuló el proceso MICP ureolítico en Visual MINTEQ variando la concentración de calcio (desde 12,5 mM hasta 37,5 mM) y la relación urea/calcio (entre 0,5 y 2) en un modelo factorial de 5 niveles y 2 factores. Así, finalmente se llevó a cabo un tratamiento estadístico con el programa Minitab siguiendo una metodología de superficie de respuesta para determinar la incidencia de cada parámetro y la mejor dosis dentro del rango de ambos para obtener el porcentaje de remoción de calcio y pH más altos.

Como resultado, si bien en ambos casos el comportamiento de la variable respuesta puede ser descrito por un modelo cuadrático completo con ajustes superiores al 90%, respecto al pH la interacción entre ambos parámetros no alcanza a ser considerado como significativo (con un nivel de significancia del 5%) y por ende es preferible despreciarlo para mejorar el ajuste, obteniendo así una herramienta útil en el control del proceso MICP. Además, el análisis estadístico revela que el comportamiento tanto del pH como del porcentaje de calcio precipitado es principalmente regido por la relación urea-calcio, que se posiciona como pilar fundamental en el desempeño del proceso.

Finalmente, una vez construidas las superficies de respuesta, se buscó la mejor combinación para obtener el pH más alto y el mayor porcentaje de calcio precipitado, encontrándolo a 35,45 mM de calcio y relación urea-calcio de 1,8 donde el pH alcanza 9,28 y se precipita casi el 100% de calcio. Así, esta condición de compromiso podría asegurar un buen desempeño del proceso MICP para la remoción de metales pesados en una matriz acuosa compleja (rechazo) no estudiada hasta la fecha.



## Síntesis y aplicación de heterouniones $\text{Cu}_2\text{O}/\text{ZnO}$ para la degradación fotocatalítica del imidacloprid

Paula Salazar N.<sup>1</sup>, Ricardo Salazar<sup>1,2</sup>, Paula Grez<sup>3</sup>, Rodrigo Henríquez<sup>3</sup>, Patricio Baeza<sup>3</sup>, Camila Astudillo<sup>3</sup>, Elena Navarrete-Astorga<sup>4,5</sup>, Enrique A. Dalchiele<sup>6</sup>.

<sup>1</sup> Research Group of Analysis, Treatment, Electrochemistry, Recovery and Reuse of Water WATER2, Escuela de Química, Pontificia Universidad Católica de Chile, Santiago, Chile,

<sup>2</sup> Centro de Derecho y Gestión de Aguas. Pontificia Universidad Católica de Chile, Santiago, Chile,

<sup>3</sup> Instituto de Química, Facultad de Ciencias, Pontificia Universidad Católica de Valparaíso, Casilla 4059, Valparaíso, Chile,

<sup>4</sup> Departamento de Física Aplicada I, Facultad de Ciencias, Universidad de Málaga, 29071, Málaga, España,

<sup>5</sup> Instituto Universitario de Materiales y Nanotecnología, IMANA, Universidad de Málaga, 29071, Málaga, España,

<sup>6</sup> Instituto de Física, Facultad de Ingeniería, Herrera y Reissig 565, C.C. 30, 11000 Montevideo, Uruguay.

[paularsalazarn@gmail.com](mailto:paularsalazarn@gmail.com)

Este trabajo presenta un método de síntesis sencillo, rápido y no tóxico para la obtención de la heterounión  $\text{Cu}_2\text{O}/\text{ZnO}$ , generando partículas con morfologías de esferas y láminas para la degradación fotocatalítica del pesticida imidacloprid, un contaminante emergente presente en ríos, acuíferos, lagos y plantas de tratamiento de aguas residuales cercanas a zonas agrícolas. La formación de la heterounión se confirmó mediante DRX y XPS, mientras que la caracterización morfológica con FESEM y TEM reveló esferas de 130–190 nm y láminas de 240–340 nm. Los estudios ópticos indicaron que la heterounión  $\text{Cu}_2\text{O}/\text{ZnO}$  absorbe en las regiones visible y ultravioleta, mostrando los band gap de cada componente ( $E_g$   $\text{Cu}_2\text{O}$ : 2.5 eV;  $E_g$   $\text{ZnO}$ : 3.2 eV) y cubriendo aproximadamente el 50% del espectro solar. Esta amplia absorción solar y la efectiva separación de pares electrón-hueco posicionan a la heterounión como un candidato prometedor para reemplazar semiconductores como el  $\text{TiO}_2$ , que requieren radiación UV para su actividad fotocatalítica.

Tras una caracterización estructural, morfológica y óptica exhaustiva, el material se evaluó como fotocatalizador, alcanzando inicialmente una eficiencia de remoción del imidacloprid del 43%. Este bajo rendimiento se atribuyó a la recombinación de electrones y huecos fotogenerados: los electrones de la banda de conducción del  $\text{Cu}_2\text{O}$ , con potencial más negativo que el del  $\text{ZnO}$ , se acumulan y recombinan, reduciendo la degradación. Para superar esta limitación, se añadió  $\text{H}_2\text{O}_2$ , logrando una remoción del 97% tras 3 horas de iluminación con  $\text{Cu}_2\text{O}/\text{ZnO}/\text{H}_2\text{O}_2$ . La  $\text{H}_2\text{O}_2$  facilita la conversión de los electrones en radicales hidroxilos ( $\bullet\text{OH}$ ), mientras que los huecos de la banda de valencia del  $\text{ZnO}$  también generan  $\bullet\text{OH}$ , estableciendo a estos radicales como las especies oxidantes principales responsables de la degradación del imidacloprid. En agua potable de distintas ciudades de la V región, la remoción de IMI alcanzó un 68%, menor que en muestras sintéticas debido a la presencia de otros contaminantes.

El sistema  $\text{Cu}_2\text{O}/\text{ZnO}/\text{H}_2\text{O}_2$  demuestra ser un fotocatalizador eficiente para la eliminación de contaminantes emergentes, con alta degradación en muestras sintéticas y más del 50% en muestras reales.

**Agradecimientos a FONDECYT Postdoctoral ANID 3250223 y Postdoctorado DI PUCV.**



## Predicción y mitigación de emisiones de N<sub>2</sub>O en plantas de tratamiento de aguas residuales

J. Gallardo<sup>1</sup>, L. Bergh<sup>1</sup>, F. Jahn<sup>2</sup>

<sup>1</sup>Departamento de Ingeniería Química y Ambiental, Universidad Técnica Federico Santa María, Chile.

<sup>2</sup>Ainwater, Área de innovación.

[joaquin.gallardo@usm.cl](mailto:joaquin.gallardo@usm.cl)

La evolución en el monitoreo de N<sub>2</sub>O en las PTAR ha sido notable en las últimas décadas, pasando de métodos teóricos a técnicas avanzadas de medición directa en sistemas a escala real. Inicialmente, las emisiones se estimaban mediante factores de emisión calculados de forma teórica, lo que frecuentemente resultaba en una subestimación significativa de su impacto ambiental. Este enfoque fue paulatinamente reemplazado por campañas de monitoreo directo, lo que permitió recopilar datos más precisos sobre la dinámica de las emisiones y los factores que las condicionan. El desarrollo de herramientas y técnicas avanzadas ha enriquecido el entendimiento de los procesos involucrados en la producción de N<sub>2</sub>O.

El sitio donde se realiza el estudio es una planta de tratamiento de aguas residuales ubicada en Temuco, región de La Araucanía. La planta le otorgó permiso a Ainwater para instalar las cámaras de flujo flotante en los reactores aireados del proceso. De igual manera, se permitió realizar modificaciones al código del PLC de la planta para poder tener acceso a los datos históricos. En una planta de tratamiento de aguas residuales, el N<sub>2</sub>O no es el único gas de efecto invernadero que se emite en el proceso, también existen emisiones considerables de CO<sub>2</sub> y CH<sub>4</sub>.

La cantidad de variables operacionales de una planta es muy grande, por lo que se propone el uso de PCA para reducir las dimensiones. Para esto es necesario reconocer si la planta funciona en estado estacionario de manera consistente. En caso de que esto no ocurra se propone utilizar el modelo PLS para poder reducir dimensiones.

Luego de analizar el estado de la planta se decide realizar la regresión por PLS y por un método de Machine Learning, para comparar los rendimientos de cada modelo, y así decidir si es conveniente realizar la reducción dimensional.

Se decide comparar PLS con modelación por Machine Learning ya que esta herramienta funciona especialmente bien para sistemas biológicos, debido a las relaciones dinámicas que existen entre las variables. En caso de la modelación por Machine Learning se puede utilizar la base de datos directamente sin reducir las dimensiones anteriormente.

Se terminaron realizando modelos PLS-D y XGBoost dinámicos, ya que la planta opera mayoritariamente en estado no estacionario. Según los resultados obtenidos, el modelo PLS-D no captura por completo la relación entre las variables y las emisiones. Esto tiene sentido ya que el modelo PLS consiste en múltiples modelos lineales, y se sabe desde la fenomenología que la relación entre las variables en una PTAR no es lineal, por lo que se concluye que la reducción dimensional no es conveniente en un sistema de este tipo.

Debido a esto se decide continuar realizando modelos de Machine Learning basados en XGBoost, ya que el rendimiento de este modelo para las emisiones de N<sub>2</sub>O fue muy bueno, por lo que se terminan modelando las emisiones de CO<sub>2</sub> y CH<sub>4</sub>.

Debido a los resultados satisfactorios de la modelación se recomienda que como trabajo posterior se realice la implementación del modelo en línea, de manera que el modelo dinámico se actualice de manera regular para así poder mitigar las emisiones de GEI manteniendo una buena recuperación de agua en el proceso.

## Evaluation of calcium and magnesium removal in flotation water by biological and chemical precipitation

C. Duarte-Nass<sup>1,2</sup>, J. Alarcón<sup>1</sup>

<sup>1</sup> Departamento de Ingeniería Química, Universidad de La Frontera, Temuco, Chile.

<sup>2</sup> Centro de Excelencia en Investigación Biotecnológica Aplicada al Medioambiente (CIBAMA), Universidad de la Frontera, Temuco, Chile.

[carla.duarte@ufrontera.cl](mailto:carla.duarte@ufrontera.cl)

One of the most widely used copper extraction processes in Chile is flotation, which requires a high amount of water. In the context of water scarcity in the country, strong measures have been applied to recirculate process water and consume seawater, either directly or desalinated. However, due to the content of various ions present in seawater, such as  $\text{Cl}^-$  (19.35 g/l),  $\text{Na}^+$  (10.78 g/l),  $\text{SO}_4^{2-}$  (2.71 g/l),  $\text{Mg}^{2+}$  (1.28 g/l),  $\text{Ca}^{2+}$  (0.41 g/l) and  $\text{HCO}_3^-$  (0.11 g/l) [1], the flotation process can lose efficiency if these ions accumulate in the recirculated process water, mainly calcium and magnesium ions. This study focused on the evaluation of the biological precipitation process, using urea ( $\text{CO}(\text{NH}_2)_2$ ) and the bacteria *Sporosarcina pasteurii* to achieve the formation of calcium carbonate ( $\text{CaCO}_3$ ), complemented in a second stage by a chemical precipitation process, using a monosodium phosphate ( $\text{NaH}_2\text{PO}_4$ ) solution to form struvite ( $(\text{NH}_4)\text{MgPO}_4 \cdot 6\text{H}_2\text{O}$ ), with the objective of removing calcium and magnesium, respectively, from real flotation waters obtained from a mining operation that consumes directly seawater. Both calcium carbonate and struvite have potential as valuable products. A factorial experimental design was defined ( $2^2$ ), which evaluated the concentration of carbonates (generated by bacterial hydrolysis of urea) and the concentration of phosphates, both factors at two levels, being 5 and 10 times the initial concentration of calcium, and 0.25 and 0.50 times the initial concentration of magnesium, respectively. The levels of each factor were defined according to the results of simulated chemical reactions using the free software Visual Minteq 3.1. The concentrations of both metals were measured in the initial and final supernatants, through atomic absorption, to calculate the removal of each process under study.

The results of the experimental design indicate that the highest carbonate level generated the greatest calcium removal (65.73%) in the first stage, when biological precipitation occurs. In addition, there was a slight magnesium removal (5.88%) at this stage. On the other hand, in the second stage, when chemical precipitation takes place, the highest level of phosphate showed the highest removal of magnesium (49.89%) and high removal of the remaining calcium (91.14%). It was observed that the pH remained above 8 when a high level of carbonate and phosphate was applied, which favored the formation of precipitates. Both precipitates, from the biological precipitation stage and the chemical precipitation stage respectively, were recovered by centrifugation and kept dried for further analysis. It is concluded that it is necessary to increase the concentration of carbonates in bacterial culture to increase calcium removal in the biological precipitation stage, and that a higher concentration of phosphate solution is required to improve the performance of magnesium removal in the chemical precipitation stage, paying attention to the final pH of the mixture remaining above 8.

## Tratamiento de Aguas Residuales Mediante Electroquímica Solar en Reactores Tipo Raceway

R. Salazar-González<sup>1,2</sup>, J. Herrera-Muñoz<sup>1</sup>, S. Miralles-Cuevas<sup>3</sup>, C. Gaete<sup>1</sup>, A. Cabrera Reina<sup>3</sup>

<sup>1</sup> Grupo de Investigación de Análisis, Tratamiento, Electroquímica, Recuperación y Reúso de Agua (WATER<sup>2</sup>), Escuela de Química, Facultad de Química y de Farmacia, Pontificia Universidad Católica de Chile, UC.

<sup>2</sup> Centro de derecho y Gestión de Aguas, UC.

<sup>3</sup> CIESOL/Departamento de Ingeniería Química. Universidad de Almería.

[ricardo.salazar@uc.cl](mailto:ricardo.salazar@uc.cl)

Los contaminantes de preocupación emergente (CECs) presentes en los efluentes de plantas de tratamiento de aguas residuales (PTAR) no son eliminados eficazmente por los métodos convencionales, lo que permite su liberación a cuerpos de agua receptores. En este estudio se evaluó la aplicación del proceso foto-electro-Fenton solar (FEFS) para la degradación de CECs y la inactivación microbiológica en efluentes secundarios reales.

El proceso se implementó en un nuevo tipo de reactor “Solar Electrochemical Raceway Pond (SEC-RPR)” de 8, 15 y 20 L, compuestos por un fotoreactor raceway con agitación y una celda electroquímica tipo filtro prensa con ánodo de óxidos metálicos mixtos y cátodo de difusión de aire, conectados mediante recirculación con bomba peristáltica. La cuantificación de CECs y del complejo  $\text{Fe}^{3+}$ -EDDS se realizó por HPLC-DAD, mientras que la concentración de  $\text{H}_2\text{O}_2$  se determinó por espectrofotometría UV-Visible. La formación de subproductos de oxidación durante el proceso, fue determinado por cromatografía de exclusión iónica y cromatografía líquida acoplada a espectrometría de masas, con el fin de descartar la acumulación de intermediarios potencialmente tóxicos.

Se optimizaron tres variables clave mediante diseño de superficie de respuesta: densidad de corriente, concentración de  $\text{Fe}^{3+}$ -EDDS y tiempo de incorporación del complejo al proceso. Las condiciones óptimas obtenidas fueron: densidad de corriente de  $24,6 \text{ mA/cm}^2$ , concentración de  $\text{Fe}^{3+}$ -EDDS de  $0,089 \text{ mM}$ , incorporado a los 3,8 minutos del inicio del FEFS. Bajo estas condiciones, validadas experimentalmente, se logró una degradación superior al 80% de cuatro CECs modelo en 30 minutos, junto con la desinfección completa del efluente en 75 minutos.

Finalmente, si bien los sistemas piloto de 8–20 L permitieron demostrar la efectividad y optimización del FEFS, se discuten las perspectivas de escalabilidad y las posibles limitaciones técnicas y económicas de transferir las condiciones óptimas a plantas de mayor tamaño o a escenarios ambientales variables.

Agradecimientos FONDAP 1523A0006 SERC-CHILE y Proyecto Fondecyt 1220077

## Development of a selective separation process by forward osmosis membranes to maximise emerging pollutant removal

Marcos Paz<sup>1</sup>, Juan Carlos Ortega<sup>2</sup>, Gustavo Ciudad<sup>3,4</sup>

<sup>1</sup> PhD program in Natural Resources Sciences, Universidad de La Frontera. [marcos.paz@ufrontera.cl](mailto:marcos.paz@ufrontera.cl)

<sup>2</sup> Instituto del Medio Ambiente, Universidad de La Frontera. [juan.ortega@ufrontera.cl](mailto:juan.ortega@ufrontera.cl)

<sup>3</sup> Departamento de Ingeniería Química, Universidad de La Frontera. [gustavo.ciudad@ufrontera.cl](mailto:gustavo.ciudad@ufrontera.cl)

<sup>4</sup> Centro de Excelencia en investigación Biotecnológica Aplicada al Medio Ambiente, Universidad de La Frontera.

Emerging pollutants (EPs) are substances with potentially harmful effects on the environment, human health, and ecosystems. Antibiotics are classified as one type of EP. Ecosystems and human/animal health are threatened by the accumulation of antibiotics in aquatic environments. The antibiotic oxytetracycline (OTC) is identified as  $C_{22}H_{24}N_2O_9$ , with a mass of 460.434 Da. The antibiotic florfenicol (FF) has a molecular weight of 358.213 Da, and its chemical formula is  $C_{12}H_{14}Cl_2FNO_4S$ . Research has been conducted to remove antibiotics from water and wastewater using forward osmosis (FO) membranes. Good stability across a broad range of temperatures and pH levels, along with high resistance to chemical and biological degradation, is exhibited by Cellulose Triacetate (CTA) membranes. The transport of antibiotics through FO membranes can be achieved by varying the pH in the system. The pH variations enable changes in EPs, leading to ionic forms in their molecular structure. The pH variations allow changes in the zeta potential of the surface of membranes. This electrokinetic potential and the ionic forms of EPs can allow adsorption and further transport of these compounds through the membrane, driven by chemical potential due to a concentration gradient. This would allow separate EPs from complex matrices such as sludges or wastewaters, and subsequent oxidation of target EPs would be enabled, reducing oxidant concentration and operational costs.

The transport of OTC and FF separately in distilled water through a CTA membrane was evaluated. Two strategies were employed: FO and Passive Diffusion (PD). No water flux from the Feed Solution (FS) to the Receiving Solution (RS) was involved in PD due to a minimal effective osmotic potential difference (osmotic equilibrium). FO is a process characterised by a major effective osmotic potential difference resulting from a significant osmotic potential difference between FS and Draw Solution (DS). PD was used to evaluate the diffusive transport, and FO was used to evaluate the convective transport of antibiotics through the membrane. In both strategies, pH  $\approx$  3, 7, and 9 were used in FS to evaluate transport.

It was revealed by key findings that OTC transport to the DS at pH  $\approx$  3 (0.14 mg) and 7 (0.12 mg) was facilitated by osmotic-driven water flux in FO. FF exhibited strong electrostatic repulsion with CTA membrane, impeding adsorption and transmembrane movement (mass < LOD in FO and PD). Further assays using sludges or wastewater instead of distilled water in FS are necessary to determine transport in real-world conditions.

The researchers thank ANID for the 21240070 scholarship and FONDECYT for the funding provided through Project 1231521 under the direction of Dr. Gustavo Ciudad, which enabled this research to be conducted.

## **Efecto de las membranas en las baterías de flujo redox que utilizan líquidos iónicos**

**A. Silva Ibaceta<sup>1</sup>, C. Carlesi<sup>1</sup>, G. Olguín<sup>1</sup>**

<sup>1</sup>*Escuela de Ingeniería química, Pontificia universidad católica de Valparaíso .*

*Aldo.silva@pucv.cl*

En Chile, al igual que en otros lugares del mundo, hay suficientes fuentes de energía renovable, que representan aproximadamente el 24.2% de la matriz de generación energética del país [1]. Sin embargo, la limitación en el uso de estas tecnologías en Chile radica en la falta de infraestructura para la transmisión de electricidad y el almacenamiento de energía. Según las proyecciones, se espera que para el año 2050 Chile disponga de al menos 6,000 MW en sistemas de almacenamiento energético [2].

En relación con las tecnologías de almacenamiento de energía, las baterías de flujo redox son una de las soluciones más destacadas en el ámbito del almacenamiento de energía estacionaria durante la transición hacia el uso de energías renovables. Aunque se está llevando a cabo una intensa investigación en esta área, la comercialización de esta tecnología aún enfrenta desafíos.

Un subtipo de baterías de flujo redox que destaca por su cantidad de cargas eléctricas disponibles para las reacciones electroquímicas son las que utilizan líquidos iónicos. Las baterías de flujo redox con electrolito de líquido iónico tiene un futuro prometedor pero faltan estudios respecto a sus capacidades.

El objetivo general de este proyecto es desarrollar experimentalmente una batería de flujo redox basada en el ciclo electroquímico del cloruro de cobre en un solvente eutéctico profundo a base de cloruro de colina. Se busca identificar las condiciones operativas y los efectos de la introducción de un fluido electrodo y una membrana inorgánica funcionalizada capaz de soportar cambios de temperatura junto con esfuerzos mecánicos junto con minimizar las limitaciones en el transporte de masa y evaluar la eficiencia energética global en el almacenamiento de energía renovable.

El proyecto se enfoca en abordar la minimización del límite difusivo a través del uso de un electrodo fluidizado y la evaluación del uso de una membrana inorgánica funcionalizada con cobre en una red de gama alúmina con sílice.

Hasta el momento se ha desarrollado las primeras pruebas utilizando una membrana comercial y una batería de impresa en 3D para poder tener una base de comparación. Respecto a las membranas se encuentra en la etapa de fabricación mediante la técnica de dip coating.

## **Aguas grises tratadas para irrigación de muros y techos verdes: Influencia del tratamiento sobre el sustrato y las plantas.**

N. Águila<sup>1</sup>, G. Illanes<sup>1</sup>, J. Urzúa-Ahumada<sup>1</sup>, R. Abejon<sup>1</sup>, J. Romero<sup>2</sup>, E.  
Quijada-Maldonado<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Laboratorio de Intensificación de Procesos de Separación (SPI), Departamento de Ingeniería Química y Bioprocesos, Universidad de Santiago de Chile.

<sup>2</sup>Laboratorio de Procesos de Separación por Membrana (LabProSeM), Departamento de Ingeniería Química y Bioprocesos, Universidad de Santiago de Chile.

*Nadia.aguila @usach.cl*

La crisis hídrica en Chile se ha agravado en los últimos años debido al cambio climático, impactando tanto el bienestar de la población como múltiples sectores productivos e industriales. Esto ha impulsado a buscar fuentes alternativas de agua y soluciones sustentables en el uso y reutilización del agua. En este contexto, el presente trabajo de investigación evaluó el uso de aguas grises tratadas mediante un proceso de electrooxidación y electrocoagulación para el riego de muros verdes, observando su impacto en las propiedades del sustrato, crecimiento y salud de la vegetación. Durante un año se analizaron tres plantas ornamentales adaptadas al clima presente de la Región Metropolitana: *Chlorophytum laxum* (mala madre), *Dymondia margaretae* y *Hedera Helix* (hiedra). Estas estuvieron bajo un sistema de riego con tres tipos de agua: agua gris sin tratar, agua gris tratada y agua potable, cada una con índices de calidad distintos (turbidez, sólidos suspendidos totales, DQO, cloro libre, cloro total, amonio, amoniaco y nitrato).

Mensualmente se tomaron muestras de suelo y se analizó su pH, conductividad eléctrica, fósforo y materia orgánica. En el caso de las plantas, estas fueron estudiadas según su tasa de crecimiento, pigmentos (clorofila  $\alpha$ , clorofila  $\beta$  y carotenoides) y presencia de manchas foliares como indicadores de estrés químico.

El pH del sustrato se mantuvo relativamente estable (6,64 – 7,50) con ligeras fluctuaciones para los tres tipos de agua. La conductividad eléctrica tuvo un aumento progresivo entre el sexto mes hasta el décimo mes, alcanzando valores máximos de 5,6 [mS/cm] y 9,7 [mS/cm] para los sustratos irrigados con agua gris tratada y no tratada respectivamente. La materia orgánica del sustrato no sufrió variaciones significativas durante todo el ensayo. Sin embargo, a partir del sexto mes se evidenciaron variaciones para el fósforo en los tres tipos de agua, presentándose una concentración decreciente en el orden de agua potable, agua gris tratada y agua gris sin tratar, esto se atribuye por la absorción de fósforo de las plantas, lo cual el agua gris sin tratar favorece la disponibilidad y asimilación del fósforo en el sistema suelo-planta.

En cuanto al crecimiento de las plantas, las tres especies tuvieron un comportamiento similar. En una etapa inicial se evidenció un período de adaptación al riego de aguas grises, observando una reducción de crecimiento en un corto plazo, pero luego del sexto mes se igualaron e incluso superaron al control tanto en su desarrollo foliar, extensión de las ramas y cobertura superficial.

La proporción de los pigmentos fotosintéticos indicó un estado de semidormancia en todas las especies, independiente del tipo de agua de riego, siendo este efecto principalmente influenciado por el factor climático. Del mismo modo, la aparición de manchas foliares se mantuvo baja hasta el mes once, incrementándose en el último mes sin mostrar una tendencia clara asociada al tipo de agua de riego.

Con los resultados de este estudio se logró concluir que el riego de aguas grises tratadas mediante electrólisis constituye una opción viable para el riego de plantas ornamentales que no sean sensibles a la salinidad y que sean adaptables al ambiente, permitiendo proyectar futuras investigaciones acerca del uso de aguas grises tratadas para riego de frutas y verduras.



## Modelo 1-D de transferencia de calor en el almacenamiento de hidrógeno verde en adsorbentes porosos

Kieran Conradie<sup>1</sup>, Felipe Huerta<sup>1</sup>

<sup>1</sup>*Departamento de Ingeniería Química y Bioprocesos, Pontificia Universidad Católica de Chile, Santiago, Chile*

*kieran.conradie@uc.cl*

El almacenamiento eficiente de energía permite aprovechar fuentes renovables intermitentes como la solar y eólica. El hidrógeno ( $H_2$ ) es un vector energético atractivo por su alta densidad de energía gravimétrica (120 MJ/kg) y su producción limpia vía electrólisis renovable, pero su baja densidad volumétrica (0,01 MJ/L) dificulta su almacenamiento. Entre las tecnologías para almacenar hidrógeno, la adsorción física destaca por usar materiales porosos a presiones moderadas para mejorar la densidad volumétrica del hidrógeno. En comparación al hidrógeno gaseoso comprimido, el almacenamiento de hidrógeno en tanques con carbón activado provee una mayor seguridad y densidad gravimétrica a la misma presión. Sin embargo, el calor de la adsorción reduce su rendimiento al liberar grandes cantidades de calor del orden de 7 kJ/mol de  $H_2$  adsorbido. Esto motiva el desarrollo de modelos para optimizar los tanques.

Durante el proceso de carga de un tanque cilíndrico relleno de un adsorbente poroso, parte del hidrógeno se acumula en el espacio vacío y el remanente se adsorbe. La fracción adsorbida a una cierta temperatura y presión se obtiene mediante una isoterma de sorción. Durante la carga, la presión, densidad y temperatura del hidrógeno aumentan. La evolución de estas variables está acoplada por una ecuación de estado. Se asumió la ley de gases ideales para el hidrógeno, ya que para temperaturas cercanas a 298 K y presiones menor a 10MPa, su factor de compresibilidad es 0,997. La adsorción libera calor, produciendo un aumento de temperatura dentro del tanque, lo que genera un gradiente de temperatura producto de la temperatura de los alrededores.

Este trabajo presenta un nuevo modelo de transferencia de calor 1-D no estacionario para la adsorción de hidrógeno en tanques cilíndricos con carbón activado. La PDE del perfil de temperatura se discretizó espacialmente utilizando diferencias finitas, generando sistema de ecuaciones diferenciales ordinarias. Este sistema se acopló a la isoterma de adsorción y la ley de gases ideales, constituyendo un sistema de ecuaciones diferenciales algebraicas (DAE). La solución numérica al sistema DAE se implementó en Julia para reducir en más de dos órdenes de magnitud el tiempo de simulación en comparación a lenguajes interpretados como MATLAB® o Python. La implementación es implícita, permitiendo el uso directo de ecuaciones de estado o isothermas más complejas.

El modelo predice que el perfil radial de temperatura alcanza un estado pseudo estacionario. Existe un alto gradiente radial de temperatura de 250 K/m, que resulta de la interacción entre el alto calor de adsorción, la baja conductividad térmica del carbón activado y el enfriamiento por las paredes. El modelo otorga la cantidad de hidrógeno adsorbida, la presión del tanque y la densidad del hidrógeno gaseoso, permitiendo predecir la masa de hidrógeno almacenado en el sistema en función del tiempo, tasa de carga y los parámetros termofísicos del  $H_2$  y el carbón activado.

## **Optimización de la conversión en un lecho de reactor poroso unido a un canal de flujo libre relevante para los reactores electroquímicos**

L. Ortiz<sup>1</sup>, F. Huerta<sup>1</sup>, C. Pino-Muñoz<sup>2</sup>, J. Pérez-Correa<sup>1</sup>

<sup>1</sup> *Departamento de Ingeniería Química y Bioprocesos, Pontificia Universidad Católica de Chile, Santiago, Chile.*

<sup>2</sup> *Department of Earth Sciences and Engineering, Imperial College London, London, United Kingdom.*  
lucas.ortiz@uc.cl

La creciente demanda global de energías limpias y renovables, junto con la urgente necesidad de reducir las emisiones de gases de efecto invernadero, impulsan la transición energética hacia una matriz basada en energías renovables. Sin embargo, la intermitencia de las fuentes de energía renovables como la solar y la eólica plantea desafíos significativos para la estabilidad y confiabilidad de las redes eléctricas. Esto hace imprescindible el desarrollo de tecnologías eficientes de almacenamiento energético que permitan almacenar grandes cantidades de energía de forma segura y escalable. Las baterías de flujo redox de vanadio (VRFB) son una tecnología de almacenamiento estacionario de energía, escalables, que permiten el desacoplamiento energético y tienen una vida útil prolongada. Sin embargo, un factor importante que afecta su eficiencia de ciclo completo es la transferencia de masa en la interfase con el electrodo poroso y canal.

La conversión de los reactantes activos en baterías de flujo redox influye en su eficiencia energética global, donde una utilización óptima de los reactantes equilibra la máxima producción de energía con pérdidas mínimas debidas a reacciones secundarias y limitaciones de transporte. Esta investigación propone una metodología computacional para optimizar la conversión de electrolito en el cátodo de una celda VRFB utilizando dinámica de fluidos computacional (CFD) y diseño experimental.

Se modificó un software de CFD existente para mejorar su eficiencia computacional, asumiendo un estado pseudo-estacionario en los perfiles de velocidad sin despreciar la dependencia temporal de los perfiles de concentración. Este modelo, implementado en OpenFOAM, incorpora la ecuación de Brinkman para medios porosos, acoplada con ecuaciones de conservación de especies y términos de reacción volumétrica. Las simulaciones transientes se realizaron en un dominio tridimensional representativo del lado del cátodo en una VRFB. Se evaluó el impacto de la porosidad, el espesor del electrodo y la relación de aspecto del canal sobre la conversión de especies.

Se empleó un diseño experimental tipo Box-Behnken con 13 simulaciones para explorar el espacio de diseño, seguido por un diseño tipo Hipercubo Latino con 64 simulaciones, lo que permitió ajustar un modelo de superficie de respuesta mediante regresión polinomial y validar numéricamente los resultados mediante optimización bayesiana. El análisis identificó una configuración óptima con porosidad de 55%, espesor de 5.72 mm y relación de aspecto de 0.5, alcanzando una conversión máxima de 2.96%.

Los resultados proporcionan lineamientos cuantitativos para el diseño de electrodos y canales que maximicen el desempeño electroquímico, contribuyendo al desarrollo de VRFBs más eficientes.

## Development of a dopamine-functionalised CNF/CNC composite support for biotechnological applications

Roberto Mora<sup>1</sup>, Fernanda Pinto<sup>2</sup>, Antonio Serrano<sup>3,4</sup>, Tatiana Robledo<sup>3,4</sup>,  
Gustavo Ciudad<sup>5,6,7</sup>

<sup>1</sup>*Doctorate in Engineering Sciences with Specialization in Bioprocesses, Universidad de La Frontera, Avenida Francisco Salazar #01145, Temuco, Chile*

<sup>2</sup>*Departamento de Procesos Industriales, Facultad de Ingeniería, Universidad Católica de Temuco, Casilla 15-D, Temuco, Chile.*

<sup>3</sup>*Institute of Water Research, University of Granada, 18071 Granada, Spain*

<sup>4</sup>*Department of Microbiology, Pharmacy Faculty, University of Granada, Campus de Cartuja s/n, 18071 Granada, Spain*

<sup>5</sup>*Departamento de Ingeniería Química, Facultad de Ingeniería y Ciencias, Universidad de La Frontera, Temuco, Chile*

<sup>6</sup>*Centro de Excelencia en Investigación Biotecnología aplicada al Ambiente (CIBAMA), Universidad de La Frontera, Temuco, Chile.*

<sup>7</sup>*Instituto del Medio Ambiente (IMA), Universidad de La Frontera, Avenida Francisco Salazar 01145, Temuco, Chile.*

*r.mora06@ufromail.cl*

Emerging pollutants (EP) are a group of substances derived from the consumption of cosmetics, agrochemicals, solvents, and medicines, which end up in water bodies after use. The presence and spread of these substances in water systems is a global problem due to their adverse effects on human health.

Technologies ranging from ozonation to the use of ligninolytic enzymes have been explored for the removal of these pollutants. This work explores the development of a versatile material that can be used as both an adsorbent and an immobilisation support.

The composite developed is composed of monoacetylated cellulose nanocrystals (CNCs) and cellulose nanofibres (CNFs). To this end, the CNCs and CNFs will be mixed in proportions of 70:30, 60:40 and 50:50 (CNCs/CNFs); subsequently, the composites generated will be functionalised with dopamine hydrochloride at a concentration of 1 g/L for 4 h.

The preliminary yield obtained from the CNFs/CNCs@PDA composite synthesis process indicates that conditions with a ratio of 60:40 and 50:50 (CNFs:CNCs) allow for the recovery of 92.17% of the material after the reaction.

Characterisation using FTIR-ATR shows the appearance of characteristic polydopamine bands, such as the band at 1219 cm<sup>-1</sup> corresponding to C=O, at 1290 cm<sup>-1</sup> attributable to C-O, and at 3327 cm<sup>-1</sup> corresponding to OH and C-N. XPS spectroscopy detected a peak at 400 eV corresponding to N1s, confirming the functionalisation of the material

Acknowledgements: This research is supported by FONDECYT Regular 1231521 and partially supported by ANID doctoral grant 21240852

## Modelación dinámica de una planta de celdas reversibles de óxido sólido en Simulink con acoplamiento de curva solar real

M. Arce<sup>1</sup>, F. Huerta<sup>1</sup>, S. Díaz<sup>3</sup>, C. Pino-Muñoz<sup>2</sup>, J. Pérez-Correa<sup>1</sup>

<sup>1</sup>*Departamento de Ingeniería Química y Bioprocesos, Pontificia Universidad Católica de Chile, Santiago, Chile.*

<sup>2</sup>*Department of Earth Sciences and Engineering, Imperial College London, London, United Kingdom.*

<sup>3</sup>*Department of Chemistry and Biosciences, Aalborg Universitet, Fredrik Bajers Vej 7H, 9220, Denmark.*

marce1@uc.cl

La integración de energías renovables en los sistemas eléctricos actuales plantea desafíos significativos debido a su naturaleza intermitente, lo que afecta la estabilidad y la gestión de la red eléctrica. Esto ha impulsado el desarrollo de tecnologías de almacenamiento de energía que puedan equilibrar estas variaciones, garantizar la estabilidad de la red y mejorar la eficiencia de los sistemas.

Las celdas reversibles de óxido sólido (rSOC) han atraído interés por su capacidad para operar en modo celdas de combustible y en modo electrolizador según la demanda y oferta energéticas. Esto facilita la conversión bidireccional entre energía eléctrica y química. Al convertir electricidad en hidrógeno en modo electrolizador y reconvertir el hidrógeno almacenado en electricidad en modo celda de combustible, las rSOC permiten el almacenamiento y la recuperación de energía, equilibrando así las fluctuaciones de las fuentes renovables.

A pesar de lo anterior, la tecnología rSOC aún enfrenta limitaciones, como su bajo nivel de madurez tecnológica, TRL 5-7. Desde la perspectiva de la investigación, los modelos actuales de plantas rSOC no incluyen la respuesta dinámica de evaporadores e intercambiadores de calor. Dentro de estos modelos, sólo una fracción incluye control de procesos y de manera excesivamente simplificada. Esto impide determinar las constantes de tiempo del sistema en condiciones de operación realistas.

El objetivo de esta investigación es desarrollar un modelo dinámico integral de una planta rSOC que permita evaluar la interacción temporal entre el *stack* electroquímico y los principales equipos térmicos, identificando las constantes de tiempo del sistema y su respuesta frente a la variabilidad de la energía renovable. Para ello, se implementa un modelo que incorpora tanto el comportamiento dinámico del *stack* como el de los principales equipos de transferencia de calor y almacenamiento de hidrógeno. Otros equipos, como sopladores, condensadores, compresores, válvulas y bombas, se modelaron en estado estacionario. Todos estos modelos se integran en Simulink y se acoplan a una curva real de generación solar obtenida del parque fotovoltaico Diego de Almagro, en la región de Atacama, Chile. A partir de esta curva, se calcula la densidad de corriente que debe aplicarse al *stack*, determinando los flujos másicos de agua, hidrógeno y aire requeridos por la planta.

El modelo permite cuantificar las constantes de tiempo de la planta, el evaporador, los intercambiadores de calor, los calentadores eléctricos y el tanque de almacenamiento de hidrógeno. Así, se puede definir una región de operación compatible con la constante de tiempo del *stack*, lo que permitirá estudiar cómo varían los niveles de carga y descarga del tanque de hidrógeno y con qué velocidad puede responder el sistema a la variación temporal de la generación solar.

## Modelado 1-D de la evaporación no isobárica de líquidos criogénicos en tanques de almacenamiento

F. Huerta<sup>1</sup>, V. Vesovic<sup>2</sup>,

<sup>1</sup>*Departamento de Ingeniería Química y Bioprocesos, Pontificia Universidad Católica de Chile, [fnhuerta@uc.cl](mailto:fnhuerta@uc.cl)*

<sup>2</sup>*Department of Earth Science and Engineering, Imperial College London, [v.vesovic@imperial.ac.uk](mailto:v.vesovic@imperial.ac.uk)*

La energía solar y eólica son fuentes renovables intermitentes que presentan las menores emisiones de CO<sub>2</sub> por kWh de energía generada a lo largo de su ciclo de vida. Se proyecta que constituirán la mayoría de la generación eléctrica renovable para el año 2030. Sin embargo, su intermitencia requiere tecnologías de almacenamiento de energía para mejorar su factor de planta y evitar vertidos de energía. Entre las distintas tecnologías disponibles, el almacenamiento criogénico tiene dos aplicaciones principales: el almacenamiento de hidrógeno verde en fase líquida y el de energía renovable en aire líquido. En ambas aplicaciones, los líquidos criogénicos se almacenan en tanques con alta aislación térmica. A pesar de su alto aislamiento, los tanques reciben flujos de calor desde el entorno impulsados por diferencias de temperatura del orden de 200 K entre el ambiente y el líquido almacenado.

La transferencia de calor hacia el tanque calienta y evapora el líquido criogénico almacenado, cuyo vapor se acumula, lo que incrementa la presión interna del tanque. Una vez que el tanque alcanza su presión máxima de trabajo, el vapor generado debe liberarse. Este vapor, conocido como gas de ebullición (BOG), debe gestionarse adecuadamente. Entre las alternativas de manejo se encuentra una nueva licuefacción, que implica altos costos de inversión y operación. Otra opción es su eliminación, lo que conlleva pérdidas económicas y riesgos de seguridad. Por ello, es esencial optimizar el diseño y las condiciones de operación de estos tanques. Debido a la dificultad de realizar mediciones experimentales en tanques de líquidos criogénicos, su modelado es fundamental para minimizar el gas de ebullición en función de las variables de diseño y operación. No obstante, desarrollar modelos de orden reducido con capacidad explicativa resulta desafiante. Esto se debe a la interacción entre los múltiples fenómenos de transporte multifásicos entre las fases líquido y vapor, la evaporación y la transferencia de calor en la pared.

En esta investigación, se ha desarrollado un nuevo modelo unidimensional (1-D) dependiente del tiempo aplicable a la evaporación no isobárica de líquidos criogénicos [1]. Este modelo proporciona la evolución temporal de los perfiles de temperatura del vapor y el líquido, la presión en el tanque, el volumen de líquido y la tasa de evaporación. La convección natural se modela mediante fuentes de calor volumétricas, asumiendo mezcla radial instantánea en la fase vapor y un término de fuente uniforme en la fase líquida. El modelo 1-D se comparó frente a datos experimentales para la evaporación no isobárica de nitrógeno líquido (LN<sub>2</sub>) en un tanque a escala de laboratorio de 6.75 L [2]. Se consideraron escenarios experimentales de diferentes niveles de llenado y fluxes de calor externos. Al comparar el modelo 1-D con los experimentos y con las predicciones de un modelo de dinámica de fluidos computacional (CFD) más complejo [3], el modelo 1-D alcanzó una precisión comparable. Esto lo posiciona como el primer modelo 1-D disponible en la literatura capaz de predecir simultáneamente la presión y perfiles de temperatura. El modelo puede simular días de evaporación en menos de 10 segundos, lo que lo convierte en una herramienta eficaz para optimizar la razón de aspecto, el nivel de llenado y el rango de presiones de operación de tanques de almacenamiento de líquidos criogénicos.



## Modelación de la transferencia de masa electroquímica en membranas poliméricas para baterías de flujo redox de vanadio- hidrógeno

Barros, J.<sup>1\*</sup>, Huerta, F.<sup>1</sup>, Pino-Muñoz, C.<sup>2</sup>

<sup>1</sup>*Departamento de Ingeniería Química y Bioprocesos, Pontificia Universidad Católica de Chile.  
[fnhuerta@uc.cl](mailto:fnhuerta@uc.cl)*

<sup>2</sup>Department of Earth Science and Engineering, Imperial College London.

La transición hacia una matriz energética renovable plantea desafíos técnicos por la intermitencia de sus fuentes naturales, que se pueden mitigar mediante sistemas de almacenamiento de energía (ESS). Una de estas alternativas son las baterías de flujo redox (RFB) que almacenan electrolitos en tanques y generan o almacenan electricidad mediante reacciones reversibles en celdas electrolíticas. Su principal ventaja es el desacoplamiento entre capacidad y potencia, la primera depende del volumen del electrolito y la segunda del tamaño de la celda. Estos sistemas son fácilmente escalables y con un largo ciclo de vida, aunque poseen una baja densidad energética en comparación a otros sistemas electroquímicos (Alrededor de 15–25 W h/kg de electrolito).

A diferencia de las RFB tradicionales, las RFB híbridas sustituyen uno de los electrolitos líquidos por una fase gaseosa, lo que reduce el cruce de especies y la degradación del electrodo. Sin embargo, debido a que el transporte de agua en sistemas líquido-gas es más complejo, su modelación aún es limitada. Además, la estructura de las membranas PEM es altamente dependiente del contenido de humedad, lo que afecta la conductividad y el transporte iónico, especialmente en estados de carga extremos (<20% o >80%) y en configuraciones híbridas, donde un lado está expuesto a la fase gaseosa y es más propenso a la deshidratación.

En este trabajo se presenta el desarrollo de un modelo de transporte 1-D transiente de una RFB de vanadio (VRFB) con diseño de flujo paralelo o *flow-by*. La solución electrolítica se distribuye y reacciona en electrodos porosos, donde la corriente se transmite a través del sólido poroso y el electrolito que llena los poros. Se asumió un modelo isotérmico, con solución diluida, membrana completamente hidratada, y sin *crossover* de especies redox en la membrana, además de protones. El modelo está basado en ecuaciones de conservación de masa y cinética electroquímica, discretizadas mediante el método de volúmenes finitos, para resolver el perfil de concentraciones de 6 especies a través del espesor de la celda. El transporte de especies se modela mediante la ecuación de Nernst-Planck y la cinética de reacción mediante Butler-Volmer. En los electrodos, los potenciales iónicos y electrónicos se resolvieron mediante la conservación de corriente en todo el sistema: es decir, la suma de las divergencias de la densidad de corriente en la fase sólida y líquida es igual a cero. El sistema completo constituye un sistema de ecuaciones diferenciales algebraicas, cuya solución numérica se implementó de forma modular. Se consideraron los dominios principales de la batería (ánodo, membrana y cátodo) en un código de Python basado en programación orientada a objetos. Una vez finalizado el estudio, se publicará el código, lo que permitirá utilizarlo como punto de partida para simular otros sistemas RFB, que suelen estar restringidos a softwares de pago. El modelo resuelve 1 segundo de proceso en 5.9 segundos de simulación, alcanzando un balance entre simplicidad y precisión.

A futuro, se espera implementar este modelo en una RFB de Vanadio-Hidrógeno (HVRFB) con el objetivo de modelar a detalle el contenido de humedad y cruce de especies dentro de la membrana, que afectará tanto la conductividad iónica como la difusividad de las especies dentro de ella. Para este modelo, será necesaria la modelación en detalle de las condiciones de borde en la interfaz líquido-membrana y en la interfaz membrana-gas. Se espera que el modelo propuesto de HVRFB mejore el realismo respecto a modelos de orden reducido en condiciones de carga extrema. Además, se espera que el modelo permita identificar las condiciones de operación que ayudan a mitigar la deshidratación de la membrana en el lado del ánodo y explicar el comportamiento de la batería en condiciones de carga extrema.



## Modelamiento de la transferencia de calor conjugada en almacenamiento no isobárico de hidrógeno

Miguel Ponce de León<sup>1</sup>, Felipe Huerta<sup>1</sup>

<sup>1</sup>*Departamento de Ingeniería Química y Bioprocesos, Pontificia Universidad Católica de Chile, Santiago, Chile, [miguel.poncedeleon@uc.cl](mailto:miguel.poncedeleon@uc.cl).*

El hidrógeno verde es un vector energético fundamental para la transición hacia un sistema energético más sostenible. Su importancia radica en que permite almacenar y transportar energía proveniente de fuentes renovables sin emisiones directas. Su almacenamiento en fase líquida representa una solución eficiente debido a que su densidad a presión atmosférica es 800 veces mayor que el hidrógeno gaseoso en condiciones estándar de presión y temperatura. Sin embargo, al encontrarse en temperaturas criogénicas de 20,3 K requiere ser almacenado en tanques altamente aislados térmicamente. El principal desafío ingenieril del almacenamiento de hidrógeno líquido es el ingreso de calor impulsado por la diferencia de temperatura entre los alrededores y el líquido. Esto produce el calentamiento y la evaporación del hidrógeno en forma de gas de ebullición (BOG).

En condiciones isobáricas, el BOG se remueve mientras se genera. Debido a que la licuefacción de hidrógeno es muy compleja, en almacenamiento a pequeña y mediana escala muchas veces el hidrógeno gaseoso se pierde, generando pérdidas económicas. En sistemas no isobáricos, se produce la autopresurización del tanque y eventualmente la liberación de BOG para evitar alcanzar la presión máxima permitida de trabajo (MAWP). Esto conlleva problemas de seguridad y también pérdidas de hidrógeno. Por lo tanto, minimizar las pérdidas de BOG es fundamental. A la fecha, no se dispone de modelos predictivos lo suficientemente robustos que permitan predecir la presión y temperatura de las fases gaseosa y líquida en el sistema. En particular, aún no se describe adecuadamente la evolución espacial y temporal de la transferencia de calor conjugada entre las paredes del tanque y las fases líquida y gaseosa del hidrógeno. El modelo se basa en un modelo previo desarrollado por Huerta y Vesovic (2024), que fue validado con los experimentos de Seo y Jeong (2010) con nitrógeno líquido, obteniendo un buen ajuste.

En esta investigación se implementa un modelo de dinámica de fluidos computacional 2-D no estacionario para simular el almacenamiento de hidrógeno líquido en tanques criogénicos. El modelo considera la transferencia de calor en las paredes, la presurización y los fenómenos de transporte en las fases líquida y vapor mediante un enfoque Euler–Euler. Este enfoque se utiliza debido a su mejor estabilidad en casos donde los perfiles de velocidad y temperatura están acoplados a la subida de presión sin necesidad de una malla muy fina como lo hace el método de *Volume of Fluid*. El modelo se implementa mediante el *toolbox* OpenFOAM, mediante el *solver* chtMultiRegionTwoPhaseEulerFoam. Se simula una evaporación de 3600 segundos de manera de alcanzar el estado estacionario en un tanque de 20 cm de altura y 12 cm de radio. La pared se modela con las propiedades termofísicas del acero inoxidable y un coeficiente de transferencia de calor que incluye la resistencia aportada por el resto de las capas de la pared de 0.09 W/m<sup>2</sup> K. La dependencia de la temperatura de saturación con la presión se implementó mediante la ecuación de Antoine.

La simulación generará perfiles detallados de temperatura y velocidad, permitiendo caracterizar con precisión la estratificación térmica del fluido y la transferencia de calor conjugada. El aporte fundamental de este modelo es la cuantificación del coeficiente de partición de calor en la pared, que indica cómo el calor entrante se distribuye hacia el líquido y el vapor. Predecir esta cantidad, es fundamental para incorporarla en modelos de orden reducido existentes que resuelven el mismo problema en una milésima del tiempo computacional

## Identificación del Fenómeno Gobernante en un Proceso Fotoelectro-Fenton Heterogéneo Usando Catalizadores de $\text{Fe}_3\text{O}_4$ - Quitosano

F. Gamboa-Savoy<sup>1</sup>, A. Cabrera-Reina<sup>2</sup>, A. Thiam<sup>1</sup>

<sup>1</sup> Instituto Universitario de Investigación y Desarrollo Tecnológico (IDT), Universidad Tecnológica Metropolitana (UTEM), Ignacio Valdivieso 2409, San Joaquín 8940577, Región Metropolitana, Chile.

<sup>2</sup> Departamento de Ingeniería química, Universidad de Almería, Ctra. Sacramento s/n, Almería, España.

*felipe.gamboas@utem.cl*

Los procesos fotoelectro-Fenton heterogéneos (FEFH) han emergido como una alternativa prometedora para la eliminación de contaminantes emergentes (CE) en agua, gracias a la generación de radicales altamente oxidantes mediante tecnologías combinadas (electro-Fenton heterogéneo y fotocatalisis). En los procesos FEFH, la eficiencia depende principalmente del tipo de catalizador utilizado, por lo que se han dedicado grandes esfuerzos en desarrollar catalizadores activos a base de hierro que promuevan los procesos Fenton heterogéneos y que tengan actividad fotocatalítica. Entre la variedad de materiales reportados en la literatura, los catalizadores compuestos por nanopartículas de óxidos de metales de transición soportadas en estructuras porosas han captado el interés de diversos investigadores, debido a su facilidad de manipulación y recuperación al finalizar el proceso. De hecho, se ha reportado su capacidad de eliminación de contaminantes mediante procesos fotoelectro-Fenton heterogéneos. Sin embargo, los fenómenos que controlan la cinética global del FEFH, como la difusión intrapartícula, no han sido estudiados en profundidad, limitando el desarrollo de modelos predictivos robustos y que permitan escalar este tipo de procesos.

En este trabajo, se propone la síntesis y caracterización del catalizador a base de nanopartículas de  $\text{Fe}_3\text{O}_4$  soportadas sobre perlas de quitosano, así como un estudio exhaustivo del proceso FEFH para la eliminación de sulfametoxazol en agua utilizando las perlas de  $\text{Fe}_3\text{O}_4$ -quitosano. Los catalizadores se caracterizaron mediante una serie de técnicas (SEM, EDS, FT-IR, XRD y BET) y luego se utilizaron para la identificación del fenómeno gobernante del proceso fotoelectro-Fenton heterogéneo para la eliminación de sulfametoxazol como contaminante modelo. Los resultados de las caracterizaciones del catalizador mostraron una superficie rugosa con pequeñas nanopartículas depositadas en su superficie, mientras que se detectó la presencia de los elementos Fe, C y O en su estructura. Además, el análisis BET para el catalizador mostró una isoterma de tipo IV con un bucle de histéresis H2, con un radio de poro del catalizador de 1,9274 nm. Posteriormente, se utilizaron los catalizadores sintetizados para la eliminación de sulfametoxazol en agua mediante procesos FEFH. Se estudiaron algunos parámetros operacionales como la velocidad de agitación (500, 800 y 1100 rpm), la concentración de catalizador (0,5, 1 y 3 g L<sup>-1</sup>), el tamaño del catalizador (0,5, 1, y 2 mm de diámetro) y la relación molar de Fe:quitosano presente en el catalizador (10, 15 y 20 mmol de Fe total/ g de quitosano). Según los resultados obtenidos, se lograron eficiencias de eliminación del 95 % del contaminante en 90 minutos de tratamiento. Además, se ajustaron los datos de degradación a distintos modelos cinéticos, como el modelo primer orden, segundo orden, Langmuir-Hinshelwood (LH) y BMG, así como modelos de difusión en la película (ILFD) y de difusión intrapartícula (IIPD). En todos los casos, los modelos que representaron de mejor manera los datos cinéticos fueron el modelo (ILFD) y el modelo LH, con valores  $R^2$  entre 0.972-0.999 y 0.987-0.999, respectivamente. De hecho, estos resultados son consistentes con los perfiles de concentración obtenidos, pues en el caso del estudio de velocidad de agitación, aumentar de 500 a 800 rpm mejoró la eficiencia de eliminación del contaminante de 80 a 95 %.

## **Puesta en marcha de reactores SBR para desnitrificación autótrofa y mixotrófica aplicada al tratamiento de aguas subterráneas contaminadas.**

Á. Samaniego<sup>1</sup>, C. Huiliñir<sup>1</sup>, C. Gallardo<sup>1</sup>, L. Guerrero<sup>2</sup>

<sup>1</sup>*Green Technologies Research Group, Facultad de Ingeniería y Ciencias Aplicadas, Universidad de los Andes, Chile.*

<sup>2</sup>*Departamento de Ingeniería Química y Ambiental, Universidad Técnica Federico Santa María, Chile*

[alvaro.samaniego@uandes.cl](mailto:alvaro.samaniego@uandes.cl)

Las aguas subterráneas representan una fuente vital de abastecimiento hídrico en regiones agrícolas y rurales de Chile. Sin embargo, su calidad se ha visto comprometida por la presencia creciente de nitrato ( $\text{NO}_3^-$ ) y contaminantes emergentes (CEs), incluyendo fármacos, pesticidas y compuestos de cuidado personal. Estos compuestos, se encuentran en concentraciones que varían típicamente entre 1-10  $\mu\text{g/L}$ , no solo son persistentes en el ambiente, sino que también escapan a los tratamientos convencionales como; la ósmosis inversa, electrodiálisis, reducción química, entre otros, y su combinación con altas cargas de nitrato plantea un desafío técnico y ambiental relevante.

En este contexto, se propone un sistema de tratamiento basado en reactores secuenciales por lotes (SBR) operados en condiciones autótrofas y mixotróficas, con azufre elemental ( $\text{S}^0$ ) como principal donador de electrones. Este estudio presenta los resultados obtenidos durante la etapa de puesta en marcha y adaptación microbiana de dichos reactores, con énfasis en la estabilización de la actividad desnitrificante.

Se emplearon dos SBR de 2 L de volumen útil, inoculados con lodos activados de una planta de tratamiento de residuos pecuarios, y operados con una mezcla inicial 50% agua sintética y 50% inóculo. El agua sintética contenía 50 mg/L de  $\text{N-NO}_3^-$ , junto con nutrientes inorgánicos ( $\text{K}_2\text{HPO}_4$ ,  $(\text{NH}_4)_2\text{HPO}_4$ ,  $\text{NaHCO}_3$ ,  $\text{MgCl}_2 \cdot 6\text{H}_2\text{O}$ ,  $\text{FeSO}_4 \cdot 7\text{H}_2\text{O}$ ). Los reactores operaron en condición autótrofa, usando  $\text{S}^0$  como sustrato (se pretende adicionar etanol como fuente de carbono externo, configurando un sistema mixotrófico).

Durante más de 8 semanas, se evaluaron parámetros clave como  $\text{N-NO}_3^-$ ,  $\text{N-NO}_2^-$ ,  $\text{S-SO}_4^{2-}$ , SST, SSV y ORP, verificando la actividad desnitrificante mediante el seguimiento de la remoción de nitrato y la estabilidad de los ciclos. Se alcanzaron tasas de remoción cercanas al 95%, comparables con referencias de estudios previos como los realizados por Kostyrsia et al. 2018 o Yañez et al. 2021. Cuando el comportamiento se vuelve replicable y estable (variaciones menores al 5% entre ciclos consecutivos), se da por finalizada la etapa de adaptación. Esta investigación se enmarca en el proyecto FONDECYT 1241199.

## **Ftalocianina de Hierro Penta Coordinada con Nitropiridina como Electrocatalizador bifuncional para las Reacciones de Reducción y Evolución de Oxígeno.**

**N. Troncoso<sup>1</sup>, Juan Carrasco <sup>1</sup>, Cesar Zúñiga<sup>1</sup>, J.H Zagal<sup>1</sup>, Federico Tasca<sup>1\*</sup>.**

<sup>1</sup>*Facultad de Química y Biología, Departamento de Química de los Materiales, Universidad de Santiago de Chile, Casilla 40, Correo 33, Sucursal Matucana, Santiago de Chile 9170022, Chile.*

*nicolas.troncoso.c@usach.cl*

Las celdas combustibles y baterías de metal-aire son dispositivos que fueron creados para disminuir la producción de gases de efecto invernadero como el CO<sub>2</sub> proveniente de los combustibles fósiles. Los dispositivos de conversión energética (DCE), han surgido como una alternativa para producir energía eléctrica sin contaminar, a partir de hidrógeno (H<sub>2</sub>) y oxígeno (O<sub>2</sub>). En estos dispositivos, la reacción de reducción de oxígeno (ORR, en el cátodo de celdas combustibles) y evolución de oxígeno (OER, en el ánodo de electrolizadores de agua), son cinéticamente muy lentas respecto a la reacción de oxidación de hidrogeno (HOR), y reducción de hidrogeno (HRR), respectivamente<sup>1</sup>. Por lo tanto, se requiere incrementar la velocidad de la ORR y OER. El mejor catalizador disponible es el platino, pero su abundancia natural es limitada, incrementando su costo comercial. Los complejos MN<sub>4</sub> (M=metal de transición) han surgido como una alternativa para reemplazar los catalizadores basados en el Pt. En 1967 Jasinski demostró que las ftalocianinas de cobalto (CoPc) son activas para la ORR<sup>2</sup>. Desde ese momento, diversos complejos macrocíclicos han sido testeados en medios ácidos y básicos tanto para la ORR como OER. La correcta determinación de aspectos estructurales en los MN<sub>4</sub> permite modificar racionalmente su carácter *electron- dador* y *electron-atractor*. En este contexto, añadir un quinto ligando axial conectado al metal central, es una estrategia utilizada para favorecer su actividad catalítica para la ORR/OER, impactando además en su concentración superficial en sustratos carbonosos<sup>3</sup>.

Se realizaron experimentos de XPS (X- ray photoelectron spectroscopy), XAS (X-ray absorption spectroscopy), para determinar la presencia de Fe(II)/(III) en los sustratos. Junto a ello, se realizaron caracterizaciones electroquímicas y simulaciones DFT.

Mediante XPS se demostró que NPy ejerce un alto poder electrón-atractor sobre el centro metálico. Esto aumenta la concentración de Fe(III) respecto a Fe(II) (relación Fe<sup>2+</sup>/Fe<sup>3+</sup>), según la deconvolución del espectro entre 708 eV – 725 eV, explicando un desplazamiento en el  $E^0\text{Fe(III)/(II)}$  a valores positivos. XAS y XANES indicaron que existe una menor densidad electrónica en los sitios FeN, causando una menor interacción con el O<sub>2</sub>. Por otro lado, los estudios electrocatalíticos de la ORR indican que en medio básico FePc-NPy-CNT presentan mejor actividad que el platino utilizado comúnmente (Pt/C 20%) en términos de sobrepotencial ( $\eta$ ) y valores de TOF, con valores similares. Los cálculos de DFT indican que existe una menor interacción del Fe con el O<sub>2</sub> y mayor con el H<sub>2</sub>O, la menor densidad electrónica del centro metálico no favorece la OER.

### **Agradecimientos**

ANID/FONDECYT N° 1220988, y ANID/FONDECYT-POSTDOC N° 3220215.

## Valorización de residuos lácteos para la remoción de arsénico en agua mediante procesos de adsorción

D. Andi, L. Yohai, A. Cristóbal

*Instituto de Investigaciones en Ciencia y Tecnología de Materiales (INTEMA), Mar del Plata, 7600,  
Argentina  
andigrefa@fi.mdp.edu.ar*

La presencia de arsénico (As) en aguas superficiales y subterráneas constituye un riesgo significativo para la salud pública, dado que puede incorporarse a la cadena alimentaria a través del riego con aguas contaminadas o por consumo directo. La exposición a concentraciones superiores al límite establecido por la OMS para agua de consumo ( $0,01 \text{ mg} \cdot \text{L}^{-1}$ ) se asocia, a corto plazo, con intoxicaciones y afecciones dérmicas y, a largo plazo, con diversos tipos de cáncer y enfermedades cardiovasculares. Si bien existen técnicas para la remediación de aguas contaminadas, como procesos fisicoquímicos, biológicos y filtración por membranas, su elevado costo y complejidad operativa limitan su aplicación en escenarios donde se requieren tecnologías simples, robustas y de fácil gestión. En este contexto, la biosorción surge como una alternativa viable debido a su simplicidad, bajo costo y aporte a la sostenibilidad ambiental. En el presente estudio, se evaluó el uso de lodo lácteo como precursor para la obtención de un carbón funcionalizado con Fe. Para ello, el lodo fue inicialmente impregnado con una disolución de Fe ( $0,05 \text{ mol} \cdot \text{L}^{-1}$ ) y posteriormente tratado térmicamente a  $400^\circ\text{C}$  durante 2 h en atmósfera de aire. Durante este proceso, se favorece la formación de enlaces estables como óxidos de hierro, tal es el caso de la hematita ( $\alpha\text{-Fe}_2\text{O}_3$ ) y la maghemita ( $\gamma\text{-Fe}_2\text{O}_3$ ), lo que minimiza la lixiviación del Fe al agua y asegura la eficiencia del tratamiento a largo plazo, de acuerdo con la literatura científica. El material obtenido (LC-Fe) se empleó como adsorbente en la remoción de arsénico (V) en medio acuoso y se determinaron parámetros de adsorción, incluyendo relación masa de adsorbente/concentración de As, pH óptimo, y se realizaron estudios cinéticos y de equilibrio. La concentración de As residual se cuantificó por espectrofotometría UV-Vis empleando el método del azul de molibdeno. Las condiciones óptimas de biosorción fueron: 0,1 g de adsorbente en 20 mL de una disolución de As de  $10 \text{ mg} \cdot \text{L}^{-1}$ , pH 4 y tiempo de contacto de 3 h entre el material y la disolución de As. La cinética se ajustó a un modelo de pseudo-segundo orden y la isoterma de adsorción se describió adecuadamente mediante el modelo de Langmuir, con una capacidad máxima de adsorción ( $Q_e$ ) de  $1,6 \text{ mg} \cdot \text{g}^{-1}$ , comparable con la capacidad de adsorción de  $1,5 \text{ mg} \cdot \text{g}^{-1}$ , reportada para el carbón activado comercial. Estos resultados evidencian el potencial del LC-Fe como adsorbente novedoso de As. El fin último de esta investigación es su incorporación, una vez cargado con As, en una matriz cerámica para la fabricación de ladrillos, transformándolo en un producto estable y seguro. Este enfoque integra la adsorción en una estrategia de economía circular, evitando impactos ambientales secundarios.

**Agradecimientos:** Los autores agradecen el financiamiento del Consejo Nacional de Investigaciones Científicas y Técnicas (CONICET) a través de los proyectos PIP2021-0739 y PIBAA-1004. Asimismo, se agradece a las Dras. Belén Pirola y Erica Schmidt (INTI Rafaela) por la provisión de la materia prima empleada en este estudio.



## Modelación CFD de la transferencia de calor y momentum interfacial durante la evaporación de hidrógeno verde líquido en un tanque de almacenamiento

A. Camilo<sup>1</sup>, F. Huerta<sup>2</sup>

<sup>1</sup>*Departamento de Ingeniería Química y Bioprocesos, Pontificia Universidad Católica de Chile*

[antonia.camilo@uc.cl](mailto:antonia.camilo@uc.cl)

<sup>2</sup>*Departamento de Ingeniería Química y Bioprocesos, Pontificia Universidad Católica de Chile*

[fnhuerta@uc.cl](mailto:fnhuerta@uc.cl)

El cambio climático derivado del aumento de las emisiones de dióxido de carbono plantea desafíos importantes que necesitan una transformación profunda de la producción, distribución y consumo de energía. En este contexto, los vectores energéticos son claves para descarbonizar sectores difíciles de electrificar, como el transporte pesado y la industria. Lo que acompañado del bajo costo de la energía solar y eólica en Chile hace del hidrógeno verde un vector promisorio. Debido a la baja densidad del hidrógeno gaseoso a presión atmosférica, se requieren presiones sobre 350 bar para alcanzar densidades gravimétricas moderadas de  $15 \text{ kg m}^{-3}$ . Esto requiere tanques de alto costo e impide el almacenamiento de volúmenes sobre  $350 \text{ m}^3$ . En contraste, el almacenamiento criogénico de hidrógeno líquido en tanques aislados térmicamente es una alternativa prometedora pues alcanza  $71 \text{ kg m}^{-3}$  a presión atmosférica. En este contexto, destacan ciertos desafíos como la presencia de *boil-off-gas*, al evaporarse líquido almacenado debido a la transferencia de calor desde el exterior, generando desafíos operacionales, de seguridad de procesos y pérdidas económicas. Por lo tanto, optimizar el diseño y la operación de tanques de almacenamiento de hidrógeno líquido es crucial para acelerar la transición energética.

Para poder analizar el almacenamiento de hidrógeno verde líquido, se implementó un modelo CFD multifásico aplicado a nitrógeno criogénico, con el objetivo de validar perfiles de presión y temperatura reportados en la literatura. Se utilizó el software OpenFOAM por ser gratuito, de código abierto y transparente. Las simulaciones del modelo CFD se compararon con un modelo CFD bidimensional no isobárico simplificado, que desprecia los fenómenos de transporte interfaciales y en la fase gas. El nuevo modelo multifásico muestra que la mayor parte del ingreso de calor externo a través de la pared en contacto con el vapor se transfiere a la interfase líquido-gas. Además, el cambio de fase y el arrastre de la interfase líquida por el movimiento del gas no afectan mayoritariamente el perfil de temperatura del líquido justo bajo la interfase. Por otra parte, el flujo de vapor criogénico sobre la interfase y cerca de la pared aumenta la transferencia de calor en esta región, generando un perfil de tasa de evaporación no uniforme en la interfase. El modelo se validó con los datos experimentales a escala de laboratorio. Desde la perspectiva académica, los perfiles detallados de velocidad y temperatura del modelo CFD permiten validar supuestos de modelos más simples y ajustar coeficientes de transferencia calor interfaciales. Desde la perspectiva industrial, el modelo es aplicable para optimizar el diseño y operación de tanques de almacenamiento de líquidos criogénicos de geometría arbitraria.



## Extracción de fármacos desde agua utilizando líquidos iónicos.

M. Garrido, G. Merlet

<sup>1</sup>Facultad de Ingeniería Agrícola, Universidad de Concepción, Chillán, Chile. Vicente Mendez 595, Chillán, Región de Ñuble, Chile.

e-mail: [Mgarrido2017@udec.cl](mailto:Mgarrido2017@udec.cl)

La crisis hídrica es una de las problemáticas ambientales más urgentes del siglo XXI, intensificada por el cambio climático, la creciente demanda de agua, la contaminación y una gestión ineficiente. Esta situación compromete la salud, la seguridad alimentaria y el desarrollo sostenible (United Nations Water, 2020), haciendo indispensable una gestión integral del recurso hídrico. En este contexto, resulta fundamental conservar y recuperar el agua, especialmente frente a la presencia de contaminantes emergentes como los fármacos, que no son eliminados eficazmente por los tratamientos convencionales y representan una amenaza para los ecosistemas y la salud humana (Metcalf & Eddy, 2014). Por ello, se requiere el desarrollo de tecnologías avanzadas y sostenibles que garanticen la calidad del agua y su uso responsable.

El objetivo de estudio es abordar la factibilidad de llevar a cabo un proceso de extracción líquido/líquido de fármacos presentes en agua, mediante la implementación de líquidos iónicos como fase extractante. Para ello, se emplea una estrategia metodológica que comienza con un *screening* computacional utilizando el software COSMO-RS, con el objetivo de reducir la amplia gama de líquidos iónicos disponibles y seleccionar aquellos con mayor afinidad por los compuestos de interés y que cumplan con la condición de ser hidrofóbicos. Este procedimiento se basa en el análisis de los coeficientes de actividad de los líquidos iónicos seleccionados.

El análisis COSMO-RS permitió seleccionar líquidos iónicos (ILs) hidrofóbicos y comerciales en base a su capacidad de solvente a dilución infinita ( $C^\infty$ ) y a su compatibilidad termodinámica. Entre las combinaciones evaluadas, [4-methyl-n-butylpyridinium][BF<sub>4</sub>] fue el mejor candidato, con los mayores  $C^\infty$  para los tres fármacos (0,71 ibuprofeno; 2,73 naproxeno; 2,30 paracetamol), y coeficientes de actividad en el IL que confirman su afinidad:  $\ln \gamma = -0,312$  (naproxeno),  $-0,134$  (paracetamol) y  $+1,032$  (ibuprofeno), mientras que el agua presenta  $\ln \gamma + 1,330$  en el IL (baja miscibilidad), condición favorable para extracción L/L. En contraste, en agua los fármacos muestran  $\ln \gamma$  muy altos (9,217 naproxeno; 9,946 ibuprofeno; 3,746 paracetamol), evidenciando su baja afinidad por la fase acuosa y su preferencia relativa por el IL. En conjunto, los altos  $C^\infty$  y los  $\ln \gamma$  (negativos o mucho menores en el IL que en agua) sustentan que [4-MBPyl][BF<sub>4</sub>] ofrece la mejor ventana termodinámica para la extracción de estos fármacos.

En estas pruebas, se emplea una mezcla acuosa (1 mL) de ibuprofeno, naproxeno y paracetamol en concentraciones de 0,1, 1 y 10 ppm, preparada con agua destilada, y se extrae con un volumen equivalente (1 mL) de los líquidos iónicos seleccionados. La eficiencia de extracción se determinó comparando las concentraciones iniciales y finales de los fármacos en la fase acuosa mediante espectrofotometría UV-VIS, utilizando curvas de calibración previamente determinadas para cada uno de los fármacos.

## Environmental and Health Risks of Trace Elements in Soil Dust and Coarse Particulate Matter in Schools of Quintero-Puchuncaví, an Industrial Sacrifice Zone in Central Chile

F. González<sup>1</sup>, M. Leiva<sup>2</sup>, A. Valdez<sup>3</sup>, F. Lobos<sup>2</sup>, C. Calisto<sup>2</sup>, R. Toro<sup>2</sup>

<sup>1</sup>Ministerio del Medio Ambiente, <sup>2</sup>Universidad de Chile, Facultad de Ciencias, <sup>3</sup>Comisión Chilena de Energía Nuclear.

[fiorellai.gonzalezv@gmail.com](mailto:fiorellai.gonzalezv@gmail.com) [manleiva@uchile.cl](mailto:manleiva@uchile.cl) [ana.valdes@cchen.cl](mailto:ana.valdes@cchen.cl) [felipe.lobos@ug.uchile.cl](mailto:felipe.lobos@ug.uchile.cl)  
[rtoro81@uchile.cl](mailto:rtoro81@uchile.cl)

Industrial Sacrifice Zones represent extreme cases of environmental injustice where communities are chronically exposed to toxic emissions from clustered industrial facilities. Quintero-Puchuncaví, on the central coast of Chile, exemplifies this condition, with schools located near smelters, refineries, power plants, and petrochemical terminals. In this study, we conducted a multi-matrix risk assessment of trace elements in soils, indoor settled dust, and settleable particulate matter (SPM) from six schools, sampled during winter and summer of 2023. Indoor dust and soil samples were collected using a plastic sampling spatula, whereas SPM was sampled with passive samplers based on the UNC (University of North Carolina) design.

To minimize disruption to normal school functioning and respect the voluntary nature of their participation, only one indoor dust and SPM sample was collected per school per campaign. Given the small sample size, indoor dust and SPM are reported as singular values for warm and cold seasons. In contrast, soil samples were collected only in winter, with three to four per educational institution, enabling statistical analysis using mean and standard deviation.

Elemental concentrations were determined by ICP-MS, and used to determine environmental impact through Enrichment Factors (EF), Geoaccumulation indices (Igeo), and health risk assessment by U.S. EPA-based health risk models for potential risks through ingestion, inhalation, and dermal pathways.

Results show extreme enrichment of Cd (EF up to 9,904), Cu (EF up to 408), and Pb (EF up to 143), particularly in SPM, which carried the highest contamination levels (summer Cu >5,000 mg/kg; Ni >1,000 mg/kg). Non-carcinogenic hazard quotients were dominated by Cu (HQ up to 137), while carcinogenic risks were driven by Ni, As, and Cr, with incremental lifetime cancer risks (ILCR) exceeding  $10^{-4}$ —and reaching  $10^{-3}$ —during summer at schools in the valley of the mountain range. Indoor dust showed intermediate enrichment and improbable health risks in most cases, confirming its role as a critical exposure pathway indoors, whereas soils functioned as long-term reservoirs facilitating the resuspension of pollutants.

These findings reveal that schoolchildren in Quintero-Puchuncaví face potential health risks above international thresholds, and environmental concentrations of trace elements are extremely high, particularly in the case of SPM in school's environment. The study underscores the need for integrated interventions, including emission control and dust management in schools, while drawing attention to the environmental health disparities faced by low-density-population communities in sacrifice zones. (Los Maquis and Puculan), highlighting that they may be more severely affected by pollution than traditionally studied areas with larger populations (Quintero and Puchuncaví).

## **Impacto selectivo de aniones en la reacción de reducción de oxígeno en electrodos modificados con ftalocianinas de hierro y ftalocianina de cobalto absorbidas en nanotubos de carbono**

Juan Carrasco<sup>1</sup>, C. Zúñiga Loyola<sup>1</sup>, N. Troncoso<sup>1</sup>, F. Tasca<sup>1\*</sup>.

<sup>1</sup>Depto. de Química de los Materiales, Universidad de Santiago de Chile, Casilla 40, Correo 33, Sucursal Matucana, Santiago de Chile 9170022, Chile.

Juan.carrasco.h@usach.cl

### RESUMEN

El uso de combustibles fósiles contribuye significativamente a la contaminación por CO<sub>2</sub>. Las celdas de combustible surgen como una alternativa sostenible, ya que generan electricidad y agua sin emisiones contaminantes. Sin embargo, su eficiencia se ve limitada por la reacción de reducción de oxígeno (ORR) en el cátodo, que es seis veces más lenta que la oxidación del hidrógeno (HOR) en el ánodo. Para acelerar la ORR se requieren catalizadores, siendo el platino (Pt) el más activo conocido. No obstante, su elevado costo y escasez impulsan la búsqueda de alternativas más accesibles y económicas, entre las cuales destacan los complejos MN<sub>4</sub>, como la ftalocianina de hierro (FePc), aunque su estabilidad en medio ácido sigue siendo un desafío.

Este estudio evalúa el efecto de distintos aniones en un electrolito alcalino sobre la actividad catalítica de FePc y CoPc soportadas en nanotubos de carbono durante la reacción de reducción de oxígeno (ORR). Para ello, se emplearon electrolitos de NaCl y NaOH en diversas concentraciones, utilizando una celda de tres electrodos y técnicas de voltametría cíclica y curvas de polarización.

Los resultados muestran que los aniones Cl<sup>-</sup> y OH<sup>-</sup> modifican de forma distinta los potenciales formales de FePc y CoPc. En FePc, el aumento de OH<sup>-</sup> desplaza el E<sub>0</sub>'M(I)/(II) hacia valores más positivos, mientras que el Cl<sup>-</sup> genera un aumento en el potencial de inicio (Eonset) de la ORR. Estos efectos sugieren una interacción específica entre los aniones y el centro metálico, posiblemente relacionada con procesos de desmetalación o bloqueo de sitios activos.

En conclusión, la naturaleza del anión en el electrolito alcalino influye directamente en la actividad y los potenciales redox de los complejos MN<sub>4</sub>, aportando información relevante para optimizar su desempeño como catalizadores en la ORR.

## Evaluación del reciclaje químico de plásticos residuales a través de procesamiento termoquímico por pirólisis catalítica para la producción de olefinas livianas

Sanhueza F<sup>1,2</sup>, Azócar L<sup>1,2</sup>, Medina G<sup>1</sup>, Sandoval F<sup>2</sup>, Toro C<sup>3</sup>

<sup>1</sup> Departamento de Química Ambiental, Facultad de Ciencias, Universidad Católica de la Santísima Concepción (UCSC), Chile.

<sup>2</sup> Universidad Católica de la Santísima Concepción, Centro de Energía, Concepción, Chile.

<sup>3</sup> Centro de Investigación de Polímeros Avanzados (CIPA), Concepción, Chile.

*fsanhueza@doctorado.ucsc.cl*

La producción de plásticos depende en gran medida de la obtención de compuestos como olefinas y aromáticos derivados del refinamiento del petróleo por la industria petroquímica. Sin embargo, la escasa incorporación de estos materiales a la economía circular y las limitaciones del reciclaje mecánico han generado una importante acumulación de plástico, lo que afecta negativamente al ecosistema. Lo anterior ha impulsado el interés en el desarrollo de nuevas tecnologías como el reciclaje químico, en particular la pirólisis catalítica. Este estudio evaluó el reciclaje químico de plásticos residuales mediante la pirólisis catalítica para la producción de olefinas livianas.

Las muestras (HDPE, LDPE, PP, PS y PET) fueron lavadas, secadas a 25 °C y molidas hasta obtener un tamaño de partícula entre 425 µm y 1,80 mm. Posteriormente, fueron evaluadas mediante análisis TGA–DSC (PerkinElmer STA 6000) con el propósito de estudiar la degradación térmica de los plásticos, la estabilidad del catalizador y el efecto del uso de aditivos (CaO, caolinita y KH<sub>2</sub>PO<sub>4</sub>) orientados a mitigar su desactivación. Con los resultados obtenidos, se seleccionaron preliminarmente las condiciones de operación y el polímero con mayor potencial para el estudio de producción de olefinas livianas en un reactor piloto de pirólisis catalítica, evaluando el efecto de la temperatura (500–700 °C) y el tiempo de residencia (1–14 s) sobre el rendimiento gaseoso mediante un barrido experimental. El producto gaseoso obtenido fue analizado mediante GC–MS y GC–TCD.

Los ensayos de TGA mostraron que la mayor pérdida de masa se observó en LDPE > HDPE > PS > PP > PET. Los análisis realizados para evaluar el efecto de los aditivos en disminuir el ensuciamiento por coque del catalizador no mostraron resultados concluyentes, lo cual puede asociarse a la baja cantidad de masa usada y al corto tiempo de reacción en el estudio TGA/DSC. Aunque el LDPE presentó una alta pérdida de masa, fue descartado por la complejidad de su pretratamiento, que requiere nitrógeno líquido para su trituración. Por lo anterior, se seleccionó el HDPE para el estudio de pirólisis piloto, debido a su alta degradación térmica y a su menor ensuciamiento del catalizador. Los resultados permitieron identificar compuestos en el rango C<sub>2</sub>–C<sub>7</sub>, entre los que destacan etileno y propileno como las principales olefinas livianas en la fracción gaseosa de la pirólisis piloto. Además, En base a los resultados obtenidos, se seleccionaron rangos de operación entre 600–700 °C y 2–10 s, con cinco condiciones evaluadas para cada variable, los cuales permitirán diseñar un experimento orientado a optimizar la pirólisis y maximizar la producción de olefinas livianas a partir del HDPE residual.

**Agradecimientos:** Proyecto RECYCLE-SAFE. Advanced, sustainable, and safe solutions for recycling plastic packaging. CIPA, ANID Regional, R23F0005. Centro de Energía UCSC. Beca de Doctorado Nacional.

## Combustible de aviación bajo en carbono obtenido de residuos plásticos

Cristina Segura<sup>1</sup>, Nicolás Abos-Padilla<sup>1</sup>, Romel Jimenez<sup>2</sup>

<sup>1</sup>Unidad de Desarrollo Tecnológico-UDT, Universidad de Concepción, Cordillera, 2634, Coronel, 4191996,

<sup>2</sup>Departamento de Ingeniería Química, Facultad de Ingeniería, Universidad de Concepción, Concepción, 4030000, Chile

*c.segura@udt.cl*

La aviación comercial representa una de las principales fuentes de emisión de gases de efecto invernadero y otros contaminantes ambientales, en este contexto y considerando la creciente demanda de transporte aéreo y las proyecciones sobre sus impactos ambientales en el futuro cercano, este sector exige con urgencia la necesidad de implementar estrategias de mitigación. Paralelamente, el consumo aparente nacional de plásticos alcanzó 1,24 millones de toneladas en 2024, siendo el sector de envases y embalajes el principal contribuyente a esta cifra, destacando además el polipropileno y el polietileno tanto de alta como de baja densidad como los principales polímeros producidos. En este escenario, la producción de combustibles de aviación alternativos a partir de residuos plásticos de origen domiciliario e industrial se presenta como una propuesta medioambientalmente atractiva, permitiendo valorizar residuos plásticos que presentan poca factibilidad de reciclaje mecánico. Las poliolefinas como el polietileno (PE), polipropileno (PP) y poliestireno (PS) poseen una composición y estructura química similar a los hidrocarburos presentes en los combustibles, por lo que su conversión hacia hidrocarburos de bajo peso molecular presentes en el queroseno de aviación parece una propuesta factible y de valor.

Para este propósito, se empleó el proceso termoquímico de la pirólisis catalítica, fundamental para la obtención de los objetivos planteados. En dicha etapa se utilizó un catalizador de hierro soportado en carbón activado (Fe/C) y el procedimiento se llevó a cabo de manera continua, tratando plásticos PP y PE, provenientes de residuos de la industria pesquera, a altas temperaturas con el fin de inducir su descomposición térmica. Como resultado, se obtuvieron líquidos compuestos por una amplia diversidad de moléculas como alifáticos lineales y ramificados, aromáticos, cicloalcanos y alcoholes. Asimismo, se lograron rendimientos de hidrocarburos dentro de la fracción de jet fuel superiores a 45% en el caso del PP y menores a 30% para el PE. Posteriormente, los crudos pirolíticos fueron sometidos a una etapa de refinación mediante hidrotratamiento catalítico, cuyo propósito fue eliminar impurezas y favorecer la conversión de los hidrocarburos de interés. Durante esta etapa, el proceso se desarrolló bajo una atmósfera de hidrógeno a alta temperatura y presión junto con catalizadores metálicos comerciales como NiMo/Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> y Pd/C, destacando este último por su elevada capacidad para promover reacciones de hidrogenación e hidródeoxigenación, lo que permitió obtener líquidos enriquecidos en hidrocarburos saturados, con un alto contenido de alifáticos ramificados y ausencia total de compuestos oxigenados.

Con el objetivo de obtener el combustible final, los líquidos pirolíticos previamente hidrotratados fueron sometidos a una destilación fraccionada con el fin de separar las fracciones ligeras y pesadas no deseadas. El producto resultante corresponde a un queroseno de aviación alternativo de baja huella de carbono, apto como sustituto directo (drop-in) del queroseno convencional y en conformidad con la norma ASTM D1655. Este combustible presentó una composición de 26% parafinas, 54% isoparafinas, 4,7% cicloalcanos, 3,8% aromáticos y 6,4% olefinas, además de una fracción en rango de diésel del 4,4%. En cuanto a sus propiedades fisicoquímicas, mostró una densidad de 0,775 g·cm<sup>-3</sup>, un punto de congelación de -47°C y un contenido total de azufre de 50 ppm. Adicionalmente, el análisis de ciclo de vida (ACV) evidenció que sus emisiones de CO<sub>2</sub> fueron 10% menor al queroseno fósil en todo su ciclo de vida.

## **Síntesis y evaluación experimental de un catalizador para la producción de hidrógeno a través la descomposición térmica de amoníaco**

Joaquín Véliz<sup>1</sup>, Loreto Troncoso<sup>2</sup>, Germán Amador<sup>1</sup>

<sup>1</sup>*Grupo de Investigación en Motores y Combustibles Alternativos, Departamento de Ingeniería Mecánica, Universidad Técnica Federico Santa María, Avenida España 1680 Valparaíso, Chile.*

<sup>2</sup>*Instituto de Ingeniería Mecánica, Universidad Austral de Chile, General Lagos 2086, 5111187, Valdivia, Chile.*

*joaquin.veliz@usm.cl*

La baja densidad del hidrógeno limita su almacenamiento y transporte, lo cual impulsa la búsqueda de vectores alternativos como el amoníaco, capaz de liberar hidrógeno mediante su descomposición térmica. A presión atmosférica y en ausencia de catalizadores, la reacción requiere temperaturas entre 900 y 1000 °C. Este alto requerimiento energético ha motivado el desarrollo de catalizadores que reduzcan la energía de activación y, por ende, la temperatura de reacción. En este trabajo se sintetizó el catalizador Ru-K/CNT-MgO, reconocido por su buen desempeño en la descomposición de amoníaco a temperaturas cercanas a 450 °C, con alta estabilidad y baja carga metálica (4,85 wt%). La síntesis consideró el cálculo de las proporciones de los precursores, seguido de etapas de secado, calcinación y reducción controlada en atmósferas de hidrógeno y argón. Se definieron condiciones propias de impregnación para mejorar la dispersión y homogeneidad de los componentes en el soporte. Durante la síntesis se realizaron análisis de difracción de rayos X, los cuales permitieron identificar las fases presentes y compararlas con las reportadas en la literatura. Además, mediante microscopía electrónica de barrido acoplada a espectroscopía de dispersión de energía (SEM-EDS), se confirmó la morfología, la composición química y la distribución homogénea de los elementos. Se obtuvieron mapas de C, O, Mg, Ru y K, junto con trazas de contaminaciones típicas de la síntesis y de los CNT's. La dispersión uniforme del Ru observada en los análisis se reconoce como un factor clave para maximizar la actividad catalítica en la descomposición de amoníaco. En conjunto, los resultados validan la síntesis del catalizador y confirman su potencial como material activo y estable para la producción de hidrógeno a partir de amoníaco.



## Net carbon-negative olefins production from captured CO<sub>2</sub> and renewable hydrogen through alternative process configurations

Oswaldo Silva<sup>1</sup>, Lindley Maxwell<sup>2</sup>, Iván Cornejo<sup>1</sup>

<sup>1</sup>*Departamento Ingeniería Química y Ambiental, Universidad Técnica Federico Santa María, Chile.*

<sup>2</sup>*Centro de Investigación Científico y Tecnológico de la Región de Antofagasta (CICITEM), Chile*

*osvaldo.silva@sansano.usm.cl*

Light olefins (LO), such as ethylene, propylene and butylene, are essential compounds in the chemical industry. Their production still relies on fossil fuels, causing significant CO<sub>2</sub> emissions. The Methanol-to-Olefins (MTO) process has emerged as a promising alternative, since methanol can be synthesized from renewable hydrogen and captured CO<sub>2</sub>, offering a sustainable route. However, multiple production pathways exist, and their configuration may strongly affect both investment requirements and the resulting olefins cost. This study investigates light olefins production from captured CO<sub>2</sub> and green H<sub>2</sub> through two representative configurations. Case 1 (C1) involves feed conditioning, Reverse Water Gas Shift, CO/CO<sub>2</sub> hydrogenation, methanol dehydration to dimethyl ether, and the MTO process. Case 2 (C2) is shorter, with direct CO<sub>2</sub> hydrogenation to methanol and subsequent MTO process.

A computational model, validated against data from the literature, was implemented in Aspen Plus V14 to simulate each pathway. Heat integration was implemented to improve energy efficiency. CAPEX, OPEX, and carbon balance were computed to assess the techno-economic feasibility and environmental impact.

The results show that both routes achieve a net negative carbon balance, with C1 removing 2,38 kg-CO<sub>2</sub> per kg-LO and C2 removing 2,25 kg-CO<sub>2</sub> per kg-LO, a 6% difference. From an economic perspective, C1 yields Levelized Cost of Light Olefins (LCLO) of 4,09 USD/kg-LO, while C2 achieves 3,71 USD/kg-LO, corresponding to a 10% lower cost. The analysis confirms that raw material costs, particularly hydrogen, are the main drivers of CAPEX, OPEX and LCLO, representing ~44% of the LCLO. The sensitivity analysis shows that competitiveness with fossil-derived olefins, currently around 1,34 USD/kg, requires hydrogen prices below 2,5-3 USD/kg-H<sub>2</sub>. This scenario may become feasible given the projected reduction in renewable electricity cost

This comparison highlights the trade-off between maximizing carbon removal, as in C1, and minimizing process complexity and cost, as in C2. These results underline the decisive influence of process configuration and emphasize that reducing intermediate stages is a key strategy to enhance the competitiveness of CO<sub>2</sub>-derived olefins.

## Avances y desafíos en la producción de combustibles sostenibles de aviación

M. Coronado<sup>2,3</sup>, R. Muñoz<sup>2</sup>, R. Cabezas<sup>1,2</sup>, L. Azócar<sup>1,2</sup>

<sup>1</sup>*Departamento Química Ambiental, Facultad de Ciencias, UCSC.*

<sup>2</sup>*Universidad Católica de la Santísima Concepción, Centro de energía, Concepción, Chile.*

<sup>3</sup>*Doctorado en Ciencias con Mención en Biodiversidad y Biorecursos, Facultad de Ciencias, UCSC.*  
mcoronado@ucsc.cl

La aviación comercial es responsable de cerca del 2 % de las emisiones globales de CO<sub>2</sub>, representando un sector crítico en la transición energética por la dificultad de sustituir el combustible fósil convencional (CJF) en el corto plazo. Frente al compromiso de carbono-neutralidad al 2050, los combustibles sostenibles de aviación (SAF) se han consolidado como la principal alternativa. Actualmente, la normativa ASTM D7566 regula su uso en mezclas de hasta un 50 % con CJF, mientras que ASTM D4054 establece rigurosos procesos de certificación. Sin embargo, persisten desafíos relacionados con la ausencia de compuestos aromáticos en muchos SAF, su costo de producción y la competencia por materias primas con otros sectores.

La presente revisión bibliográfica recopila información actualizada sobre las ocho rutas tecnológicas aprobadas (HEFA, FT, ATJ, SIP, CHJ, HHC, entre otras) y tecnologías emergentes como la pirólisis catalítica, la licuefacción hidrotermal y el coprocesamiento. Para ello se consultaron bases de datos indexadas (WOS, Scopus, ScienceDirect) priorizando artículos recientes (2017–2024), reportes técnicos y documentos normativos internacionales.

Los resultados de la revisión muestran que las materias primas se agrupan en cuatro generaciones, desde cultivos alimentarios (G1) hasta organismos modificados y fuentes no biológicas (G4). Las opciones más sostenibles corresponden a residuos lignocelulósicos, aceites usados, algas y e-fuels, debido a su menor huella ambiental y disponibilidad local. Tecnologías como HEFA y FT han alcanzado madurez comercial, aunque con limitaciones de costos y escalabilidad, mientras que procesos emergentes destacan por generar fracciones ricas en hidrocarburos del rango C8-C16, acercándose a las especificaciones del CJF. Un punto crítico identificado es el rol de los compuestos aromáticos, necesarios para garantizar densidad y compatibilidad con sellos en motores, pero responsables de mayores emisiones. En este contexto, los cicloalcanos se perfilan como alternativa prometedora, aportando propiedades equivalentes con menor impacto ambiental.

En conclusión, la literatura revisada resalta avances significativos en la diversificación de rutas tecnológicas para SAF, aunque persisten brechas ligadas a la certificación, disponibilidad de materias primas y costos de producción. El futuro del sector dependerá de integrar tecnologías emergentes con criterios de sostenibilidad, priorizando recursos no alimentarios y procesos que reduzcan emisiones asociadas. Los SAF basados en residuos lignocelulósicos, algas y e-fuels aparecen como los más prometedores, mientras que la sustitución parcial de aromáticos por cicloalcanos representa un camino estratégico para lograr combustibles con propiedades comparables al CJF, alineados con las metas de descarbonización de la industria aérea.

**Agradecimientos: FONDEF ID23I10155 & FONDEF ID25I10456 / Beca Doctorado Nacional ANID (Folio: 21250997)**

## **“Remoción de amoxicilina y ciprofloxacino, desde una matriz acuosa, mediante la adsorción sobre carbón activado, obtenido a partir de cáscaras de maní”**

M. Muñoz<sup>1</sup>, B. Pastén<sup>1</sup>, M. Ramírez<sup>1</sup>, F. Campos<sup>1</sup>, P. Baeza<sup>1</sup>.

<sup>1</sup>*Instituto de Química, Pontificia Universidad Católica de Valparaíso, Valparaíso Chile.*

*Maximiliano.munoz.r@mail.pucv.cl*

Estudios recientes de aguas residuales han evidenciado un incremento significativo en la presencia de contaminantes emergentes, entre los cuales destacan los antibióticos. En particular, la amoxicilina (AMX), clasificada por la Organización Mundial de la Salud (OMS) como antibiótico de primer acceso, es ampliamente prescrita a nivel mundial debido a su disponibilidad y eficacia clínica. Asimismo, el ciprofloxacino (CIP), una fluoroquinolona de amplio espectro considerada de segundo acceso, también se encuentra entre los fármacos más utilizados en la práctica médica actual. Durante la pandemia de COVID-19, el uso indiscriminado de estos y otros antibióticos contribuyó al aumento acelerado de la resistencia a los antimicrobianos, lo que motivó a la OMS a poner énfasis en la aceleración de medidas de los países con respecto a el “Plan de Acción Mundial sobre la Resistencia a los Antimicrobianos”, con el objetivo de mitigar esta amenaza sanitaria global. En este contexto, el presente trabajo propone la adsorción como una estrategia eficiente y de bajo costo para la remoción de AMX y CIP en aguas residuales. Se plantea el uso de carbón activado obtenido a partir de cáscaras de maní (CAM), lo cual representa una tecnología sostenible que permite valorizar un residuo agroindustrial, contribuyendo tanto a la protección ambiental como al desarrollo de soluciones circulares para el tratamiento de contaminantes emergentes.

Para la obtención del carbón activado, se utilizaron cascaras de maní (tamaño homogeneizado entre 20-16 mallas), se realizó una activación química con  $\text{ZnCl}_2$  1M, y el material obtenido se calcinó a 450°C. El Carbón activado de la cáscara de Maní (CAM) se caracterizó mediante: Migración Electroforética (ME), Fuerza ácida (FA), Espectroscopia Infrarroja (FTIR-ATR), Adsorción y desorción de  $\text{N}_2$  (BET) y Microscopía Electrónica de Barrido (SEM). Los estudios cinéticos de adsorción se llevaron a cabo en un sistema tipo *batch*, utilizando 0,5 g L<sup>-1</sup> (dosis de adsorbente) de CAM como adsorbente y una solución acuosa de los fármacos de 25 mg L<sup>-1</sup>. La detección y cuantificación se realizó en un cromatógrafo líquido de alta resolución con detector UV (HPLC-UV).

Los resultados de las caracterizaciones mostraron la obtención de un material con una química superficial de carácter ácido, una porosidad altamente desarrollada y una elevada área específica. Los valores de capacidad de adsorción en el equilibrio ( $q_e$ ) para AMX fue 47,52 mg g<sup>-1</sup>, mientras que, para CIP fue de 48,89 mg g<sup>-1</sup> este valor indica miligramos de fármacos adsorbido por los gramos adsorbente, estos estudios de adsorción fueron llevados a cabo en un tiempo estimado de aproximadamente 5 horas, alcanzando el equilibrio a las 2 h de agitación. Según los resultados obtenidos, se demostró el uso de adsorción con carbón activado de cascara de maní como una buena forma de poder combatir la polución de aguas residuales por contaminantes emergentes. Los resultados de la isoterma de adsorción se alcanzó 209 mg g<sup>-1</sup>.

## Evaluación del residuo de sarmientos como materia prima en la producción de pellets para calefacción doméstica

1. Sebastián Ariz<sup>1,2</sup>, 2. Gerald Cifuentes<sup>1,2</sup>, 3. Arlene Peñaloza<sup>1,2</sup>, 4. J. Flavio Espinoza-Monje<sup>1,2</sup>, 5. Daniela Morales<sup>2</sup>, 6. María Cristina Yeber<sup>2</sup>, 7.

**Fernando Guerra<sup>3</sup>, 8. Gaspar Peña-Munzenmayer<sup>4,5</sup>, 9. Laura Azócar<sup>1,2</sup>**

[sariz@gacencias.ucsc.cl](mailto:sariz@gacencias.ucsc.cl)

<sup>1</sup> Centro de Energía, Universidad Católica de la Santísima Concepción, Concepción, Chile.

<sup>2</sup> Facultad de Ciencias, Universidad Católica de la Santísima Concepción (UCSC), Chile.

<sup>3</sup> Instituto de Ciencias Biológicas, Universidad de Talca, Chile.

<sup>4</sup> Instituto de Bioquímica y Microbiología, Universidad Austral, Chile.

<sup>5</sup> Núcleo de Innovación en Biotecnología Apícola (NIBApi), Universidad Austral, Chile.

En el marco del desarrollo de biocombustibles sólidos a partir de residuos agrícolas, el presente trabajo se centró en la valorización del sarmiento de vid como materia prima para la producción de pellets. El contexto de esta investigación responde a la necesidad de dar uso eficiente a los residuos lignocelulósicos generados por la industria vitivinícola, como una fuente de energía renovable no aprovechada. El propósito fundamental de este trabajo fue evaluar la factibilidad técnica de formular pellets que cumplieran con los estándares de calidad establecidos por la norma ISO 17225-2.

Se extrajeron muestras de residuos de sarmiento a gran escala en Vides de la Región de Ñuble, Chile. Estas se acondicionaron (chipeado, molienda, tamizado y secado [secador geosolar a 60 °C]) y se guardaron para sus posteriores análisis. A continuación, se realizó la caracterización físico-química del sarmiento evaluando el contenido de humedad, cenizas, carbono fijo, compuestos volátiles por TGA y poder calorífico por bomba calorimétrica con O<sub>2</sub>. La elaboración de pellets fue realizada con una pelletizadora semi industrial (Münch - Edelstahl GmbH), del Centro de Energía de la UCSC. El estudio contempló un estudio secuencial, evaluando el efecto del contenido de humedad del sarmiento en las propiedades del pellet, en rangos desde: 20%, 25%, 30% y 35%. Con la mejor condición obtenida se estudió el efecto de la mezcla sarmiento con aserrín de pino en distintas proporciones a 50/50, 60/40, 70/30 y 80/20 de aserrín/sarmiento, respectivamente. Todos los experimentos del estudio secuencial fueron realizados en rangos de temperatura de 70 °C a 90 °C. De este modo, el objetivo fue cumplir con los parámetros exigidos por la norma ISO 17225-2, como durabilidad mecánica (DM), densidad aparente (DA), longitud (L) y contenido de finos (F).

Los resultados obtenidos permitieron identificar debilidades asociadas a la cohesión y compactación de los pellets en base a aserrín-sarmiento (50/50), relacionado al alto contenido de extraíbles lo cual afecta negativamente la calidad del pellet. La optimización secuencial demostró que el contenido de humedad influye en las propiedades fisicoquímicas del pellet, mejorando la plasticidad del material sin comprometer la integridad del pellet. Destacaron parámetros como el contenido de cenizas <1,5%, DM >96,5, L entre 26,5-36,5 mm, los cuales cumplen satisfactoriamente con los límites establecidos por la normativa. Sin embargo, el poder calorífico (<16,5 MJ/kg) se encontró debajo del rango exigido, confirmando la necesidad de recurrir a formulaciones complementarias. Esto incentivó la elaboración de formulaciones mixtas en proporciones 60/40, 70/30 y 80/20 (aserrín/sarmiento) mejorando la estabilidad mecánica y energética, alcanzando un poder calorífico >16,5 MJ/kg.

Se concluye que el pellet obtenido en base a las formulaciones 70/30 aserrín/sarmiento con 30% de humedad, cumple con los parámetros fisicoquímicos establecidos por la norma ISO 17225-2 en calidad B e I3, permitiendo su uso industrial, validando la viabilidad técnica del uso del sarmiento, en conjunto con otras biomásas, como un insumo energético renovable y sustentable.

Agradecimientos: Proyecto ID23110291, Centro de Energía UCSC.

## Simulación CFD de un biofiltro de lecho empacado con azufre elemental aplicado a la desnitrificación autótrofa

Felipe A. Carreño-López<sup>a,\*</sup>, Andrés Orellana<sup>a</sup>, Samuel Abogabir<sup>a</sup>, Santiago Vila<sup>a</sup>,  
Sofía Hernández<sup>a</sup>, César Huiliñir<sup>a</sup>

<sup>a</sup>Green Technologies Research Group, Facultad de Ingeniería y Ciencias Aplicadas, Universidad de los Andes.

[\\*facarreno@miuandes.cl](mailto:facarreno@miuandes.cl)

La desnitrificación autótrofa basada en azufre elemental ( $S_0$ ) es una alternativa prometedora para la remoción de nitratos en aguas subterráneas con bajo contenido de carbono orgánico. Esta tecnología destaca por su bajo consumo energético, mínima generación de lodos y ausencia de requerimientos de carbono externo. Sin embargo, persisten desafíos significativos en su comprensión y optimización, particularmente en lo que respecta a la dinámica de crecimiento de biopelículas, la reducción del tamaño de las partículas de  $S_0$ , y el comportamiento del flujo en medios empacados. La mayoría de los modelos existentes utilizan aproximaciones simplificadas, generalmente unidimensionales y basadas en cinéticas de primer orden, sin considerar explícitamente la evolución espacial del biofilm ni su efecto sobre la porosidad y la transferencia de masa. En este contexto, se presentan los avances hasta la fecha del proyecto Fondecyt de Postdoctorado 2025 N°3250412. El trabajo propone una estrategia de modelación computacional utilizando el solver abierto biofilmFoam sobre OpenFOAM, el cual fue modificado para incorporar una cinética detallada de desnitrificación autótrofa calibrada a partir de estudios experimentales previos. Esta modificación permite acoplar el crecimiento microbiano, el consumo de sustrato y el cambio estructural del medio poroso, considerando simultáneamente transporte convectivo-difusivo y la hidrodinámica del flujo a través del modelo de Darcy–Brinkman.

Los resultados obtenidos hasta la fecha han permitido observar la evolución temporal de la biopelícula durante seis días de crecimiento microbiano, alcanzando una eficiencia de remoción de nitratos cercana al 80%. Estos resultados fueron validados mediante la comparación con datos previamente reportados en la literatura. Estos avances sientan una base sólida para las siguientes etapas del proyecto, que incluyen la validación experimental del modelo mediante técnicas de tomografía computacional y análisis de distribución de tiempos de residencia (RTD).

Este trabajo aporta una contribución metodológica relevante al campo de la ingeniería ambiental, al combinar simulación CFD, modelación de biopelículas y cinética microbiana en una plataforma de código abierto modificada, ofreciendo nuevas herramientas para el diseño y optimización de sistemas reales de tratamiento de aguas.



## Screening COSMO-RS y validación experimental de líquidos iónicos para la separación selectiva de aromáticos desde bio-oil en el upgrading de SAF

R. Morales<sup>1</sup>, R. Cabezas<sup>1</sup>, F. Olea<sup>2</sup>, R. Muñoz<sup>1</sup>, L. Azocar<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Centro de energía, Universidad Católica de la Santísima Concepción, Concepción, Chile.

<sup>2</sup>CICECO – Aveiro Institute of Materials, Department of Chemistry, University of Aveiro, 3810-193 Aveiro, Portugal  
rmorales@qciencias.ucsc.cl

La transición hacia combustibles sostenibles de aviación (SAF) requiere procesos de upgrading del bio-oil que permitan recuperar selectivamente fracciones aromáticas, esenciales para alcanzar la densidad energética exigida por la normativa aeronáutica. Dada la compleja composición del bio-oil una mezcla heterogénea de fenoles, guayacol, compuestos oxigenados y cadenas alifáticas se ha impulsado la búsqueda de solventes altamente selectivos entre aromáticos y no aromáticos. En este contexto, los líquidos iónicos (LI) destacan por su versatilidad estructural, estabilidad térmica y posibilidad de diseño molecular a medida.

En este trabajo se aplicó un enfoque combinado de modelación molecular mediante COSMO-RS y validación experimental para seleccionar líquidos iónicos con alta selectividad hacia compuestos aromáticos. El *screening* computacional incluyó 430 líquidos iónicos comerciales de IoLiTec evaluando sus capacidades de solubilidad y coeficientes de reparto para sistemas modelo aromático/alifático. Los resultados confirmaron que el catión es el principal determinante de la miscibilidad con la fase orgánica, definiendo el carácter organofílico del sistema. En particular, los líquidos iónicos basados en imidazolio mostraron las mayores capacidades de solubilidad hacia benceno, mientras que los sistemas con aniones  $\text{Tf}_2\text{N}^-$  y  $\text{DCA}^-$  presentaron una baja afinidad por hexano, evidenciando su idoneidad para procesos de extracción selectiva de aromáticos. Entre ellos,  $[\text{Bmim}][\text{DCA}]$  se destacó por su alta relación de selectividad benceno/hexano y su estabilidad química.

Los ensayos experimentales, realizados en sistemas modelo benceno/hexano, confirmaron las predicciones teóricas, alcanzando una eficiencia de extracción del 69,83% y factores de selectividad superiores a 15. Además, los líquidos iónicos de imidazol con aniones  $\text{Tf}_2\text{N}$ ,  $\text{PF}_6$  y  $\text{DCA}$  presentaron una viscosidad moderada (60–120 mPa·s a 25 °C), adecuada para su manipulación y separación posterior. Su estabilidad química bajo condiciones ambientales y térmicas moderadas refuerza su potencial para aplicaciones sostenibles. Desde una perspectiva ambiental, estos líquidos iónicos presentan baja presión de vapor y mínima volatilidad, reduciendo el riesgo de emisiones y pérdidas.

En conclusión, la estrategia integrada de screening computacional y validación experimental permitió identificar líquidos iónicos con alta selectividad y eficiencia en la extracción de aromáticos, optimizando el upgrading del bio-oil hacia combustibles sostenibles de aviación. Los resultados respaldan su potencial para mejorar la eficiencia y sostenibilidad del proceso, planteándose estudios futuros en matrices reales de bio-oil e integración con etapas de destilación y refinación para desarrollar procesos escalables y ambientalmente responsables.

Agradecimientos: Se agradece el apoyo de SKY Airline y del proyecto “Biorrefinería de aceite de camelina para la producción de SAF y otros combustibles” (FONDEF IDeA I+D 2025 – SIA. ID25110456).



## Quality assessment of Chilean wood pellets under normative standards: a comparative study

V. Saavedra<sup>1</sup>, F. Varas-Concha<sup>1,2</sup>, D. Hernández<sup>3,4</sup>, J. Alarcón-Alarcón<sup>5</sup>, ML. Muñoz<sup>4</sup>, ML. del Campo<sup>1</sup>, M. König<sup>1</sup>

<sup>1</sup> Centro Tecnológico Kipus, Facultad de Ingeniería, Universidad de Talca, Curicó, Chile.

<sup>2</sup> Departamento de Ingeniería Industrial, Facultad de Ingeniería, Universidad de Talca, Curicó, Chile.

<sup>3</sup> Departamento de Tecnologías Industriales, Facultad de Ingeniería, Universidad de Talca, Curicó, Chile.

<sup>4</sup> Laboratorio Ambiental de Gases y Biocombustibles (LAGBIO), Facultad de Ingeniería, Universidad de Talca, Curicó, Chile.

<sup>5</sup> Programa de Doctorado en Sistemas de Ingeniería, Facultad de Ingeniería, Universidad de Talca, Curicó, Chile.

Valentina.saavedra@utalca.cl

The use of wood pellets as a solid biofuel has gained increasing significance in Chile as part of efforts to diversify the national energy matrix and reduce greenhouse gas emissions, while also helping to lower particulate matter pollution from firewood combustion. The Chilean standard “NCh-ISO 17225/2:2017 Solid biofuels - Fuel specifications and classes - Part 2: Graded wood pellets” establishes specific technical requirements aimed at ensuring the quality, energy efficiency, and environmental sustainability of this biofuel, encompassing physical, chemical, and energetic parameters. However, since this standard is voluntary, producers are not obliged to comply with it, and there is consequently a limited availability of systematic data regarding the degree of compliance among Chilean producers. In this study, a comparative analysis was conducted on samples obtained from twenty Chilean wood pellet producers. Evaluated parameters included physical properties such as pellet diameter and length, bulk density, fines content, and ash content, as well as chemical and energetic properties, including higher heating value (HHV), sulfur, nitrogen, and chlorine content, and the presence of potentially toxic trace elements such as arsenic, cadmium, chromium, copper, mercury, lead, and zinc. Analyses were performed following standardized ISO methodologies equivalent to the procedures specified in NCh-ISO 17225/2:2017. The results indicate that, overall, the analyzed products comply with the ranges required by the standard, exhibiting bulk densities exceeding  $600 \text{ kg}\cdot\text{m}^{-3}$ , which reflect adequate physical performance. Lower heating values ranged from 16.6 to  $19.6 \text{ MJ}\cdot\text{kg}^{-1}$ , consistent with high energy efficiency. However, significant discrepancies were observed in critical variables, including ash and fines content, where some samples exceeded the maximum limits of 1.2%, with 1.35% and 1.0%, with 1.05, respectively, as well as in the concentrations of trace elements. Notably, cadmium levels reached up to  $0.88 \text{ mg}\cdot\text{kg}^{-1}$  in certain samples, approaching or exceeding the threshold established for the highest quality category under NCh-ISO 17225/2:2017 ( $\leq 0.5 \text{ mg}\cdot\text{kg}^{-1}$ ). These discrepancies have direct environmental and public health implications. Elevated ash and fines levels increase emissions of fine particulate matter during combustion, associated with respiratory and cardiovascular diseases. Exceeding cadmium limits is particularly concerning, as this element can volatilize and attach to inhalable particles, exhibiting carcinogenic and nephrotoxic effects and contaminating soils or waters through residual ashes. Furthermore, an analysis of particulate matter and combustion gas emissions was carried out, and their correlation with the parameters established by the Chilean standard was examined. Although the Chilean wood pellet industry demonstrates quality standards comparable to international references, challenges persist regarding product homogeneity, particularly in relation to inorganic contaminants and mechanical durability. These findings underscore the necessity of implementing more rigorous monitoring and certification mechanisms to ensure the quality of solid biofuels and to enhance their competitiveness in both national and international markets.

## Ignition characterization of $\text{NH}_3/\text{H}_2$ mixtures in HCCI engines for chemical kinetic mechanism optimization toward sustainable combustion

Adalberto Salazar<sup>1</sup>, Florian Hurault<sup>2</sup>, Christine Rousselle<sup>2, 3</sup>, German Amador<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Universidad Técnica Federico Santa María, Departamento de Ingeniería Mecánica, Valparaíso, Chile. <sup>2</sup>PRISME Laboratory, Université d'Orléans, 45100, France. <sup>3</sup>Institut Universitaire de FRANCE, IUF, PARIS, France.  
*adalberto.salazar@usm.cl*

The urgent demand for carbon-neutral energy carriers has renewed interest in ammonia ( $\text{NH}_3$ ) and hydrogen ( $\text{H}_2$ ) as sustainable fuels for future combustion systems. Ammonia's high hydrogen density and carbon-free nature make it attractive, but its low reactivity and high ignition temperature remain major challenges. When blended with hydrogen, the overall reactivity and flammability are enhanced, making  $\text{NH}_3/\text{H}_2$  mixtures promising candidates for sustainable power generation. However, current chemical kinetic mechanisms still exhibit significant discrepancies under engine-relevant conditions, motivating the need for new methodologies and datasets obtained under realistic combustion environments.

This study proposes a novel methodology for the optimization of chemical kinetic mechanisms using an internal combustion engine (ICE) as a fundamental reactor, bridging the gap between idealized reactors and real engine conditions. The methodology integrates experimental data and numerical modeling to refine kinetic mechanisms through multi-objective optimization. The current stage focuses on the experimental characterization of the ignition behavior of  $\text{NH}_3/\text{H}_2$ /air mixtures using a single-cylinder engine operating in homogeneous charge compression ignition (HCCI) mode.

The proposed framework builds upon previous work conducted with  $\text{CH}_4/\text{H}_2$  mixtures, where the same methodology, applied to the GRI-Mech 3.0 mechanism, successfully reduced prediction errors of key combustion parameters. This prior validation supports its applicability to  $\text{NH}_3/\text{H}_2$  mixtures.

Table 1 summarizes the optimized pre-exponential factors (A) obtained via comprehensive Combinatoric solution (CCS) methodology, which decreases the global prediction error by 26% compared to the original mechanism.

Table 1. Optimized pre-exponential factors for GRI-Mech 3.0 using CCS methodology ( $\text{CH}_4/\text{H}_2$  case)

Factor	A original	A optimized
R38	2.65E+16	2.37E+16
R47	1.21E+07	1.51E+07
R85	7.40E+13	10.92E+13
R115	1.30E+11	3.90E+11
R116	4.20E+14	1.40E+14
R119	3.78E+13	1.26E+13
R157	2.45E+04	4.27E+04

The methodology combines 0-D and 1-D modeling approaches to represent both ideal and engine-relevant conditions. A zero-dimensional adiabatic constant-volume reactor (shock-tube equivalent) is employed for simulating ignition delay times, while a variable-volume thermodynamic model of the HCCI engine captures transient effects such as residual gases, heat transfer, and compression dynamics. The integration of these complementary models allows the construction of a comprehensive optimization framework capable of linking chemical kinetics to measurable engine parameters.

Overall, this work establishes the foundation for a multi-scale, data-driven methodology aimed at improving kinetic mechanisms for carbon-free fuels. The present stage confirms the feasibility of using ICEs as experimental reactors for fundamental combustion research, providing high-quality data for

subsequent optimization stages that will contribute to the development of reliable mechanisms for  $\text{NH}_3/\text{H}_2$  combustion.

## Efecto de las variables tiempo de residencia y temperatura en la pirólisis de lignina sobre la producción de hidrocarburos cíclicos y aromáticos para su uso como aditivos en combustibles de aviación sostenible.

Cecilia Ávila<sup>1,2</sup>, Robinson Muñoz<sup>1,2</sup>, Sebastián Ariz<sup>1,2</sup>, Franco Sandoval<sup>1,2</sup>, Laura Azócar<sup>1,2</sup>

<sup>1</sup>*Departamento de Química Ambiental, Facultad de Ciencias, Universidad Católica de la Santísima Concepción (UCSC), Chile.*

<sup>2</sup>*Universidad Católica de la Santísima Concepción, Centro de Energía, Concepción, Chile.*

*cavila@qaciencias.ucsc.cl*

La industria aeronáutica busca activamente alternativas que impulsen el desarrollo de combustibles de aviación sostenibles (SAF). Sin embargo, los SAF actuales, derivados principalmente de procesos de síntesis, carecen de compuestos aromáticos, esenciales en un jetfuel. La lignina, un subproducto abundante de la industria forestal, constituye una fuente natural rica en estos compuestos aromáticos, los cuales pueden extraerse mediante su descomposición por pirólisis. El objetivo de esta investigación fue estudiar la utilización de lignina Kraft para la obtención de hidrocarburos cíclicos y aromáticos mediante pirólisis, evaluando específicamente el efecto de las condiciones operativas, temperatura y tiempo de residencia. Adicionalmente, se evaluó una etapa de pirólisis/hidrogenación catalítica utilizando zeolita y Ni/Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>, respectivamente, con el fin de mejorar la calidad del producto final obtenido hacia hidrocarburos tipo JetA1.

La lignina Kraft fue caracterizada a través de análisis elemental por un alto contenido de carbono y moderado contenido de oxígeno (C: 64,3%, H: 5,8%, O: 27,1%), mientras que a través de un análisis proximal se identificó un bajo contenido de humedad (3,6% aprox.), lo que hace que este parámetro resulte despreciable. La lignina caracterizada fue pirolizada en un reactor semicontinuo de pirólisis rápida diseñado e implementado en el Centro de Energía UCSC. En este reactor se evaluó el efecto de tiempo de residencia (2, 4, 6, 8 y 10 s) a 550 °C y el efecto de la temperatura de reacción (500, 525, 550, 575, 600 °C) a 6 s. Parámetros influyentes en los rendimientos de conversión de lignina Kraft a bio-oil y en su composición analizada a través de GC-MS. Los resultados mostraron que un tiempo de residencia de **10 s** a 550°C favoreció el rendimiento de bio-oil (25%) y la formación de compuestos aromáticos no oxigenados, mientras que la condición de **575°C** permitió alcanzar el mayor rendimiento (30% aprox.) con una notable proporción de aromáticos. Una vez definidas las condiciones óptimas de pirólisis (a 1 atm), se realizó la pirólisis con hidrogenación secuenciada, donde se observó una reducción del contenido de compuestos oxigenados y un aumento de hidrocarburos de C6-C12, principalmente aromáticos aptos para ser utilizados en combustibles de aviación.

Los resultados obtenidos permiten establecer de manera preliminar que la lignina puede ser utilizada como materia prima para la producción de aditivos aromáticos en combustibles de aviación, aportando no solo al aumento del contenido aromático requerido, sino también al desarrollo de rutas alternativas para la producción de combustibles sostenibles.

Agradecimientos: Proyectos IDeA I +D ID23I10155 e ID 25I10456, Bioforest SpA (Arauco S.A.) Centro de energía UCSC.

## Medición de humedad en bio-oil para producción de combustibles de aviación sostenibles: desafíos analíticos mediante Karl- Fischer en muestras bifásicas

Franco Sandoval<sup>2</sup>, Robinson Muñoz<sup>1,2</sup>, Cecilia Avila<sup>1,2</sup>, Sebastián Ariz<sup>2</sup>, Matías Coronado<sup>1,2</sup>, René Cabezas<sup>1,2</sup>, Laura Azócar<sup>1,2</sup>

<sup>1</sup>*Departamento de Química Ambiental, Facultad de Ciencias, Universidad Católica de la Santísima Concepción (UCSC), Chile.*

<sup>2</sup>*Universidad Católica de la Santísima Concepción, Centro de Energía, Concepción, Chile.*

[fnsandoval@ucsc.cl](mailto:fnsandoval@ucsc.cl)

La transición hacia combustibles de aviación sostenibles (SAF) representa un avance crítico en la descarbonización del sector aéreo, pero introduce desafíos analíticos complejos debido a su heterogeneidad composicional. A diferencia de los combustibles convencionales, que son homogéneos y estandarizados mediante técnicas de control de calidad consolidadas, los SAF derivados de biomasa presentan variabilidad según materia prima y proceso de producción. Esta heterogeneidad impacta directamente en la cuantificación de parámetros críticos como el contenido de agua, donde niveles elevados favorecen corrosión, formación de cristales de hielo y reducción del poder calorífico. Aunque el método Karl Fischer (KF) es la técnica de referencia internacional (ASTM D6304, ASTM D4928, ISO 12937), su aplicación en SAF bifásicos, como los obtenidos por pirólisis de biomasa, enfrenta limitaciones no resueltas: formación de microemulsiones que retienen agua en fase orgánica, consumo excesivo de reactivo por interferentes químicos, y falta de reproducibilidad en mediciones directas.

El presente trabajo evaluó adaptaciones metodológicas para la determinación de agua por KF en bio-oil bifásico derivado de pirólisis de biomasa. Se implementaron dos estrategias complementarias: **Manejo de fases**, por separación gravimétrica previa mediante decantación, seguida de toma de alícuotas independientes de cada fase. **Uso de co-solventes anhidros** (mezclas metanol-cloroformo y metanol-acetona) para favorecer la solubilización homogénea y romper microemulsiones estables. El diseño experimental incluyó validación intrínseca mediante controles de interferentes químicos y estudios de recuperación en matrices sintéticas que simulan bio-oil bifásico. Todos los protocolos se ajustaron a los lineamientos de ASTM E691 para garantizar reproducibilidad inter-laboratorio. Se realizó además un estudio control con fines comparativos.

Para el caso del control, se elaboró una curva de calibración con jet-fuel tipo 1A y agua, observándose buena concordancia entre los valores teóricos y los medidos por KF en los extremos, con desviaciones en concentraciones intermedias atribuibles a la matriz. Los resultados de las muestras analizadas en el estudio de fases por separado permitieron identificar comportamientos distintos para cada fase. La fase superior (0,1012 g) presentó un contenido de humedad inferior al 1%, mientras que la fase acuosa (0,0181 g) alcanzó un 83%, lo que correspondió a un total aproximado de 13,4% en peso. Finalmente, los resultados con co-solventes (metanol-cloroformo y metanol-acetona) muestran interesantes proyecciones como alternativa de análisis integral de muestras complejas. Estos avances contribuirán directamente a la implementación de protocolos de control de calidad del SAF y a la estandarización analítica de nuevos biocombustibles.

Agradecimientos: Proyectos ID23I10155 e ID 245I10456

## Machine Learning Models for Predicting PEM Fuel Cell Performance under Real Environmental Conditions in the Antofagasta Region, Chile

Henríquez, F.V.<sup>1</sup>, Cornejo, I.A.<sup>1</sup>, Maxwell, L.A.<sup>2</sup>

<sup>1</sup>*Departamento de Ingeniería Química y Ambiental, Universidad Técnica Federico Santa María, Chile.*

<sup>2</sup>*Centro de Investigación Científico y Tecnológico de la Región de Antofagasta (CICITEM), Chile.  
fhenriquez@usm.cl*

The development of green hydrogen in Chile requires predictive tools to evaluate the performance of proton exchange membrane fuel cells (PEMFCs) under real environmental conditions. Most machine learning (ML) models applied to PEMFCs have been trained with data from controlled or simulated environments, which limits their applicability in scenarios of high climatic and geographic heterogeneity such as the Atacama Desert.

This work introduces an ML pipeline to predict electric current as a key performance indicator of PEMFCs, using experimental data (~2500 data points) collected by CICITEM's mobile pilot plant at different sites in the Antofagasta Region across various seasons. The transportable plant integrates photovoltaic panels, electrolyzers, and a PEM fuel cell, whose operation is strongly influenced by local environmental conditions (see Figure 1). During the sampling campaigns, key environmental (temperature, pressure, relative humidity) and operational variables (voltage and current) were measured, along with complementary indicators to support the ML modeling process.

Preliminary results with artificial neural networks achieved promising accuracy in predicting PEMFC performance ( $R^2 \approx 0.987$ ; RMSE  $\approx 2.83$ ). Additional models under evaluation include Support Vector Regression, Random Forest, and gradient boosting algorithms (XGBoost, CatBoost), with the aim of consolidating a robust and transferable approach. This work seeks to establish a solid foundation for performance prediction under desert conditions, providing valuable insights to guide strategic planning, decision-making, and the deployment of green hydrogen projects in Chile.



Figure 1. CICITEM's mobile pilot plant conducting measurements in the sampling campaign in the Atacama Desert, Chile.



## Integración de Tecnologías IoT en Reactores Biológicos

P. Cachaña<sup>1</sup>, C. Muñoz<sup>2</sup>, C. Antileo<sup>3</sup>, J. Sanchez<sup>2</sup>, J. Puentes<sup>2</sup>, M. Opazo<sup>3</sup>

<sup>1</sup>*Doctorado en Ciencias de la Ingeniería mención Bioprocesos, Universidad de La Frontera*

<sup>2</sup>*Departamento de Ingeniería Eléctrica, Universidad de La Frontera*

<sup>3</sup>*Departamento de Ingeniería Química, Universidad de La Frontera*

<sup>4</sup>*Ingeniería Civil Ambiental, Universidad de La Frontera*

*pedro.cachana@ufrontera.cl*

Las aguas residuales con altas concentraciones de nitrógeno amoniacal representan un desafío ambiental crítico, debido a su impacto en la eutrofización de cuerpos de agua. La eliminación biológica de nitrógeno mediante nitrificación parcial surge como una alternativa eficiente y de bajo costo energético; sin embargo, su éxito depende del control preciso de variables críticas dentro del reactor biológico.

Este trabajo presenta la implementación de un sistema de monitoreo basado en Internet de las Cosas (IoT) para un reactor continuo a escala de laboratorio, enfocado en la supervisión de pH, oxígeno disuelto y temperatura. La metodología incluyó la selección y calibración de sensores de bajo costo, pruebas de almacenamiento de datos mediante InfluxDB y visualización en Grafana, así como la configuración de alertas a través de Telegram para eventos críticos.

Los resultados evidenciaron una correcta calibración de los sensores y la capacidad del sistema para registrar y visualizar datos en tiempo real. Asimismo, se validó el envío de alertas inmediatas frente a condiciones perjudiciales y letales, demostrando la fiabilidad del sistema en la detección temprana de desviaciones.

Se concluye que la integración de tecnologías IoT en el monitoreo de reactores biológicos constituye una herramienta eficaz para garantizar la estabilidad de los procesos de nitrificación parcial, al facilitar la toma de decisiones y prevenir fallas que comprometan la actividad microbiana. Además, esta integración permite la escalabilidad hacia sistemas de mayor volumen y con un número más amplio de variables a monitorear, lo que abre la posibilidad de implementar gemelos digitales, control predictivo y sistemas de optimización de procesos, acercando así a las plantas de tratamiento de aguas residuales al paradigma de la Industria 4.0.

## Estudio Comparativo del Control de pH en la Producción de Caproato por *Clostridium kluyveri*

Otálora-Tapiero F<sup>1</sup>., Suazo A<sup>1</sup>., Conejeros R<sup>1</sup>., Aroca G<sup>1</sup>.

<sup>1</sup>Escuela de Ingeniería Bioquímica, Pontificia Universidad Católica de Valparaíso, 2362807, Chile  
[fabian.otalora.t@mail.pucv.cl](mailto:fabian.otalora.t@mail.pucv.cl)

Los ácidos grasos de cadena media (MCFAs), como el caproato (C6), son productos de alto valor con una utilidad actual diversa y creciente. Se emplean extensamente en la nutrición clínica y fórmulas infantiles debido a su fácil absorción como fuente de energía, y de forma significativa en la alimentación animal, donde actúan como potentes agentes antimicrobianos que pueden reemplazar a los antibióticos tradicionales. Debido a su elevada demanda surge la necesidad de métodos de producción más sostenibles para estas moléculas, la aplicación de biotecnología abre la puerta a métodos más sostenibles, específicamente la ruta fermentativa de la elongación de cadena para valorizar residuos orgánicos en MCFAs. La problemática principal que motiva este estudio es que la fermentación mediante microorganismos eficientes como *Clostridium kluyveri* es intrínsecamente inestable. El proceso sufre una fuerte inhibición metabólica causada por la toxicidad del propio producto acumulado (el caproato), un efecto que se intensifica drásticamente en condiciones ácidas (pH bajo). Esta toxicidad conduce a una caída abrupta de la viabilidad celular y la productividad, un fenómeno conocido como "acid crash" o colapso metabólico, deteniendo la producción prematuramente y limitando el rendimiento final.

Este estudio investiga la síntesis de ácidos grasos de cadena media (MCFAs) con la bacteria *Clostridium kluyveri*, específicamente, la inhibición metabólica causada por la toxicidad del producto en el que un pH ligeramente ácido, favorece la asimilación de sustratos como el etanol y el acetato. Se realizaron fermentaciones con pH controlado a 6.2 y sin control, utilizando altas concentraciones iniciales de sustrato (E:A).

Desde una perspectiva metabólica, el proceso sin control de pH exhibió un comportamiento rápido y enfocado en el crecimiento celular. Esto se refleja estequiométricamente en un alto rendimiento de biomasa (Y<sub>x/s</sub>), con un valor de 0.68 gr de biomasa por mol de sustrato consumido. Aunque esta estrategia favoreció una alta selectividad inicial hacia el caproato (C6) del 72.0%, fue insostenible a largo plazo. La acumulación de productos ácidos provocó una caída del pH por debajo de 6.0, lo que desencadenó un "acid crash" o colapso metabólico completo, deteniendo prematuramente la fermentación. Antes de esta caída, el proceso alcanzó una producción máxima de 9.38 g/L de caproato. En contraste, la fermentación con el pH controlado en 6.2 demostró una estrategia metabólica diferente. Aunque esta cinética tuvo un cocimiento más lento, con una duración de 288 horas, el proceso fue estable y productivo. El control del pH en un valor estable indujo un cambio metabólico: en lugar de dirigir el sustrato hacia el crecimiento, el microorganismo lo canalizó de manera más eficiente hacia la formación de productos. La evidencia estequiométrica de este cambio es un rendimiento de biomasa un 50% menor, de solo 0.34 g/mol.

En conclusión, este estudio revela un importante compromiso metabólico: la estabilidad del proceso es más decisiva que la velocidad. El control del pH, aunque resulta en un proceso más lento y con una selectividad menor (63.9%), permite sostener la producción en el tiempo. Esta estabilidad es lo que finalmente permite alcanzar un título de producto final un 16% superior, llegando a 11.10 g/L de caproato, demostrando que la canalización del sustrato hacia el producto, en lugar de la biomasa, es esencial para maximizar el rendimiento global.

## Sistema de Monitoreo en Tiempo Real de Emisiones Odorantes en PTAR basado en IoT

P. Cachaña<sup>1</sup>, C. Muñoz<sup>2</sup>, J. Huircan<sup>2</sup>, C. Antileo<sup>3</sup>, J. Bruggink<sup>5</sup>, F. Otárola<sup>1</sup>, H. Huentenao<sup>4</sup>

<sup>1</sup>Doctorado en Ciencias de la Ingeniería mención Bioprocesos, Universidad de La Frontera

<sup>2</sup>Departamento de Ingeniería Eléctrica, Universidad de La Frontera

<sup>3</sup>Departamento de Ingeniería Química, Universidad de La Frontera

<sup>4</sup>Magister en Ciencias de la Ingeniería, Universidad de La Frontera

<sup>5</sup>Ingeniería Civil Electrónica, Universidad de La Frontera

*pedro.cachana@ufrontera.cl*

Las Plantas de Tratamiento de Aguas Residuales (PTAR) son infraestructuras críticas para la protección de la salud pública y la preservación del medio ambiente. No obstante, durante su operación generan emisiones de gases odorantes —como sulfuro de hidrógeno, amoníaco y compuestos orgánicos volátiles— que, aun en bajas concentraciones, provocan molestias significativas en comunidades cercanas. Estos olores persistentes y desagradables no solo afectan la calidad de vida, sino que se asocian a impactos sociales y de salud tales como estrés, dolores de cabeza, mareos y disminución general del bienestar. Asimismo, la presencia recurrente de malos olores deteriora la percepción social del entorno, disminuye la plusvalía de las propiedades cercanas y limita el desarrollo urbano, generando tensiones entre las comunidades y las empresas operadoras.

Desde la perspectiva de las compañías, el manejo deficiente de los olores constituye un riesgo reputacional que puede derivar en un aumento de reclamos ciudadanos, sanciones regulatorias e incluso litigios, incrementando los costos operativos y comprometiendo la sostenibilidad del servicio. Pese a ello, la mayoría de las PTAR carece de sistemas accesibles, continuos y eficientes para monitorear gases odorantes, lo que limita la capacidad de respuesta temprana y dificulta la gestión basada en evidencia.

En este escenario, se propone el desarrollo de un sistema de monitoreo de bajo costo y energéticamente neutro, fundamentado en tecnologías del Internet de las Cosas (IoT). Este sistema permitiría medir en tiempo real la presencia y evolución de compuestos odoríferos, integrando sensores, almacenamiento de datos y plataformas de visualización remota. La información obtenida favorecería una gestión más eficiente de los procesos, la implementación de alertas tempranas y la optimización de medidas de mitigación.

La adopción de este tipo de herramientas no solo contribuye a mejorar la operación de las PTAR, sino que también fortalece la relación con la comunidad al ofrecer información objetiva y transparente. En consecuencia, el uso de IoT para el monitoreo de olores se presenta como una estrategia innovadora que integra eficiencia tecnológica, sostenibilidad y responsabilidad social en el tratamiento de aguas residuales.

## Evaluación técnico-económica de la captura de CO<sub>2</sub> desde fuentes localizadas en las refinerías de Chile

T. Swaneck<sup>1</sup>, G. Núñez<sup>1</sup>

<sup>1</sup> Departamento de Ingeniería Química y Ambiental, Universidad Técnica Federico Santa María, Campus San Joaquín, Santiago.

*gonzalo.nunezm@usm.cl*

Este trabajo evalúa los requerimientos energéticos y costos mínimos para la implementación de tecnologías de captura de dióxido de carbono (CO<sub>2</sub>) en las refinerías de ENAP en Chile. En el marco de los compromisos de carbono neutralidad al 2050, y considerando que los derivados del petróleo constituyeron el 55% de la matriz energética secundaria nacional en 2020, la descarbonización de la industria de refinación es un paso estratégico. Este estudio proporciona un primer diagnóstico técnico-económico para priorizar la aplicación de estas tecnologías en un sector clave.

La metodología se basó en el análisis de datos de emisiones de las tres refinerías de ENAP (Aconcagua, Bío Bío y Gregorio) reportados en el Registro de Emisiones y Transferencias de Contaminantes (RETC) entre 2019 y 2022. Se identificaron y agruparon siete tipos de fuentes de emisión: hornos, calderas, antorchas, incineradores, regeneradores de cracking catalítico, turbinas de gas y unidades de generación eléctrica. Para cada tipo de fuente, se determinó el trabajo termodinámico mínimo, que representa el requerimiento energético teórico para una separación ideal y reversible, calculado a partir de la diferencia en la energía libre de Gibbs. Este valor establece una base fundamental para evaluar la viabilidad energética de la captura. Los costos monetarios asociados se estimaron mediante un análisis de Sherwood, que correlaciona el costo de capital de la captura con la concentración de CO<sub>2</sub> en el gas de salida. Todos los cálculos se realizaron asumiendo una eficiencia de captura del 90% y una pureza del CO<sub>2</sub> del 95%.

Los resultados muestran una clara correlación entre la concentración de CO<sub>2</sub> de la fuente, la energía requerida y el costo de captura. Los regeneradores de cracking catalítico, con las concentraciones más altas de CO<sub>2</sub> (10-20%), presentaron los requerimientos más bajos, con un costo estimado de 35-52 USD/ton CO<sub>2</sub>. Un segundo grupo, compuesto por hornos, calderas, antorchas e incineradores, con concentraciones intermedias (8-10%), arrojó costos de 52-58 USD/ton CO<sub>2</sub>. Finalmente, las turbinas de gas y unidades de generación eléctrica, con las emisiones más diluidas (3-5%), resultaron en los costos más elevados, entre 76-101 USD/ton CO<sub>2</sub>. Estos rangos de costos son consistentes con los valores reportados para refinerías en Estados Unidos, lo que valida la competitividad de estas tecnologías en el contexto chileno.

A modo de diagnóstico, aunque los regeneradores son la opción más económica por tonelada, los hornos y calderas representaron las mayores fuentes de emisión por volumen en 2022 (242.096 y 129.806 toneladas de CO<sub>2</sub>, respectivamente), posicionándolos como objetivos prioritarios para lograr un impacto significativo en la reducción de emisiones totales. El estudio concluye que la captura de CO<sub>2</sub> en refinerías chilenas es una alternativa técnicamente viable, aunque se requieren mejoras en eficiencia energética para optimizar su aplicación, ofreciendo una hoja de ruta para futuras inversiones en descarbonización.

## Analysis of the Chilean electrical system to achieve net-zero emissions by 2050

O. Silva<sup>1</sup>, R. Dejan<sup>2</sup>, G. Núñez<sup>1</sup>, N. Mac Dowell<sup>2</sup>

<sup>1</sup> *Departamento Ingeniería Química y Ambiental, Universidad Técnica Federico Santa María, Chile.*

<sup>2</sup> *Centre for Environmental Policy, Imperial College London, London SW7 2AZ, UK.*

*gonzalo.nunezm@usm.cl*

The decarbonization of the Chilean electrical system is a major challenge in meeting the national goal of net-zero emissions by 2050. The rapid growth of renewable sources such as solar and wind requires planning tools that evaluate cost-effective investment pathways while ensuring reliability and consistency with national energy targets.

An optimization model consistent with the ESO-XEL framework developed at Imperial College London is applied. The model is currently formulated as a linear program for capacity expansion and generation dispatch. It includes hourly electricity demand, reserve margins, inertia, transmission losses and CO<sub>2</sub> emission limits. The objective function minimizes the total system cost by accounting for investments, operating and fixed costs, and penalties for unserved demand and excess emissions.

To capture hourly variability without compromising computational performance, a clustering procedure of representative days is implemented using k-means. Days closest to the average demand profile are selected. Solar and wind profiles are derived from hourly meteorological capacity-factor data, using representative points of installed capacity weighted by regional generation. The hydroelectric profile is built from daily data published by the national system operator and the corresponding installed capacity.

The model is validated against 2024 national electricity generation data, showing less than 5% deviation in total generation and technology shares. Input variables include hourly demand, renewable capacity factors, technology investment and operation costs, energy-policy targets, emission parameters, and expansion limits, considering a planning horizon from 2024 to 2050.

Preliminary results show that achieving carbon neutrality by 2050 requires wind capacity to nearly triple and hydroelectric generation to almost double, together with an increasing use of natural gas replacing coal as a transitional measure. Even under these conditions, the net-zero target remains difficult to reach without additional measures, with carbon capture and storage (CCS) emerging as a key technological option to meet the national decarbonization goal. This initial analysis, based on publicly available data, demonstrates the usefulness of the model for guiding strategic decisions and highlights the need for official, updated datasets to refine future assessments. The next stage will extend the framework to a mixed-integer linear program (MILP) and include battery-energy storage, enabling a more detailed and robust evaluation of long-term scenarios.

## Dimensionamiento de planta de captura y almacenamiento de dióxido de carbono aplicado a la industria termoeléctrica

B. Díaz<sup>1</sup>, G. Núñez<sup>1</sup>

<sup>1</sup> *Departamento de Ingeniería Química y Ambiental, Universidad Técnica Federico Santa María, Campus San Joaquín, Santiago.*

*gonzalo.nunezm@usm.cl*

Este trabajo evalúa la viabilidad técnica y económica de implementar tecnologías de captura y almacenamiento de dióxido de carbono (CCS) en una planta termoeléctrica chilena, como una estrategia clave para la descarbonización del sector energético nacional. Se seleccionó la Central Termoeléctrica Cochrane como caso de estudio, debido a sus altas emisiones (2,28 Mton CO<sub>2</sub>/año), su elevado factor de emisión (0,91 tCO<sub>2</sub>/MWh) y la ausencia de un plan de cierre definido, lo que garantiza su relevancia y operatividad a largo plazo.

El diseño del proceso se desarrolló mediante simulación en Aspen HYSYS V14, mientras que los intercambiadores de calor se dimensionaron con Aspen Exchanger Design & Rating. Se modeló un sistema de captura por postcombustión basado en absorción química con una solución de monoetanolamina (MEA) al 40%, utilizando el paquete termodinámico *Acid Gas Chemical Solvent* por su precisión en sistemas con solventes químicos. El proceso incluye una etapa de absorción a 40 °C y una de desorción para regenerar el solvente, seguida de un tren de licuefacción de tres etapas de compresión y enfriamiento para llevar el CO<sub>2</sub> capturado a 15 bar y -28 °C, facilitando su transporte y almacenamiento. A través de un análisis de sensibilidad, se optimizaron las variables operacionales, identificando la energía del rehervidor como el parámetro más influyente en la eficiencia de captura, estableciéndose en 4 MJ/kg CO<sub>2</sub> para alcanzar el objetivo.

Los resultados indican que la planta diseñada puede capturar el 89% del CO<sub>2</sub> de los gases de combustión, obteniendo un producto con una pureza del 90% en la corriente gaseosa post-captura. La evaluación económica arrojó un costo de captura de 54,4 USD/ton CO<sub>2</sub>. Este valor es económicamente competitivo, ya que se encuentra dentro del rango reportado en estudios internacionales para centrales a carbón similares (40-70 USD/ton). El análisis de costos de capital (CAPEX) y operación (OPEX) reveló que los compresores de la etapa de licuefacción son el principal componente de la inversión (42% del costo total de equipos), mientras que el consumo de vapor en el rehervidor del desorbedor representa la mayor carga operativa (25% del OPEX).

Lo anterior demuestra que la implementación de un sistema CCS en la Central Cochrane es técnicamente factible y económicamente competitiva en el contexto global. Sin embargo, el estudio también subraya que se requieren mejoras en la eficiencia energética, particularmente en las etapas de alta demanda como la desorción y compresión, para reducir aún más los costos operativos y consolidar esta tecnología como una herramienta robusta en la transición energética de Chile.



## Determinación de trabajo mínimo para la captura de dióxido de carbono desde fuentes localizadas en centrales termoeléctricas chilenas

G. Deroy<sup>1</sup>, G. Núñez<sup>1</sup>

<sup>1</sup> *Departamento de Ingeniería Química y Ambiental, Universidad Técnica Federico Santa María, Campus San Joaquín, Santiago.*

*gonzalo.nunezm@usm.cl*

El sector energético chileno, principal emisor de gases de efecto invernadero del país (78%), enfrenta el desafío de una profunda descarbonización. En 2022, las centrales termoeléctricas emitieron más de 25 millones de toneladas de CO<sub>2</sub>, con las plantas a carbón contribuyendo el 63% de este total, a pesar de los planes de retiro progresivo. En este contexto, se evaluó el proceso de separación de CO<sub>2</sub> desde estas fuentes de emisión para determinar el trabajo termodinámico mínimo y los costos de captura asociados, sentando una base para la potencial implementación de tecnologías de captura y almacenamiento de carbono (CCS).

Para este análisis a nivel nacional, se procesaron grandes volúmenes de datos horarios de los últimos tres años (2021-2023) provenientes de las bases públicas del Registro de Emisiones y Transferencias Contaminantes (RETC) y del Sistema Nacional de Información de Fiscalización Ambiental (SNIFA). Se utilizó el lenguaje de programación Python por su flexibilidad para automatizar la extracción, filtrado y sistematización de estos extensos conjuntos de datos, permitiendo además la eliminación de valores anómalos asociados a detenciones de planta y puestas en marcha que podrían distorsionar los resultados. El trabajo mínimo se calculó mediante la ecuación de Gibbs- Duhem para un proceso de separación ideal, asumiendo una recuperación de CO<sub>2</sub> del 95% y una pureza del 90%, mientras que los costos se estimaron con un modelo matemático derivado del marco del *Integrated Environmental Control Model* (IECM), que correlaciona el costo de captura con la concentración inicial del gas.

Los resultados indicaron que los costos de captura resultaron ser significativamente menores en centrales a carbón (promedio 47-49 USD/ton) en comparación con las de gas natural (104-129 USD/ton) y diésel (99-112 USD/ton). Esta diferencia se atribuye directamente a la mayor concentración de CO<sub>2</sub> en los gases de combustión del carbón (promedio 11-12%) frente a la mayor dilución en las plantas de gas y diésel (promedio 3-4%). Al contextualizar estos hallazgos, los costos para centrales a carbón en Chile se ubican en el rango inferior de los valores reportados internacionalmente (ej. 50-268 USD/ton en EE.UU.), lo que confirma su viabilidad económica. De igual manera, los costos para centrales a gas natural se encuentran dentro del espectro internacional (ej. 48-290 USD/ton en EE.UU.).

Este estudio establece la primera línea de base termodinámica y económica para la captura de CO<sub>2</sub> en el parque termoeléctrico chileno, demostrando que es una alternativa técnicamente cuantificable. Los resultados ofrecen una herramienta crucial para que los responsables de políticas energéticas puedan priorizar esfuerzos y diseñar estrategias de descarbonización informadas, evaluando el rol de las tecnologías CCS en la transición de la matriz eléctrica nacional.

## ÁREA TEMÁTICA

TECNOLOGÍAS PARA LA INDUSTRIA MINERA



## Volumetric properties modeling of unsaturated solutions in the LiCl + NaCl + KCl + H<sub>2</sub>O system from 288.15 to 323.15 K using the Pitzer equations

Aldo N. Fuentes<sup>1</sup>, José D. Arriagada<sup>2</sup>, Yecid P. Jiménez<sup>1,3</sup>, Jesús M. Casas<sup>2</sup>, Francisca J. Justel<sup>2</sup>

<sup>1</sup>*Departamento de Ingeniería Química y Procesos de Minerales, Facultad de Ingeniería, Universidad de Antofagasta, Av. Angamos 601, Antofagasta, Chile.*

<sup>2</sup>*Departamento de Ingeniería de Minas, Metalurgia y Materiales, Universidad Técnica Federico Santa María, Av. España 1680, Valparaíso, Chile.*

<sup>3</sup>*Centro de Economía Circular en Procesos Industriales (CECPI), Facultad de Ingeniería, Universidad de Antofagasta, Av. Angamos 601, Antofagasta, Chile.*

[aldo.fuentes.fredes@ua.cl](mailto:aldo.fuentes.fredes@ua.cl)

Were investigated unsaturated aqueous solutions in the quaternary LiCl + NaCl + KCl + H<sub>2</sub>O system from 288.15 to 323.15 K, representative of Salar de Atacama brines for lithium processing. Densities for binaries (LiCl, NaCl, KCl in H<sub>2</sub>O) and ternaries (NaCl+KCl, LiCl+NaCl, LiCl+KCl in H<sub>2</sub>O) were measured with an Anton Paar DMA 1001 oscillating U-tube densimeter and complemented with vetted literature data. A temperature-dependent volumetric Pitzer formulation, including  $\theta^V$  and  $\psi^V$  terms, was calibrated by nonlinear least squares; skill was assessed using percentage standard deviation ( $\sigma$ ). The resulting parameter set provides temperature-dependent updates for LiCl+H<sub>2</sub>O and new ternary volumetric interactions for Li–Na–K–Cl.

The model reproduces density trends versus concentration and temperature across single-salt and mixed electrolytes, achieving <1% deviations in ternaries, and consistently yields apparent molar volumes and mixing volumes ( $\Delta V_m$ ).  $\Delta V_m$  at 298.15 K was analyzed for total ionic strengths  $I_{\text{Total}} = 1, 3, \text{ and } 6 \text{ mol}\cdot\text{kg}^{-1}$  as a function of the ionic strength fraction ( $y$ ): NaCl+KCl+H<sub>2</sub>O shows positive  $\Delta V_m$ ; LiCl+NaCl+H<sub>2</sub>O becomes increasingly negative with ionic strength; LiCl+KCl+H<sub>2</sub>O exhibits composition-dependent sign changes. These results deliver a coherent, predictive description of multicomponent chloride brines that supports mass balances, equipment design, and process simulation.

## USO DE POLIOXOMETALATOS INORGÁNICOS DE TUNGSTENO PARA LA EXTRACCIÓN DE TIERRAS RARAS EN UN SISTEMA ACUOSO BIFÁSICO

L. Muruchi<sup>1</sup>, J. Van Olmen<sup>2</sup>, H. Estay<sup>1</sup>, D. Millán<sup>3</sup>, T. Van Gerven<sup>3</sup>

<sup>1</sup>Advanced Mining Technology Center (AMTC), Universidad de Chile, Santiago 8370451, Chile.

<sup>2</sup>KU Leuven, Department of Chemical Engineering, Celestijnenlaan 200F, Beverlee (3001), Belgium.

<sup>3</sup>Centro Integrativo de Biología y Química Aplicada (CIBQA), Universidad Bernardo O'Higgins, General Gana 1702, Santiago, Chile.

*lucy.muruchi@amtc.uchile.cl*

Las tierras raras (REE) son un grupo de diecisiete elementos químicos, conformado por los quince lantánidos más el escandio (Sc) y el itrio (Y), los cuales son esenciales para aplicaciones tecnológicas avanzadas, como imanes, láseres, superconductores y dispositivos electrónicos. Se espera que su demanda crezca entre un 7 y 8 % anual en las próximas dos décadas, especialmente para elementos como neodimio (Nd) y disprosio (Dy). Actualmente, China domina las reservas y la producción de REE, lo que, junto a sus restricciones de exportación, ha impulsado la búsqueda de nuevas fuentes y tecnologías de obtención.

Este trabajo se enfoca en la etapa de extracción individual de toda la cadena de procesamiento de REE. Se investigó la extracción REEs como  $\text{Y}^{3+}$ ,  $\text{La}^{3+}$ ,  $\text{Pr}^{3+}$ ,  $\text{Nd}^{3+}$ ,  $\text{Eu}^{3+}$ ,  $\text{Tb}^{3+}$ ,  $\text{Dy}^{3+}$ ,  $\text{Er}^{3+}$  y  $\text{Yb}^{3+}$  en un sistema de dos fases acuoso (ATPS) formado por PEG/ $\text{MgSO}_4$ , utilizando polioxometalatos (POMs) como extractantes, bajo diversas condiciones. El aumento de los sitios vacantes en el POM y mayores concentraciones de POM intensificaron el efecto competitivo en la extracción de REEs. Una menor acidez también potenció este efecto, y la extracción dependió de la composición inicial de los REEs.

La separación óptima se logró utilizando una solución mixta de REEs a  $8,8\text{E-}4$  M, una relación molar  $\text{HCl}$ : REE de 67,5, una relación molar  $\text{Na}_{10}[\text{SiW}_9\text{O}_{34}]$ : REE de 3:1 y a una temperatura de  $25^\circ\text{C}$ , obteniéndose un 52 % de extracción para Tb y una selectividad promedio entre elementos REE adyacentes de 2,16. La tendencia de extracción siguió el número atómico de los REEs, con excepción del Y.

La retroextracción (stripping) de los REEs desde la fase ligera se realizó mediante precipitación utilizando cloruro de tetraetilamonio. Las técnicas de ICP y FT-IR indicaron el despojo de complejos REE: POM y de complejos REE: hidroxosulfato en función del  $\text{OH}^-$  presente en el sistema. El stripping de los REEs en los primeros complejos siguió la misma tendencia que en la extracción, mientras que el segundo tipo permitió un stripping selectivo de  $\text{La}^{3+}$ ,  $\text{Pr}^{3+}$ ,  $\text{Nd}^{3+}$  y  $\text{Eu}^{3+}$  como grupo. Según la literatura, los valores de selectividad obtenidos en este estudio durante la etapa de extracción son prometedores para procesos de separación individual de tierras raras. Por otro lado, el porcentaje de extracción del elemento con mayor número atómico podría mejorarse incrementando aún más la concentración del extractante, lo que, a su vez, potenciaría el efecto competitivo necesario para aumentar los valores de selectividad.

## LiOH production and Mg removal from Li-chloride brines and waste: A membrane-integrated approach for next-generation circular hydrometallurgy

C. González<sup>1</sup>, A. Arrué, G. Seriche, M. Quilaqueo<sup>1</sup>, N. Barraza, C. Bustamante<sup>1</sup>,  
M. Bravo-Guitierrez<sup>1</sup>, D. Zamora<sup>1</sup>, K. Pérez<sup>1</sup>, S. Díaz<sup>1</sup>, Troncoso  
Elizabeth<sup>2,3</sup>, H. Estay<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Advanced Mining Technology Center (AMTC), Universidad de Chile, Av. Tupper 2007, Santiago, Chile.

<sup>2</sup>Department of Chemistry, Universidad Tecnológica Metropolitana, Las Palmeras 3360, Ñuñoa, Santiago, Chile

<sup>3</sup>Instituto Universitario de Investigación y Desarrollo Tecnológico (IDT), Universidad Tecnológica Metropolitana, Ignacio Valdivieso 2409, San Joaquín, Santiago, Chile.

*michelle.quilaqueo@amtc.uchile.cl*

La producción convencional de litio a partir de salmueras de salares se basa principalmente en un enfoque de economía lineal, lo que resulta en grandes cantidades de residuos, un alto consumo de reactivos y pérdidas significativas de agua. Además, las tecnologías emergentes basadas en la extracción directa de litio no abordan completamente estos problemas y se enfocan principalmente en reducir las pérdidas de agua y aumentar la eficiencia de extracción de litio. Por lo anterior se propone diseñar un proceso que pueda producir directamente hidróxido de litio (LiOH) a partir de salmueras con base en cloruro. Esta nueva propuesta de proceso recibe el nombre de AMeLi, y permite remover eficientemente el magnesio utilizando un agente precipitante recuperado y reciclado, evitando así la generación de residuos adicionales y minimizando el consumo de reactivos. El proceso aprovecha los beneficios de la química del amoníaco e integra diferentes tecnologías de separación por membranas. El estudio se desarrolló a nivel de simulación del proceso realizando balances de masa y energía para estimar el rendimiento del proceso, como a nivel experimental, en donde se incluyeron validaciones de diferentes condiciones operacionales. Los resultados experimentales confirmaron una remoción eficiente de Mg, alcanzando un 95%, a partir de una alimentación inicial de salmuera de  $MgCl_2$  y LiCl, mediante un proceso de contactores de membrana. Fue posible remover el amoníaco remanente de la salmuera mediante un proceso de contactores de membrana, permitiendo su recuperación y reutilización. La salmuera de litio remanente fue tratada mediante un proceso de diálisis de Donnan, para eliminar el cloruro presente, obteniendo como producto una solución de LiOH, que posteriormente se concentró mediante un proceso de destilación-cristalización por membranas (MDCr), obteniéndose cristales de  $LiOH \cdot H_2O$ . Paralelamente, mediante el software Matlab se desarrollaron modelos fenomenológicos para cada etapa, incorporando resistencias en serie (considerando ensuciamiento y capas límite en alimentación y *stripping*), equilibrios de fase, cinéticas de precipitación, ecuaciones de transporte y modelos de neutralidad eléctrica. La modelación incluyó parámetros calibrables (relacionados con resistencias, cinéticas o coeficientes de transferencia), cuya estimación se realizó a partir de los datos experimentales y mediante técnicas de optimización orientadas a minimizar funciones de costo basadas en métricas de calidad como RMSE. La validación mostró un alto grado de ajuste, con RMSE inferiores al 8%, lo que evidencia que los modelos fenomenológicos propuestos representan adecuadamente las operaciones unitarias propuestas y capturan con eficacia los efectos de diferentes condiciones de operación. A partir de los modelos desarrollados, se simuló un sistema continuo e integrado que consideró todas las etapas del proceso. Las simulaciones, realizadas para una capacidad de tratamiento de 218 kg/h de salmuera y expresadas en función de toneladas de carbonato de litio equivalente (tLCE), estimaron un Capex de 4.1 kUS\$/tLCE/a, un Opex de 1.7 kUS\$/tLCE y una producción de cristales de LiOH con un 99% de pureza. Si bien estos valores son susceptibles de optimización, constituyen una base técnica y económica sólida para evaluar la viabilidad del proceso propuesto a escala industrial. El proceso AMeLi representa una alternativa innovadora y sustentable frente a los métodos convencionales, al integrar tecnologías de separación por membranas y aprovechar la química del amoníaco para la remoción eficiente de magnesio y la obtención directa de hidróxido de litio. Tanto los resultados experimentales como las simulaciones y modelaciones desarrolladas en Matlab evidencian una alta eficiencia del proceso, con una pureza de producto superior al 90% y una recuperación significativa de insumos como el amoníaco. La validación de los modelos fenomenológicos y las estimaciones preliminares de costos (Capex y Opex) demuestran que el proceso no solo es técnicamente viable, sino que también ofrece una base económica prometedora para su futura implementación a escala industrial.

## Adsorción columnar de metales pesados en RILes mineros utilizando carbón de cuesco de palta

N. Opazo<sup>1</sup>, P. Guerra<sup>1</sup>, M. Domínguez<sup>1</sup>

<sup>1</sup>*Departamento de Ingeniería Química y Ambiental, Universidad Técnica Federico Santa María, Chile.*

*nicolas.opazo@usm.cl*

La industria minera enfrenta serios desafíos ambientales, especialmente por la generación de drenaje ácido de mina (DAM), un residuo con bajo pH y alta concentración de metales pesados que amenaza la calidad del agua y los ecosistemas hídricos, especialmente en zonas como el norte de Chile. Ante esta problemática, el tratamiento de aguas residuales se vuelve fundamental, destacando la adsorción por su bajo costo y eficiencia. En este contexto, el cuesco de palta surge como un adsorbente prometedor, al ser un residuo agroindustrial rico en carbono que puede transformarse en un recurso útil, contribuyendo a la economía circular.

El carbón se obtuvo a partir de cuesco de palta mediante pirólisis a 600 °C durante 1 hora en atmósfera inerte de nitrógeno. Posteriormente, se tamizó para obtener un tamaño de partícula entre 150 y 355  $\mu\text{m}$ . Para los experimentos de adsorción columnar, se utilizó una columna de vidrio de 2,5 cm de diámetro interno, empacada con capas de cuarzo, arena y carbón de cuesco de palta. La alimentación del RIL sintético, compuesto por  $\text{Cu}^{+2}$  (20 mg/L) y  $\text{Fe}^{+3}$  (25 mg/L), se realizó desde la parte superior con un flujo de 15 mL/min, operando bajo condiciones de inundación. Se evaluaron diferentes configuraciones experimentales variando el pH (3 y 4) y la altura del lecho (2 y 4 cm).

El adsorbente fue caracterizado mediante espectroscopía FTIR y determinación de pH de carga cero, identificándose grupos funcionales oxigenados (hidroxilos y carbonilos) capaces de interactuar con iones metálicos. Se obtuvieron valores de  $\text{pH}_{\text{ZC}}$  5,7 para el cuesco crudo y 4,8 para el carbón, lo que confirma una mejora en la afinidad superficial hacia cationes a pH levemente ácido.

Los mejores resultados para  $\text{Cu}^{+2}$  se obtuvieron a pH 4 y altura de lecho de 4 cm, con una remoción del 57,9 % y  $q_{\text{max}}$  de 8,45 mg/g. Para  $\text{Fe}^{+3}$ , el mayor rendimiento fue a pH 3 con 4 cm de altura de lecho (32,3 % y 9,60 mg/g). En soluciones multicomponente se observó competencia iónica, disminuyendo la eficiencia de adsorción de ambos metales, afectando mayormente al  $\text{Fe}^{+3}$ .

A modo de comparación, otros estudios en condiciones similares utilizando también carbón obtenido a partir de cuesco de palta reportan una remoción del 87 % y  $q_{\text{max}}$  de 16,1 mg/g para el  $\text{Cu}^{+2}$ , mientras que para el  $\text{Fe}^{+3}$ , una remoción del 72 % y  $q_{\text{max}}$  de 9,46 mg/g.

Esta diferencia se explica principalmente porque el carbón utilizado en esta investigación no fue activado, mientras que en los estudios de referencia se aplicó activación química, proceso que incrementa significativamente el área superficial, genera nuevos grupos funcionales y mejora la afinidad del material hacia los iones metálicos.

El estudio demuestra que el carbón de cuesco de palta tiene potencial como adsorbente en sistemas continuos para el tratamiento de efluentes mineros, siendo una alternativa técnica y ambientalmente viable que contribuye tanto a la valorización de residuos como a la mitigación del impacto de la minería. Sin embargo, cabe destacar que todos los ensayos fueron realizados a escala de laboratorio, por lo que aún es necesario validar el desempeño del sistema en condiciones reales de operación y estudiar su posible escalabilidad a nivel piloto o industrial.



## **Estudio de la Interacción Molecular entre Calcopirita y Especies Representativas de Aguas de Baja Calidad Mediante Simulaciones DFT: Implicancias en el Proceso de Flotación**

L. Rios<sup>1</sup>, P. Robles<sup>2</sup>, G. Quezada<sup>3</sup>

<sup>1</sup>*Doctorado en Industria Inteligente, Facultad de Ingeniería, Pontificia Universidad Católica de Valparaíso, Valparaíso, Chile.*

<sup>2</sup>*Escuela de Ingeniería Química, Pontificia Universidad Católica de Valparaíso, Valparaíso, Chile.*

<sup>3</sup>*Escuela de Ingeniería Química, Universidad de Bio-Bio, Concepción, Chile.*

*luis.rios.c@mail.pucv.cl*

La creciente escasez de agua dulce en las zonas mineras de Chile ha impulsado el uso de aguas de baja calidad como alternativa en procesos de flotación, modificando las condiciones operativas del sistema, especialmente en presencia de gangas complejas como las arcillas. En particular, la alta concentración de sales y la presencia de iones disueltos pueden afectar la adsorción de colectores sobre calcopirita ( $\text{CuFeS}_2$ ), reduciendo su hidrofobicidad y, con ello, su flotabilidad. En este contexto, el objetivo del presente trabajo fue caracterizar la interacción molecular entre calcopirita y especies presentes en aguas de baja calidad mediante simulaciones DFT en CASTEP, para comprender su efecto sobre los mecanismos de adsorción involucrados en el proceso de flotación. Para ello, se diseñaron cinco sistemas que consideran la interacción entre la superficie de calcopirita y las especies representativas: ion hidroxilo ( $\text{OH}^-$ ), sodio ( $\text{Na}^+$ ), calcio ( $\text{Ca}^{2+}$ ), magnesio ( $\text{Mg}^{2+}$ ) y el colector O-isopropil-N-etil-tionocarbamato (IPETC). Cabe aclarar que se utilizó la superficie (1 1 2) de calcopirita, seleccionada por su estabilidad estructural y por exponer los principales sitios activos responsables de la interacción. Tras alcanzar la convergencia geométrica, calcular la energía de adsorción y analizar la configuración final, los resultados evidenciaron comportamientos diferenciados entre las especies.  $\text{OH}^-$  presentó alta afinidad, con adsorción química dirigida a centros metálicos.  $\text{Ca}^{2+}$  y  $\text{Mg}^{2+}$  mostraron fijación estable sobre la superficie, con potencial para bloquear sitios activos y reducir la adsorción posterior de colectores. En contraste,  $\text{Na}^+$  exhibió baja afinidad y una interacción débil, sin inducir modificaciones estructurales relevantes. Por su parte, IPETC se adsorbió selectivamente sobre átomos de Cu, con afinidad localizada y coherente con su función como colector ( $-0.77$  eV). A raíz de lo anterior, es posible inferir que, en un sistema mixto, las especies presentes en aguas de baja calidad, particularmente los cationes divalentes, compiten con el colector por los mismos sitios de adsorción en la superficie de calcopirita, reduciendo su fijación efectiva y, por tanto, la hidrofobicidad del mineral. En su conjunto, este análisis aporta una base racional para entender el comportamiento del mineral en medios de alta salinidad y orientar el diseño de estrategias más compatibles con dichas condiciones operativas.

Este trabajo fue financiado por el Proyecto Fondecyt Regular 1221702 del investigador Pedro Robles.

## **Economía Circular: Generación de mobiliario urbano usando escorias**

Jaime. Morales<sup>1-2</sup>, Rocío.Solis<sup>1-2</sup>, Javiera. Casanova<sup>1-2</sup>, Roberto. Parada<sup>1-2</sup>

<sup>1</sup>*Centro de Minería, Pontificia Universidad Católica de Valparaíso.*

<sup>2</sup>*Escuela de Ingeniería Química Pontificia Universidad Católica de Valparaíso.*

*Jaime.morales@pucv.cl*

La acumulación masiva de escoria de cobre representa un desafío significativo, ya que ocupa grandes extensiones de terreno, limitando su aprovechamiento para otros fines. Sin embargo, esta problemática puede convertirse en una oportunidad para promover la sostenibilidad.

La reutilización de la escoria de cobre en la industria de la construcción, particularmente en la fabricación de concreto y mobiliario urbano, fomenta una economía circular al transformar un residuo industrial en un recurso valioso. Esta práctica reduce la necesidad de disponer escorias en vertederos y contribuye a la sostenibilidad al disminuir la extracción de recursos naturales como la arena y la piedra.

El estudio de las escorias de fundición como un posible reemplazo parcial o total de áridos en obras civiles requiere una caracterización química exhaustiva. Para ello, se debe realizar un análisis de lixiviación característica de toxicidad (TCLP) y digestiones ácidas. Estos procedimientos permiten evaluar la composición química de las escorias y determinar su viabilidad ambiental y estructural.

Los resultados del análisis demostraron que la escoria presenta bajas concentraciones de elementos tóxicos según el Reglamento Sanitario sobre Manejo de Residuos Peligrosos (D.S. N° 148), confirmando que los materiales elaborados a partir de escorias no representan un riesgo medioambiental

La fabricación de mobiliario a base de escorias es una propuesta para dar utilidad a las escorias de fundición, además del beneficio medioambiental que supone. Estudios previos han mostrado la estabilidad química de la escoria y la solidez de muestras de hormigón a base de estas, esto ha definido a la escoria como un sustituto parcial de gravilla.

La fabricación de mobiliario urbano con escorias metalúrgicas no solo representa una solución técnica y ambientalmente viable, sino que además genera un importante bien social, aportando valor a la comunidad desde diversas perspectivas.

El empleo de escorias como materia prima contribuye a reducir los pasivos ambientales generados por la industria minera, transformando un residuo históricamente almacenado sin uso en un recurso con valor funcional y comercial. Esta revalorización no sólo beneficia al sector productivo, sino también a la sociedad en su conjunto, al disminuir los riesgos asociados al almacenamiento prolongado de residuos (como contaminación de suelos y paisajes degradados) y al fomentar una industria más consciente de su entorno.

El producto final de este proyecto está destinado principalmente al revestimiento de espacios públicos, como veredas, plazas o patios, por lo tanto, mejora directamente la infraestructura urbana disponible para la comunidad. Estas palmetas, además de tener un aspecto estético adecuado gracias a procesos como el vitrificado y el pigmentado, poseen la resistencia mecánica necesaria para ser utilizadas en zonas de tránsito peatonal.

## **Factibilidad de la extracción de cobalto y cobre mediante lixiviación agitada con ácido cítrico y ácido acético aplicados por separado en relaves de cobre.**

Jaime. Morales<sup>1-2</sup>, Joaquin Perez<sup>1-2</sup> <sup>1</sup>Centro de Minería, Pontificia Universidad Católica de Valparaíso.

<sup>2</sup>Escuela de Ingeniería Química Pontificia Universidad Católica de Valparaíso.

*Jaime.morales@pucv.cl*

Los relaves contienen elementos de gran valor, los que pueden ser extraídos con fines económicos y/o productivos. Un elemento en particular corresponde al cobalto. Desde relaves de cobre ya se ha obtenido cobalto, utilizando procesos tanto de flotación (en menor proporción) como de lixiviación con bacterias o simplemente lixiviación, variando el tipo de reactivos a utilizar (en mayor proporción). El problema de lo anterior recae en que las recuperaciones no son siempre las esperadas ni las ideales, como es el caso de la biolixiviación en columnas de fase inversa, en la que no se recuperó cobalto en las condiciones dadas [1]. Por lo anterior, por medio de esta experiencia se buscará optimizar un proceso de lixiviación agitada de relaves de cobre utilizando ácido acético como reactivo para influir directamente en la recuperación de cobalto como metal principal y cobre como subproducto y, con ello, aprovechar un desecho y disminuir tanto los riesgos como espacios ocupados que implican estos mismos. En esta etapa de estudio fueron ejecutadas 36 pruebas experimentales de lixiviación. Dichas pruebas se desarrollaron contemplando distintos reactivos evaluados por separado: ácido acético y ácido cítrico. También fueron evaluados 2 tipos de relaves distintos, R1 y R2; ambos fueron expuestos a distintas concentraciones de los reactivos mencionados y distintos tiempos de lixiviación. A pesar de ello, sólo el R2 mostró resultados positivos, es decir, desde este fue posible extraer distintas concentraciones de cobre y cobalto, mientras que con el R1 no se logró extraer algún metal; de haberlo hecho, los rangos de lectura no lo detectaron por ser una cantidad muy pequeña. Se observó que como el ácido cítrico y el ácido acético son quelantes, es decir, tienen la capacidad de capturar iones metálicos y formar quelatos, un aumento en la concentración de estos ácidos no implicó necesariamente una mayor extracción por parte del cobalto o cobre, dado que dichos complejos formados afectan directamente la disponibilidad del ácido libre y modifican la cinética de disolución. Sin embargo, el ácido acético mostró mejores resultados de extracción con concentraciones de 1 M, haciendo alusión a lo anteriormente mencionado, dado que con 2 M las extracciones bajaron, pero con 0.5 M también, por lo que se establece que si bien es un quelante, sus extracciones no se ven afectadas por esta capacidad como lo es con el ácido cítrico a la misma concentración. Aunque el ácido cítrico puede verse mayormente afectado con el aumento de la concentración, esto no es malo si de sostenibilidad se habla; es decir, sus mejores resultados se presentaron al trabajar con una concentración de 0.5 M, lo que es económicamente viable. Es más, las condiciones óptimas obtenidas tienen directa relación con lo recién mencionado, dado que en base a lo entregado por Minitab las mejores concentraciones de cobalto y cobre se obtuvieron al trabajar con ácido cítrico 0.5 M con un tiempo de lixiviación de 3 horas, siendo estas 0.413 mg/L y 4.2 mg/L, respectivamente. Esto señala que se puede utilizar preliminarmente este ácido debido a que no requiere de mucha concentración para presentar resultados favorables y porque a esta concentración no forma quelatos en la misma proporción en comparación a la cantidad generada cuando se trabaja con una mayor concentración. Si bien esto da un indicio por dónde proseguir, resulta necesario evaluar estas condiciones por medio de más pruebas experimentales de modo de no concluir precipitadamente.

## Modelación CFD multifásica y reactiva del proceso de fusión de concentrado de cobre en un horno tipo Convertidor Teniente

Carlos Ullrich<sup>1</sup>, Felipe Huerta<sup>1</sup>, Alvaro Videla<sup>1</sup>

<sup>1</sup>. *Departamento de Ingeniería Química y de Bioprocesos, Pontificia Universidad Católica de Chile, Santiago, Chile. [cullrich@uc.cl](mailto:cullrich@uc.cl)*

El cobre juega un rol estratégico en la transición energética global debido a sus excepcionales propiedades como conductor eléctrico. En Chile, su producción tiene una alta relevancia económica, lo que convierte la optimización de sus procesos en una necesidad tanto tecnológica como ambiental. La etapa de fusión, dentro de la ruta pirometalúrgica, presenta importantes oportunidades de mejora, especialmente en hornos tradicionales como el Convertidor Teniente (CT), cuya operación representa una fracción significativa de las emisiones en fundiciones. A pesar de sus más de 40 años de operación y diversas mejoras estructurales, actualmente no existen modelos computacionales basados en dinámica de fluidos (CFD) que integren de forma acoplada el flujo multifásico, la transferencia de calor y masa, y las reacciones químicas en el CT. Las aproximaciones previas corresponden a modelos CFD simplificados, generalmente 1-D o estacionarios, lo que limita el análisis detallado del comportamiento interno del convertidor y el desarrollo de estrategias efectivas de optimización. En esta investigación se creó un nuevo *solver* tomando como punto de partida *reactingMultiphaseEulerFoam* del software OpenFOAM. Se modificaron las ecuaciones de conservación de especies y energía para incorporar reacciones heterogéneas entre las fases escoria, mata y gas. Esto constituye la principal novedad del modelo y llena una brecha metodológica, pues las reacciones heterogéneas en fases fluidas han estado ausentes en códigos CFD gratuitos y de pago. La ecuación de conservación de especies con reacción heterogénea se validó frente a la solución analítica de una ecuación 1-D de difusión – reacción heterogénea. Esto confirmó la implementación adecuada del modelo de reacción y el acoplamiento de masa entre fases en una región representativa del CT.

El nuevo *solver* se aplicó para simular la fluidodinámica no estacionaria de una inyección de aire enriquecido en  $O_2$  en un subdominio 2-D de 15 cm de ancho y 1 m de alto. Este subdominio es equivalente a examinar el flujo interno dentro de una varilla en la profundidad de las fases escoria, mata y gaseosa en el CT. La simulación en el dominio simplificado entrega perfiles bidimensionales de velocidad y concentración de especies, avanzando en el cierre de la brecha existente en torno a la modelación de reacciones heterogéneas en el CT. La reacción modelada corresponde a la oxidación de calcopirita ( $CuFeS_2$ ), donde los reactantes son  $CuFeS_2$  y  $O_2$ , y los productos son  $Cu_2S$ ,  $FeS$ ,  $FeO$  y  $SO_2$ . El modelo se validó considerando una cinética casi-instantánea de reacción, ante la falta de datos experimentales precisos, permitiendo verificar el comportamiento esperado del sistema. El trabajo futuro consistirá en validar la implementación del balance de energía con reacción heterogénea. El modelo muestra que el acople de este fenómeno con la transferencia de masa interfacial genera dificultades en la convergencia del balance de energía e incrementos de temperatura espurios. Una vez incorporada la estrategia numérica para la resolución del balance de energía, el modelo se aplicará a la geometría física detallada del convertidor. Esto permitirá identificar zonas de acumulación de escoria rica en cobre y el perfil de temperatura en el convertidor. Además, el modelo constituirá una herramienta para analizar el impacto de la velocidad de inyección, la carga de sílice y el nivel de las fases en la eficiencia térmica y la reducción de pérdidas metalúrgicas del CT.

## Remoción de metales pesados desde aguas contaminadas mediante procesos de baja presión utilizando membranas de óxido de grafeno funcionalizado

M. Ayala-Clavería<sup>1</sup>, C. Carlesi<sup>1</sup>, J. Puig<sup>2</sup>, G. Olguín<sup>1</sup>

<sup>1</sup>*Programa de Magíster en Ingeniería de Procesos, Escuela de Ingeniería Química, Facultad de Ingeniería, Pontificia Universidad Católica de Valparaíso, Avenida Brasil 2162, postal code: 2362854, Valparaíso, Chile.*

<sup>2</sup>*Instituto de Investigaciones en Ciencia y Tecnología de Materiales (INTEMA), Consejo Nacional de Investigaciones Científicas y Técnicas/Universidad Nacional de Mar del Plata (CONICET/UNMdP), Av. Colón 10850, B7606WV, Mar del Plata, Argentina.*

*[martin.ayala@pucv.cl](mailto:martin.ayala@pucv.cl)*

Las membranas basadas en óxido de grafeno (GO) se perfilan como materiales altamente prometedores para tecnologías avanzadas de purificación de agua, incluyendo procesos de desalinización y la remoción de metales pesados. Este potencial se debe a su elevada permeabilidad al agua, alta selectividad frente a contaminantes, excelente resistencia mecánica y notable versatilidad química. No obstante, su desempeño puede verse limitado por fenómenos como la distorsión de los nanocanales, provocada por la hidratación de los grupos oxigenados presentes en las láminas de GO, lo que puede afectar tanto la selectividad como el transporte de iones a través de la membrana. Diversos estudios han demostrado que la funcionalización del GO mediante aditivos reticulantes (crosslinkers) permite estabilizar la estructura de los nanocanales, mejorando de manera significativa el rendimiento y la vida útil de las membranas. En este contexto, el presente trabajo evalúa la aplicación de membranas de GO funcionalizadas para la remoción de iones de metales pesados en aguas sintéticas, con especial énfasis en la interacción entre los mecanismos de adsorción y el desempeño en la separación. Dentro de los resultados del estudio, se destaca que la hidrofobicidad de la capa activa de GO, así como las interacciones electrostáticas entre la superficie cargada negativamente de las láminas de GO y los iones metálicos cargados positivamente, son factores determinantes que favorecen tanto la adsorción como el rechazo eficiente de los iones contaminantes. Adicionalmente, se realizó una clasificación de los crosslinkers según sus elementos de enlace: nitrogenados, oxigenados, y metálicos. Se pudo observar que los aditivos de tipo metálico y los basados en oxígeno presentan mejoras significativas en la eficiencia del tratamiento. La naturaleza química de los modificadores introducidos impacta de forma directa en las propiedades de la membrana, optimizando las interacciones hidrofóbicas y reforzando la selectividad frente a los contaminantes específicos (adsorción e interacciones electrostáticas). Las pruebas exploratorias de remoción de cobre mediante membranas funcionalizadas de GO muestran estabilidad operacional de flux sobre las 15 horas de operación. Sin embargo, la estabilidad del rechazo de contaminante varía según el crosslinker incorporado. Para las membranas funcionalizadas con etilendiamina mantiene un desempeño estable durante 6 horas (sobre 80% de rechazo), mientras que las membranas modificadas con glioxal y aluminio presentan una mayor estabilidad, alcanzando 17 y 16 horas, respectivamente. Estos resultados confirman el potencial de las membranas de GO funcionalizadas como soluciones sostenibles y energéticamente eficientes para el tratamiento de aguas contaminadas, ofreciendo un camino viable para su aplicación y escalamiento en tecnologías avanzadas de purificación y reutilización de aguas residuales.



## Enfoques Basados en DFT para el Estudio de los Mecanismos de Adsorción sobre Calcopirita en Procesos de Flotación

L. Ríos<sup>1</sup>, P. Robles<sup>2</sup>, G. Quezada<sup>3</sup>

<sup>1</sup>*Doctorado en Industria Inteligente, Facultad de Ingeniería, Pontificia Universidad Católica de Valparaíso, Valparaíso, Chile.*

<sup>2</sup>*Escuela de Ingeniería Química, Pontificia Universidad Católica de Valparaíso, Valparaíso, Chile.*

<sup>3</sup>*Escuela de Ingeniería Química, Universidad de Bio-Bio, Concepción, Chile.*

*luis.rios.c@mail.pucv.cl*

La eficiencia del proceso de flotación de calcopirita, principal mena de cobre a nivel mundial, está condicionada por las interacciones fisicoquímicas que ocurren entre el mineral y las especies presentes en el medio. En este contexto, la teoría del funcional de la densidad (DFT) se ha consolidado como una herramienta computacional robusta para el análisis a escala atómica de estos fenómenos, sin necesidad de recurrir a la experimentación directa. Ante la necesidad de contar con referencias técnicas que sintetizen el conocimiento actual y las tendencias emergentes en la aplicación de DFT para el estudio de los mecanismos de adsorción relevantes en la flotación de calcopirita, este trabajo presenta una revisión sistemática de la literatura que toma como referencia las directrices de PRISMA 2020. Para ello, se efectuó una búsqueda bibliográfica en las bases de datos Scopus y Web of Science, empleando palabras clave y operadores booleanos, y se aplicaron criterios de inclusión y exclusión para seleccionar los artículos más relevantes. Como resultado, se incorporaron 118 artículos en la revisión, clasificados en tres núcleos temáticos que guían el desarrollo actual del área. El primero comprende estudios centrados en la caracterización estructural y electrónica de la superficie de calcopirita, considerando defectos cristalinos, relajaciones superficiales y formación de especies reactivas. El segundo aborda la adsorción de los reactivos orgánicos empleados en flotación (colectores, depresores), considerando configuraciones de anclaje, transferencia de carga, enlaces interfaciales y energías de adsorción. El tercero examina las interacciones con especies inorgánicas (iones metálicos, aniones oxigenados) y los escenarios de coadsorción, con énfasis en la modificación del entorno superficial y los efectos competitivos o cooperativos que inciden en la eficiencia del proceso. En conjunto, se evidencia una correspondencia clara entre los enfoques teóricos y las observaciones experimentales reportadas, consolidando a DFT como puente integrador entre la simulación computacional, los ensayos de laboratorio (microflotación, ángulo de contacto, potencial zeta) y las técnicas analíticas (FTIR, XPS, AFM), para una caracterización más precisa de los mecanismos que gobiernan la flotación de calcopirita.

Este trabajo fue financiado por el Proyecto Fondecyt Regular 1221702 del investigador Pedro Robles.



## Evaluación técnica y económica de un proceso de evaporación y recuperación de agua para la concentración de litio utilizando un rotavapor digital

S. Palacios<sup>1</sup>, C. Leiva<sup>1</sup>, C. Cruz<sup>2,3</sup>, M. Gálvez<sup>1</sup>

<sup>1</sup> Departamento de Ingeniería Química y de Medio Ambiente, Universidad Católica del Norte, Avenida Angamos 0610, Antofagasta, Chile. [sebastian.palacios@alumnos.ucn.cl](mailto:sebastian.palacios@alumnos.ucn.cl)

<sup>2</sup> Departamento de Ingeniería Química y Ambiental, Universidad Técnica Federico Santa María, Avenida Vicuña Mackenna 3939, San Joaquín, Santiago, Chile.

<sup>3</sup> Centro Lithium I+D+i, Universidad Católica del Norte, Avenida Angamos 0610, Chile.

El litio se ha consolidado como un recurso estratégico en la transición energética hacia fuentes limpias debido a su rol clave en la generación y almacenamiento de energía. Chile, y en particular el Salar de Atacama, concentra una de las mayores reservas a nivel mundial, con recursos estimados en 9,1 millones de toneladas de LCE y salmueras con alta concentración de litio. El proceso convencional para la concentración de litio desde 0,14-0,2% hasta 6% en pozas solares presenta importantes desafíos como tiempos de residencia de 18-24 meses, elevada pérdida de agua mediante evaporación en un entorno de escasez hídrica, y baja recuperación de litio. En este contexto, el objetivo de la investigación es evaluar técnica y económicamente el proceso de evaporación de agua utilizando un rotavapor digital para concentrar litio en salmueras y recuperar agua. Esto permitirá simular la evaporación del agua en la salmuera bajo condiciones controladas, con la ventaja de recuperar agua mediante condensación y concentrar litio. Para ello, se desarrollaron pruebas de laboratorio exploratorias, considerando las variables operacionales del equipo; se identificaron las condiciones óptimas de operación para maximizar la recuperación de agua, y, finalmente, se analizó la viabilidad económica del escalamiento hacia un evaporador piloto.

El estudio, sin embargo, presenta ciertas limitaciones. Los experimentos se realizaron exclusivamente a una presión de vacío de 100 mbar, límite alcanzable del motor disponible, lo que impidió evaluar el efecto de presiones con mayor vacío. Asimismo, se utilizó una salmuera parcialmente diluida con una concentración de aproximadamente 2% p/p de litio, valor significativamente superior al de una salmuera natural del Salar de Atacama (0,2% p/p de litio), lo que restringe la representatividad directa de los resultados respecto a las condiciones iniciales de campo.

Se llevaron a cabo 29 ensayos experimentales definidos mediante un diseño Box-Behnken con cuatro factores, tres niveles por factor y cinco puntos centrales, considerando como variable de respuesta la masa de agua recolectada (g). Las variables analizadas correspondieron a la temperatura del baño calefactor (60, 70 y 80 °C), el tiempo de residencia (1, 2 y 3 h), la velocidad de rotación (150, 200 y 250 rpm) y la temperatura de enfriamiento (6, 8 y 10 °C). El análisis estadístico realizado en Minitab evidenció, a través del diagrama de Pareto, que la temperatura del baño calefactor fue la variable más influyente, seguida por el tiempo de residencia, mientras que la velocidad de rotación y la temperatura de enfriamiento no resultaron significativas. En este contexto, las condiciones óptimas de operación en el rotavapor digital se alcanzaron a 80 °C, 2 h de tiempo de residencia, 150 rpm de velocidad de rotación y 10 °C de temperatura de enfriamiento, recuperando

aproximadamente 208 g de agua de 300 mL de salmuera. Con un modelo ajustado que presentó un  $R^2$  predicho de 83,27%.

A fin de estimar el rendimiento del proceso, la tasa de evaporación de agua se calculó a 70 °C, nivel intermedio en el que se concentró un mayor número de ensayos. Para ello, se graficó la masa de agua recolectada (g) en función del tiempo de residencia (1 a 3 h), obteniéndose la pendiente de la curva como tasa de evaporación (g/h), la cual fue posteriormente normalizada respecto al área de evaporación estimada en 0,3 m<sup>2</sup>. De esta manera, se determinó una tasa específica de 3,362 L/m<sup>2</sup>h,

valor 2,32 veces superior al alcanzado en el proceso actual de pozas de evaporación solar. Con estos resultados, se proyectó el escalamiento a un evaporador piloto con un área de  $0,3 \text{ m}^2$ , estimándose una recuperación de 1.895 L de agua/año. No obstante, el análisis económico a tres años, con una tasa de descuento del 8%, arrojó un VAN de -109.951 USD, lo que indica que el proceso no resulta rentable bajo el precio actual de litio de 8.346 USD/t LCE. La viabilidad se alcanzaría con tasa de evaporación mínima de 29,280  $\text{L/m}^2\text{h}$  o con precios de venta superiores a 72.966 USD/t LCE. Cabe señalar que la aplicación de un mayor vacío podría mejorar la tasa de evaporación, incrementando así las probabilidades de alcanzar la rentabilidad del proceso.

Para trabajos futuros, se sugiere evaluar el efecto de distintos niveles de vacío, ya que permitiría disminuir la temperatura del baño calefactor y los tiempos de residencia, incrementando la tasa de evaporación y, con ello, la viabilidad del proceso. Asimismo, la incorporación de análisis químicos para caracterizar la composición iónica y el consumo energético de los equipos posibilitaría conformar un dataset robusto para aplicar técnicas de Machine Learning orientadas a optimizar tanto la evaporación como la recuperación de agua en cada etapa de precipitación fraccionada.

## Evaluation of the Modified Silica ( $\text{SiO}_2$ ) Nanoparticles as Frothing Agents in the Chalcopyrite Flotation process

Martha Claros<sup>1</sup>, Andrés Álvarez<sup>1</sup>, Francisca Saavedra<sup>1</sup>, Yanio Milián<sup>2</sup>

<sup>1</sup>Departamento de Ingeniería de Minas, Metalurgia y de Materiales, Universidad Técnica Federico Santa María, Valparaíso, Chile

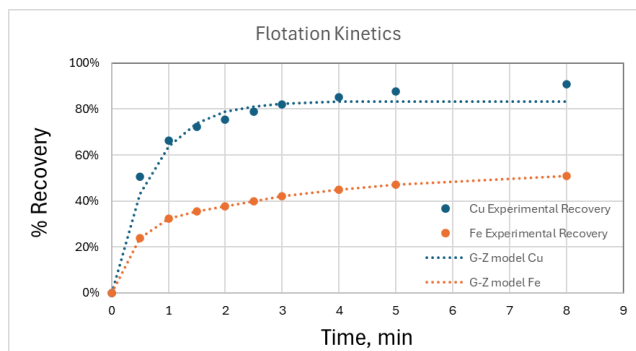
<sup>2</sup>Centro Ibérico de Investigación en Almacenamiento Energético (CIIAE), Polígono 13, Parcela 31, "El Cuartillo", 10004 Cáceres (Extremadura), España

[Martha.claros@usm.cl](mailto:Martha.claros@usm.cl)

Frothers are essential in mineral flotation, facilitating bubble formation and stability; however, conventional alcohol-based frothers such as methyl isobutyl carbinol (MIBC) and polyglycol alkyl alcohols (e.g., MathFroth 355) present environmental and health concerns [1]. Recent advances suggest that amphiphilic nanoparticles can enhance foam stability due to their unique surface energy properties [2]. This study explores the potential of amphiphilic modified silica nanoparticles as frothers in chalcopyrite flotation, targeting improved performance and sustainability.

Flotation tests were conducted by partially or fully replacing MathFroth 355 with  $\text{SiO}_2$ -NPs, using a pulp with 35% solids,  $P_{80} \approx 104 \mu\text{m}$ , pH 10, agitation speed of 1100 rpm, and airflow of 5 L/min in an Edemet flotation cell. Froth and tailing products were collected, dried, and analyzed via atomic absorption spectroscopy (AAS) to determine copper and iron concentrations. Copper recovery was calculated for each condition, and flotation kinetics were evaluated for the most effective condition using a first-order kinetic model.

The highest copper recovery (96%) was achieved using 100%  $\text{SiO}_2$ -NPs as the frother, outperforming the standard condition with MathFroth 355 alone (90.2%). Kinetic tests showed a maximum recovery of 90.8% after 8 minutes. Iron recovery remained approximately constant (~51%) across all tests, indicating no significant loss in selectivity. The kinetic data conformed to a first-order model, as seen in Figure 1.



These results demonstrate that silica nanoparticles are a promising and environmentally favorable alternative to conventional frothers in chalcopyrite flotation. Their ability to maintain or improve recovery, coupled with their lower toxicity, supports their potential for industrial application. Further investigations into the mechanisms of nanoparticle–bubble–mineral interactions are recommended to optimize their use in flotation circuits.

## Producción sostenible de magnesio metálico mediante electrólisis a baja temperatura con sales fundidas de residuos abundantes de la industria del litio

L. Fuentes<sup>1</sup>, C. Carlesi<sup>2</sup>

<sup>1</sup>Escuela de Ingeniería Química, Pontificia Universidad Católica de Valparaíso

[lorenzo.fuentes@pucv.cl](mailto:lorenzo.fuentes@pucv.cl)

La búsqueda de una producción sostenible de magnesio metálico ha cobrado un gran impulso debido al aumento de la demanda de materiales ligeros en diversas industrias y a la necesidad de mitigar el impacto medioambiental asociado a los métodos tradicionales de extracción. En la actualidad, la producción mundial de magnesio está dominada por procesos de reducción térmica y electrólisis de sales fundidas a alta temperatura ( $\sim 680^\circ\text{C}$ ), ambos costosos y perjudiciales para el medio ambiente. La industria del litio de Chile genera grandes cantidades de bischofita (principalmente  $\text{MgCl}_2 \cdot 6\text{H}_2\text{O}$ ) como residuo, lo que ofrece un recurso sin explotar para la producción sostenible de magnesio. Este proyecto aborda la urgente necesidad de investigación en el campo de la electrodeposición de magnesio explorando un enfoque novedoso que utiliza la electrólisis de sales fundidas a baja temperatura con solventes eutécticos profundos, dirigido específicamente a este abundante residuo de la industria chilena del litio.

Este proyecto tiene como objetivo desarrollar y validar un proceso innovador y energéticamente eficiente para producir magnesio metálico mediante electrodeposición a baja temperatura ( $110\text{-}140^\circ\text{C}$ ) utilizando solventes eutécticos profundos (DES). Los DES a utilizar en este proyecto son derivados de la bischofita, un subproducto del procesamiento de salmuera de litio. La tecnología propuesta ha superado una fase exploratoria, en la que la necesidad de utilizar temperaturas elevadas (superiores a la temperatura ambiente) y la imposibilidad de utilizar una membrana polimérica plantean nuevos retos científicos para su desarrollo. Por lo tanto, esta propuesta integra el uso de una membrana inorgánica funcionalizada a base de alúmina para permitir el transporte selectivo de iones cloruro, abordando los retos clave de los disolventes en cuanto a sensibilidad al agua, alta viscosidad e intensidad energética en los métodos convencionales de producción de magnesio.

La metodología incluye una síntesis y caracterización de DES, la purificación natural de bischofita mediante procesos de purificación para mejorar la concentración de  $\text{MgCl}_2$ , el desarrollo de membranas inorgánicas con capas selectivas (grafeno/ $\text{Fe}_2\text{O}_3$ ) sobre sustratos de alúmina y el diseño e implementación de un sistema de electrólisis libre de humedad con monitorización continua, con un sistema de calentamiento del electrolito que monitoriza el voltaje, la corriente, los cambios en las propiedades del electrolito y la eficiencia faradaica.

Los resultados esperados son la validación de un nuevo proceso en términos de un consumo energético (estimado mediante experimentación en laboratorio) menor a  $18\text{ MWh/tonelada}$  de magnesio (frente a los  $28\text{-}80\text{ MWh}$  de los métodos convencionales), la posibilidad de obtener un depósito de magnesio de alta pureza con una interferencia mínima de agua y la perspectiva de un proceso escalable que aproveche los residuos de la industria del litio de Chile basándose en la valorización de subproductos. En conclusión, se trata de un estudio pionero que aborda la producción sostenible de magnesio, ofreciendo una solución práctica para utilizar los residuos industriales, reducir el impacto medioambiental y expandir la industria minera «no metálica» chilena.

## Simulación de Dinámica Molecular para el Análisis de la Interacción entre Colectores y la Superficie de Espodumeno en la Flotación de Litio

L. Rios<sup>1</sup>, J. Retamal<sup>2</sup>, P. Robles<sup>2</sup>, G. Quezada<sup>3</sup>

<sup>1</sup>*Doctorado en Industria Inteligente, Facultad de Ingeniería, Pontificia Universidad Católica de Valparaíso, Valparaíso, Chile.*

<sup>2</sup>*Escuela de Ingeniería Química, Pontificia Universidad Católica de Valparaíso, Valparaíso, Chile.*

<sup>3</sup>*Escuela de Ingeniería Química, Universidad de Bio-Bio, Concepción, Chile.*

*luis.rios.c@mail.pucv.cl*

La flotación de espodumeno ( $\text{LiAlSi}_2\text{O}_6$ ) es una de las principales técnicas para la extracción de litio, un recurso de gran importancia económica y estratégica. Sin embargo, los colectores tradicionales como el oleato de sodio (NaOL) presentan baja recuperación y limitada selectividad frente a minerales de ganga. A causa de ello, se han explorado alternativas como la dodecilamina (DDA) y su combinación con NaOL para mejorar la eficiencia del proceso. En este contexto, las simulaciones de dinámica molecular (MDS) son una herramienta atractiva para estudiar la interacción entre el espodumeno y las moléculas colectoras, al permitir una evaluación cuantitativa y visual del fenómeno en cuestión. En tal sentido, el objetivo de este trabajo es analizar el comportamiento de los colectores ácido oleico (OLE) y dodecilamina (DDA) sobre la superficie de espodumeno, determinando los mecanismos de adsorción asociados a un mejor desempeño en la flotación de litio. Cabe aclarar que se utilizó la superficie (1 1 0) del espodumeno, seleccionada por su estabilidad y por exponer los principales sitios activos responsables de la interacción. Las estructuras moleculares fueron generadas en Gaussview y Vesta, y simuladas en Gromacs 2023.2 para obtener parámetros como la desviación cuadrática media (RMS), el perfil de densidad de adsorción, el conteo promedio de puentes de hidrógeno (H-bond) y la distancia media colector-superficie ( $d$ ). Los resultados indican que el OLE tiene una mayor afinidad por la superficie de espodumeno, formando enlaces de hidrógeno estables (H-bond = 1.728;  $d$  = 0.206 nm). En cambio, la DDA exhibe una interacción individual más débil (H-bond = 0.780;  $d$  = 1.484 nm), aunque en mezcla potencia la adsorción de OLE gracias a las interacciones hidrofóbicas entre ambas moléculas (H-bond = 1.636;  $d$  = 0.574 nm). En sistemas mixtos, ambos colectores se mantienen próximos entre sí, evidenciando un comportamiento cooperativo. Se concluye que el uso combinado de colectores OLE y DDA incrementa la afinidad por la superficie de espodumeno, proporcionando una base molecular aplicable al diseño de reactivos más eficientes para la flotación de litio. Asimismo, se demuestra que las MDS constituyen una herramienta de apoyo con alto potencial para optimizar la selectividad y recuperación en procesos de flotación a escala industrial.

Este trabajo fue financiado por el Proyecto Fondecyt Regular 1221702 del investigador Pedro Robles.

## Estabilización de Cátodos NMC811 para baterías ión litio mediante Co-dopaje con $\text{Ti}^{4+}$ y $\text{Mo}^{6+}$ vía Síntesis Mecanoquímica

R. Segura<sup>1</sup>, B. Chandía<sup>1</sup>, M. De Roth<sup>1</sup>, S. Lopez<sup>1</sup>, G. Cáceres<sup>1</sup>, E. Muñoz<sup>1</sup>, A. Caballero<sup>2</sup>, V. Rojas<sup>3</sup>, J. Cisternas<sup>3</sup>

<sup>1</sup>Pontificia Universidad Católica de Valparaíso, Facultad de Ciencias. Avda. Universidad 330, Valparaíso <sup>2</sup> Universidad de Córdoba, Departamento de Química Inorgánica e Ingeniería Química, E-14014, Córdoba, España, <sup>3</sup>Universidad Católica del Norte Departamento de Química, Facultad de Ciencias, Av. Angamos 0610, Antofagasta.

[Ricardo.Segura@pucv.cl](mailto:Ricardo.Segura@pucv.cl)

Los cátodos de óxidos mixtos ricos en níquel, como el  $\text{LiNi}_{0.8}\text{Mn}_{0.1}\text{Co}_{0.1}\text{O}_2$  (NMC811), son materiales prometedores para baterías de alta densidad energética, pero su aplicación se ve limitada por una severa inestabilidad estructural durante el ciclado. Este trabajo se centra en la estabilización de la estructura del NMC811 mediante la incorporación de dopantes ( $\text{Ti}^{4+}$  y  $\text{Mo}^{6+}$ ) a través de una ruta de síntesis mecanoquímica en estado sólido, evaluando su impacto en las propiedades estructurales y electroquímicas del material.

La síntesis de los materiales se llevó a cabo mezclando precursores de óxidos metálicos y carbonato de litio en un molino de bolas, seguido de un tratamiento térmico de pre-calcinación y calcinación final a 900 °C. Se prepararon muestras de NMC811 sin dopar y co-dopadas con diferentes concentraciones de  $\text{Ti}^{4+}$  y  $\text{Mo}^{6+}$ . La caracterización estructural se realizó mediante Difracción de Rayos X (XRD), y el comportamiento electroquímico se evaluó mediante Voltametría Cíclica (VC) en celdas de tipo botón.

Los resultados de XRD confirmaron que la ruta mecanoquímica permitió obtener exitosamente la fase laminar deseada (grupo espacial R-3m) en todas las muestras. La incorporación efectiva de los dopantes en la red cristalina se evidenció por un ligero desplazamiento de los picos de difracción. El hallazgo más significativo se obtuvo del análisis electroquímico: mientras que el NMC811 comercial muestra picos redox agudos asociados a las transiciones de fase asociadas a la degradación estructural ( $\text{H1} \rightarrow \text{M} \rightarrow \text{H2} \rightarrow \text{H3}$ ), estos fueron eficazmente suprimidos en todas las muestras co-dopadas. Este resultado constituye una evidencia de que el co-dopaje con  $\text{Ti}^{4+}$  y  $\text{Mo}^{6+}$  estabiliza la estructura del NMC811, previniendo los cambios de fase que conducen a la degradación. Sin embargo, la síntesis mecanoquímica mostró un desorden catiónico (mezcla  $\text{Li}^+/\text{Ni}^{2+}$ ) considerable, lo que sugiere la necesidad de optimizar la homogeneidad del material.

La síntesis mecanoquímica es una ruta efectiva para incorporar dopantes de  $\text{Ti}^{4+}$  y  $\text{Mo}^{6+}$  en la red del NMC811, logrando una notable estabilización de la estructura cristalina. Como proyección de este trabajo, se está trabajando actualmente en una nueva etapa de investigación que utilizará la síntesis por coprecipitación, buscando un mejor control sobre la morfología del material, buscando además estudiar el efecto de la localización espacial del dopante (bulk, superficial y en gradiente) como una estrategia para optimizar aún más la estabilidad electroquímica del material.



## Hacia controladores predictivos más robustos en flotación a través del análisis de incertidumbre en la recuperación de aire.

P. Quintanilla<sup>1</sup>, A. Fuenzalida<sup>2</sup>, D. Navia<sup>2</sup>

<sup>1</sup>*Chemical Engineering Department, University College London.*

<sup>2</sup>*Departamento de Ingeniería Química, Universidad Técnica Federico Santa María.*

*agustin.fuenzalida@usm.cl*

La recuperación de aire constituye un indicador clave del desempeño de la flotación, ya que el aire es el medio de transporte que permite la adhesión de las partículas de interés a las burbujas y su posterior separación de la ganga. Por lo tanto, se reconoce como una medida de estabilidad y eficiencia del proceso. Sin embargo, esta variable depende de factores indirectos de difícil medición en línea, como la distribución de tamaños de burbuja, la composición mineralógica de la alimentación o la ley de cabeza, lo que introduce incertidumbre estructural en las estrategias de control y limita el desarrollo de herramientas robustas de apoyo a la toma de decisiones operacionales.

Con el fin de abordar esta limitación, este trabajo propone un marco metodológico orientado a la cuantificación de dicha incertidumbre y al análisis de su impacto sobre la recuperación máxima de aire (Peak Air Recovery, PAR). El enfoque propuesto, combina el uso de índices de Sobol para un análisis de sensibilidad global, con inferencia bayesiana para la actualización probabilística de parámetros inciertos, todo en el contexto de un modelo dinámico de celda de flotación basado en balances diferenciales de masa, cinéticas de captura dependientes de la hidrodinámica y fenómenos acoplados de transferencia de materia en la fase líquido-espuma. La metodología se implementó en simulación matemática transiente de 300 s, compatible con estrategias de control predictivo no lineal (NMPC), lo que asegura la capacidad de extrapolar los resultados hacia aplicaciones en lazo cerrado en entornos industriales.

Los resultados permiten establecer una jerarquía de variables en función de su contribución a la incertidumbre en la recuperación de aire. Se confirma que la velocidad superficial de aire es la variable operacional dominante, aunque los índices de segundo orden revelan interacciones significativas entre variables operacionales y el régimen de espuma, cuyo efecto resulta crítico al analizar escenarios realistas. Asimismo, la inferencia bayesiana se proyecta como un mecanismo esencial para integrar información experimental o de planta, reduciendo la brecha entre simulación y operación y aumentando la confiabilidad de las predicciones. En conjunto, este marco metodológico ofrece una base sólida para el diseño de controladores predictivos más robustos y adaptativos, capaces de anticipar perturbaciones, mitigar inestabilidades y contribuir a una operación más eficiente, confiable y sostenible de los circuitos de flotación a escala industrial.

## Desarrollo de una herramienta de simulación y optimización para la planificación operacional en pozas de evaporación solar en SQM industrial S.A.

C. Ochoa<sup>1,2</sup>, D. Navia<sup>1</sup>

<sup>1</sup>*Departamento de Ingeniería Química, Universidad Técnica Federico Santa María,  
daniel.navia@usm.cl*

<sup>2</sup>*Líder de Procesos, SQM Industrial S.A., cochoa@usm.cl*

El sistema de pozas de evaporación de SQM Industrial S.A. produce sales a partir de la evaporación solar de una salmuera denominada BFA, proveniente de la lixiviación de caliche. Esta solución, rica en iones nitrato, sulfato, cloruro, potasio y magnesio, se concentra por acción de las condiciones ambientales —velocidad del viento, temperatura y humedad relativa—, generando la precipitación de sales como  $\text{NaNO}_3$ ,  $\text{NaCl}$  y compuestos de magnesio, entre otras. El objetivo principal del proceso es la obtención de nitrato de sodio, siendo el magnesio la impureza más relevante que condiciona la calidad del producto.

En 2021, SQM Industrial S.A. implementó una herramienta computacional predictiva para apoyar la planificación del sistema de pozas, basada en métodos heurísticos. Sin embargo, las variaciones en la composición de las salmueras, las condiciones operacionales y los parámetros ambientales han disminuido su precisión, haciendo necesaria su actualización.

El presente trabajo describe la reformulación de la herramienta de simulación y proyección mediante un enfoque de programación matemática, integrando modelos ambientales recientes, y resultados de campañas piloto. La implementación se realiza en la plataforma gPROMS, incorporando un módulo de optimización orientado a dimensionar de manera eficiente el área de evaporación requerida, según condiciones operacionales actuales, y ambientales proyectadas.

El nuevo sistema de apoyo a la toma de decisiones, que incluye modelos actualizados de evaporación y radiación solar, junto con relaciones cinéticas revisadas entre la temperatura y las reacciones de precipitación en distintas etapas del sistema, se ha validado utilizando datos reales de producción y rendimiento correspondientes a los años 2024–2025. Se espera que esta herramienta sea establecida como modelo predictivo para la planificación operacional de las pozas de evaporación solar.

## Simulación numérica del flujo no saturado en residuos mineros usando Python: base para el modelamiento del drenaje ácido.

Vicente Casas<sup>1</sup>, Felipe Huerta, Álvaro Videla

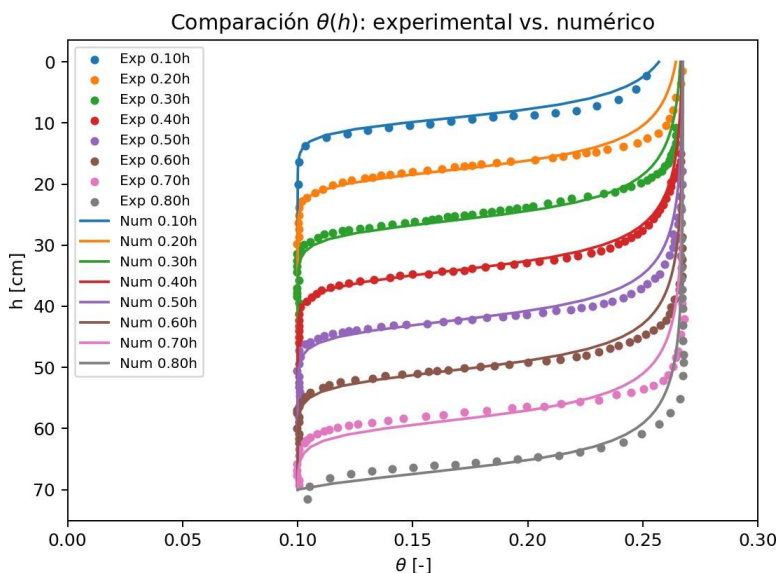
<sup>1</sup>Pontificia Universidad Católica de Chile, Escuela de Ingeniería, Santiago Chile.

vicentecasas@uc.cl.

El drenaje ácido de mina (DAM) es una externalidad ambiental persistente asociada a la oxidación de sulfuros y la movilización de metales, cuya predicción requiere representar adecuadamente el flujo en medios porosos no saturados. Este trabajo desarrollará un modelo 1D en Python basado en la ecuación de Richards para simular flujo no saturado en relaves, como base para el acoplamiento posterior de transporte reactivo y geoquímica. El objetivo general es construir y validar una herramienta abierta y modular que permita resolver casos de referencia y comparar formulaciones numéricas bajo condiciones representativas de relaves.

La metodología implementa diferencias finitas en el espacio y esquemas explícitos/semi-implícitos en el tiempo, contrastando el método de Euler frente al método de disparos. La validación se realiza inicialmente con el caso experimental de infiltración en arena reportado por Haverkamp et al. (1977), reproducido en código, comparando perfiles transitorios de contenido de humedad y presión matricial mediante métricas de error.

Los resultados esperados indican que el método de Euler ofrece robustez frente a cambios en condiciones de borde y funciones de retención, mientras que el método de disparos puede ser competitivo en dominios simples y mallas finas. La implementación en Python favorece la reproducibilidad y la extensibilidad del código para capturar la generación y transporte de acidez y metales. En conjunto, el modelo proporciona una base transparente para explorar escenarios de DAM en residuos mineros, apoyar el diseño de estrategias de mitigación y acortar la brecha entre herramientas académicas y necesidades operacionales.



## Photothermal Properties of a Nanocomposite Membrane incorporating Magnetite ( $\text{Fe}_3\text{O}_4$ ) nanoparticles.

A. Shirzadi<sup>1</sup>, A. García <sup>1,2</sup>

<sup>1</sup> Mining Engineering Department, FCFM, Universidad de Chile, Av. Tupper 2069, Santiago 8370451, Chile

<sup>2</sup> Advanced Mining Technology Center (AMTC), Universidad de Chile, Av. Tupper 2007, Santiago 8370451, Chile

[Azadeh.shirzadi@ug.uchile.cl](mailto:Azadeh.shirzadi@ug.uchile.cl), [andreina.garcia@amtc.cl](mailto:andreina.garcia@amtc.cl)

Magnetite ( $\text{Fe}_3\text{O}_4$ ) nanomaterials are considered highly promising for various applications, including water purification, due to their strong magnetism, excellent adsorption performance, and environmental compatibility. These cost-effective nanomaterials and their composites can be easily separated, regenerated, and reused. In this study,  $\text{Fe}_3\text{O}_4$  nanoparticles were synthesized via a hydrothermal method using ferric chloride hexahydrate ( $\text{FeCl}_3 \cdot 6\text{H}_2\text{O}$ ) as the precursor, with ethylene glycol as the solvent, sodium acetate as an additive, and EDTA as a stabilizer. The synthesized  $\text{Fe}_3\text{O}_4$  nanoparticles were characterized by multiple techniques. Characterization showed an average size of  $2.3 \mu\text{m}$  ( $\text{PDI} = 28.9\%$ , DLS), spherical morphology and nanocluster formation (SEM), and spinel cubic structure (XRD). Photothermal testing demonstrated a  $14.9^\circ\text{C}$  increase under light exposure. Furthermore, contact angle measurements on PVDF composite membranes showed a decrease from  $85.5^\circ \pm 1.1^\circ$  (bare membrane) to  $67.2^\circ \pm 0.4^\circ$  after incorporating the  $\text{Fe}_3\text{O}_4$  nanoparticles, indicating improved surface hydrophilicity. As a result, the nanocomposite membrane incorporating magnetite ( $\text{Fe}_3\text{O}_4$ ) exhibits notable photothermal properties and enhanced surface hydrophilicity. These improvements underscore its strong potential for water treatment and provide a solid foundation for future optimization at an industrial scale.

## Destilación osmótica ultrarrápida para la concentración de salmueras de litio utilizando líquidos iónicos hidrofílicos como fase receptora y la recuperación de agua

R. Cabezas<sup>1</sup>, F. Mora<sup>1</sup>, F. Olea<sup>1</sup>

<sup>1</sup> *Departamento de Química Ambiental, Facultad de Ciencias, Universidad Católica de la Santísima Concepción, Concepción, Chile.*

[rene.cabezas@ucsc.cl](mailto:rene.cabezas@ucsc.cl)

La creciente demanda de litio, impulsada por la transición energética y la expansión de la electromovilidad, ha puesto en evidencia las limitaciones del proceso convencional de evaporación solar empleado en el Salar de Atacama, donde se concentra más del 40% de las reservas mundiales. Aunque este método presenta una elevada eficiencia energética ( $\approx 97\%$  basada en energía solar), requiere tiempos de residencia de hasta 18 meses, ocasiona pérdidas cercanas al 20% y no contempla la recuperación de agua, lo que plantea serias interrogantes sobre su sostenibilidad en zonas áridas. Frente a este escenario, se requieren con urgencia tecnologías alternativas que permitan concentrar salmueras de manera más rápida, eficiente y ambientalmente responsable. En este trabajo se evaluó la destilación osmótica (DO) como estrategia emergente para la concentración de salmueras de litio, utilizando líquidos iónicos (LI) hidrofílicos como fase receptora. La DO es un proceso de transferencia de masa impulsado por un gradiente de actividad de agua a través de una membrana hidrofóbica macroporosa, que permite la evaporación selectiva del agua desde la salmuera hacia la fase receptora sin necesidad de calentar todo el sistema. Los ensayos experimentales se realizaron con salmueras sintéticas de litio y NaCl (1-4.5M) y LI basados en imidazol [omim][Cl] y [bmim][CH<sub>3</sub>OSO<sub>3</sub>], bajo condiciones isotérmicas a 30 °C. Se evaluaron distintas relaciones volumétricas entre la salmuera y el LI, y los resultados se compararon con simulaciones de transferencia de masa. Los experimentos demostraron una remoción ultrarrápida de agua, alcanzando flujos máximos de  $1,26 \text{ kg} \cdot \text{m}^{-2} \cdot \text{h}^{-1}$ . Estos valores superan ampliamente la velocidad del proceso de evaporación solar y son comparables con tecnologías de membranas presurizadas, pero con la ventaja de operar a bajas temperaturas y con menor demanda energética. Además, la composición de la salmuera se mantuvo estable, evitando pérdidas de litio o precipitaciones salinas indeseadas. Un aspecto diferenciador de esta propuesta es la recuperación directa de agua desde la fase receptora mediante regeneración por microondas. Tras la etapa de DO a 30 °C, el LI cargado se alimentó a un módulo de microondas hasta 383 K, condensando el vapor en una trampa fría y devolviendo el LI seco al contactor. Se alcanzaron extracciones de agua de 92,9% con [omim][Cl] y 99,5% con [bmim][CH<sub>3</sub>OSO<sub>3</sub>] en solo 360 s de residencia. El agua residual en el LI tras la regeneración fue  $\leq 0,3 \text{ kg} \cdot \text{m}^{-3}$ , confirmando la reutilización del solvente sin pérdida de desempeño. En conclusión, DO con LI hidrofílicos constituye una alternativa viable y sostenible para intensificar la concentración de salmueras de litio. Los próximos pasos incluyen optimizar la regeneración del LI, evaluar membranas cerámicas anticristalización y validar el proceso con LI industriales en salmueras reales del Salar de Atacama. Este enfoque se proyecta como una ruta prometedora para reducir tiempos de operación, mejorar la recuperación de litio y contribuir a la seguridad hídrica mediante la valorización del agua extraída. **Agradecimientos al Consorcio Sur-Subantártico CI2030 - Universidad Católica de la Santísima Concepción**

## **Análisis del equilibrio sólido-líquido de sistemas binarios y pseudobinarios de DES tipo - V, para la extracción de iones metálicos**

M. Aguilar<sup>1</sup>, Y. Jimenez<sup>2</sup>

<sup>1</sup>*Departamento de Ingeniería Química y Procesamiento de Minerales, Facultad de Ingeniería, Universidad de Antofagasta, Avenida Angamos 601, Antofagasta 1240000, Chile.*

*MARCELO.AGUILAR.BASTOS@ua.cl*

La escasez de recursos naturales y el alto valor económico de las placas de circuito impreso (PCB), cuya mayor parte proviene de metales preciosos como el oro, la plata, el cobre y los metales de tierras raras, impulsan el desarrollo de métodos eficientes para su recuperación. Aproximadamente el 90% del valor de las PCB se atribuye a estos metales, por lo que su recuperación contribuye significativamente a la conservación del medio ambiente.

Este estudio analiza sistemas de equilibrio sólido-líquido (SLE) basados en disolventes eutécticos profundos (DES) hidrofóbicos tipo V, que favorecen la extracción selectiva de metales valiosos. Se investigaron mezclas binarias formadas por lidocaína (LD), tetracloruro de amonio (TBAC) y ácido decanoico (DA), donde este último destaca por su doble función como aceptor (HBA) y donante (HBD) de enlaces de hidrógeno, otorgando fundamentos termodinámicos sólidos para su aplicación industrial sostenible. No obstante, estos DES presentan una alta viscosidad que dificulta su escalado industrial, por lo que se estudió la adición de cosolventes para analizar su influencia en la viscosidad y el comportamiento de los sistemas pseudobinarios formados, así como su formación de equilibrio sólido-líquido y caracterización fisicoquímica.

La predicción de los diagramas de equilibrio sólido-líquido se realizó mediante el modelo COSMORS, implementado en el software COSMOtherm (versión 21.0) con parametrización BP-TZVP. Con base en las predicciones teóricas, se determinaron las condiciones aproximadas de temperatura y composición para la temperatura eutéctica, las cuales fueron validadas experimentalmente. En los sistemas pseudobinarios se utilizó butanol con pureza del 99.99% en proporciones del 10 y 20% en peso. Los resultados confirmaron que los sistemas AD-LD y TBAC-AD presentan un comportamiento típico de DES, con temperaturas eutécticas significativamente inferiores entre 70 y 80 °C por debajo del valor ideal lo que evidencia una interacción sinérgica entre sus componentes. Además, la adición de cosolventes produjo una reducción en los puntos de fusión de los sistemas SLE y una disminución notable de la viscosidad. Este hallazgo es fundamental para el diseño y optimización de procesos industriales eficientes, seguros y económicamente viables, promoviendo el desarrollo de tecnologías limpias y competitivas dirigidas al reciclaje sostenible de metales en diversas industrias.



## A Computational Intelligence-Based Approach for Balancing Coarse and Fine Particles in Comminution

Freddy A. Lucay<sup>1,2</sup>

<sup>1</sup>*Escuela de Ingeniería Química, Pontificia Universidad Católica de Valparaíso*

<sup>2</sup>*Escuela de Ingeniería Informática, Pontificia Universidad Católica de Valparaíso.*

*freddy.lucay@pucv.cl*

Chile's mining sector, central to the economy, faces rising energy demand, water scarcity, greater waste, declining grades and more complex sulphide ores. These ores are primarily processed via froth flotation, which requires finely liberated particles (optimally  $\sim 20\text{-}150\ \mu\text{m}$ ), which drives intensive comminution and high energy/water use. Grinding energy in Chile has risen substantially, prompting adoption of measures such as high-pressure grinding rolls and early gangue rejection via coarse particle flotation. This early gangue rejection (coarse flotation  $>150$ ) can reduce energy consumption, increase mill capacity and mitigate the generation of fines and ultrafines.

However, many porphyry deposits in Chile contain roughly 30% soft to moderately soft clay minerals that readily produce ultrafine and fine particles during comminution. These fines form slimes that worsen slurry rheology, coat particles, increase entrainment and thus impair both flotation and comminution performance. Their low settling velocity reduces clarified-water recirculation in thickeners. Additionally, fines, particularly when associated with pyrite, can promote acid drainage in tailings, mobilizing toxic or heavy metals and raising environment concerns. Mitigation methods such as flocculants, hydrocyclones, dispersants and ultrasound, are commonly used but act mainly as remediation. They raise operational costs, and some chemical additives can cause particle aggregation and precipitation of ions (e.g., magnesium carbonates/sulphates).

Reducing ultrafine and fine particles can hinder ore liberation, negatively affecting flotation, even in circuits with early gangue rejection. Metrics such as  $P_{20}$  and  $P_{80}$  capture coarse and fine particle fractions and are therefore pivotal when linking comminution setting to flotation outcomes. Optimising this trade-off requires a multi-objective approach, which is particularly complex, as changes in the comminution system's equipment parameters can influence the product size distribution in non-uniform ways, generating instances where  $P_{80}$  and  $P_{20}$  increase or decrease simultaneously, whereas in others, one may increase while the other decreases.

To address this, we formulate a surrogate-assisted multi-objective optimisation problem that minimises ultrafine generation while preserving an optimal particle-size distribution for early gangue rejection. Surrogate models, derived from simulated comminution systems, facilitate uncertainty quantification and reduce the dimensionality of the operational space, enabling algorithms to approximate the Pareto front effectively. The sensitivity analysis reveals that the most influential factors in generating ultrafine and fine particles include the ore feed rate to the plant, the Bond work index, the critical speed, and the volume of ball loading in ball mills. The influential input variables affecting coarse particles are the fraction of solids fed to hydrocyclones, the ore feed rate to the plant, the Bond work index, the critical speed, and the volume of ball loading in ball mills. Evaluation of seven multi-objective evolutionary algorithms in this reduced space shows that CNSGAI, SMS-EMOA, NSGAI, and AGEMOEA strike the best compromise between minimising fines and retaining coarse particles.

## Optimización de la transferencia de calor en una poza para la recuperación de $\text{KNO}_3$ mediante modelamiento matemático CFD/FEM

Benjamín Marchant<sup>1\*</sup>, Diego Bracho<sup>2</sup>, J. Cristian Salgado<sup>1</sup>

<sup>1</sup>PMDC Lab, Departamento Ingeniería Química, Biotecnología y Materiales, Universidad de Chile.

<sup>2</sup>Gerencia Técnica, SQM Yodo Nutrición Vegetal.

\*Email: benjamin.marchant@ug.uchile.cl

El nitrato de potasio es una sal esencial para la nutrición vegetal, el cual tiene un valor de mercado de alrededor \$1000 USD/Ton. El nitrato de potasio de origen mineral se produce en plantas químicas mediante el proceso de cristalización, desde soluciones concentradas en cristalizadores. Dentro de esta, para evitar la precipitación de compuestos indeseados, parte de la solución circulante se purga a un sistema de pozas (tren de purgas), donde se recupera parte del nitrato de potasio presente en la solución purgada mediante cristalización en pozas.

En este trabajo se plantea un modelo matemático que permite simular numéricamente el comportamiento térmico de estas pozas bajo condiciones operacionales y ambientales reales y evaluar estrategias operativas para maximizar la transferencia de calor y aumentar la recuperación de  $\text{KNO}_3$ .

En el presente proyecto, se planteó un modelo matemático que resuelve los balances de momentum, energía y masa en conjunto con los fenómenos ambientales de radiación, convección forzada y evaporación de forma transiente en el software CFD, COMSOL Multiphysics.

Este modelo se utiliza para explorar la configuración geométrica de la poza permitiendo investigar el efecto en el perfil espacial de la temperatura y la recuperación de nitratos, respecto a la posición, caudal y número de puntos de alimentación.

La resolución numérica se realizó con el método de elementos finitos (FEM). El problema transiente/no lineal se resolvió con Newton totalmente acoplado y MUMPS como solver lineal directo (matriz dispersa). Se empleó una tolerancia de convergencia sobre la norma del residuo de  $1\text{e-}12$  y un control de paso temporal BDF de orden variable con adaptatividad automática entre los rangos 0.1-10 segundos.

Resultados preliminares muestran que la configuración geométrica y operativa actual presenta oportunidades de mejora en la optimización del gradiente térmico disponible, dado que según modelo se estima un 30% de volumen muerto de la poza. El modelo fue sometido a una optimización manual de las posiciones y caudales de alimentación orientada a minimizar el volumen muerto del equipo. El ajuste generó un campo térmico más uniforme y redujo en un 10% el volumen muerto total de la poza, mejorando así el aprovechamiento del gradiente térmico y aumentando la cantidad de sales recuperadas.

### Agradecimientos

Este trabajo fue financiado por SQM YNV.

## **Biolixiviación de tierras raras a partir de relaves mineros utilizando bacterias nativas solubilizadoras de fosfato.**

**Gabriel Gálvez**<sup>1,2</sup>, Jaime Ortega<sup>1,2</sup>, Gladis Serrano<sup>1,2</sup>, Mauricio Latorre<sup>1,2,3</sup>

1. Laboratorio de Bioingeniería; Instituto de ciencias de la ingeniería; Universidad de O'Higgins, Rancagua, Chile.

2. Centro de biología de sistemas para el estudio de comunidades extremófilas de relaves mineros (SYSTEMIX), Universidad de O'Higgins, Rancagua, Chile.

3. Millennium Institute Center for Genome Regulation (CRG), INTA, Universidad de Chile, Santiago, Chile.

Email: [gabriel.galvez@postdoc.uoh.cl](mailto:gabriel.galvez@postdoc.uoh.cl)

La recuperación de elementos de tierras raras (REEs) desde relaves mineros mediante procesos biológicos constituye una alternativa sustentable frente a los métodos hidrometalúrgicos convencionales. En este estudio se evaluó el potencial de bacterias nativas del relave Cauquenes para solubilizar REEs a través de biolixiviación heterotrófica, con especial énfasis en la identificación de aislados eficientes y la validación de formulaciones con efecto sinérgico. Los primeros dos aislados corresponden a: *Pseudomonas alvandae* y *Pseudomonas rustica*, las cuales fueron sometidas a pruebas en condiciones controladas utilizando relave Cauquenes y monacita como matrices minerales de biolixiviación. En ambos casos, las cepas lograron movilizar elementos estratégicos como Ce, La, Nd e Y en concentraciones significativamente superiores al control positivo. Las eficiencias alcanzadas fueron notoriamente altas, llegando a valores hasta 8 –9 veces superiores al control biológico reportado en literatura, lo que confirma el potencial de estos aislados para aplicaciones en biominería.

Con el objetivo de incrementar el rendimiento del proceso obtenido para estas dos bacterias, se exploraron formulaciones binarias combinando ambas cepas con otras especies nativas aisladas (n = 100, colección SYSTEMIX). Del total de combinaciones, se identificaron dos formulaciones con efecto sinérgico comprobado: (i) *P. alvandae* + *Arthrobacter* sp. y (ii) *P. rustica* + *Paenarthrobacter nicotinovorans*. Ambas formulaciones mostraron un aumento significativo en la extracción total de REEs respecto a los cultivos individuales, acompañado de una mayor acidificación del medio y mayor liberación de compuestos solubilizantes de REE.

Los resultados obtenidos evidencian que la biolixiviación de REEs mediada por bacterias nativas del relave Cauquenes no solo es factible, sino que puede ser optimizada mediante el diseño de consorcios específicos, representando un avance significativo hacia el desarrollo de biotecnologías limpias aplicables a la valorización de pasivos ambientales mineros.

Financiamiento: ANILLO ANID ACT210004; CMM ACE210010; MiCRG ICN2021\_044; Fondo Basal FB210005; FONDECYT 1230194; BASAL UOH-BioSav

## ÁREA TEMÁTICA

BIOTECNOLOGÍA E INDUSTRIA DE ALIMENTOS



XXII  
Congreso  
Chileno de  
Ingeniería  
Química

## Exfoliación de $\text{MoS}_2$ asistida por microondas: análisis estructural y biofuncional

Daylenis Pérez<sup>1</sup>, Katherina Fernández<sup>1</sup>, Luisbel González<sup>1</sup>, Claudio Aguayo<sup>2</sup>, Toribio

Andrés Figueroa<sup>1</sup>

<sup>1</sup>*Biomaterials Laboratory, Department of Chemical Engineering, Faculty of Engineering, University of Concepción, Chile*

<sup>2</sup>*Department of Clinical Biochemistry and Immunology, Faculty of Pharmacy, University of Concepción, Chile*

*dayperez@udec.cl*

La exfoliación de  $\text{MoS}_2$  mediante microondas representa una técnica eficiente y rápida para obtener nanoláminas funcionales con propiedades bioactivas. En este trabajo, se seleccionó una mezcla de disolventes (acetona, agua y butanodiol) mediante parámetros de solubilidad de Hansen y energía libre de Gibbs, favoreciendo la interacción polar durante la irradiación. La caracterización estructural y morfológica mediante XRD y SEM confirmó una reducción del tamaño cristalino y la formación de láminas delgadas y dispersas, demostrando la eficacia del proceso de exfoliación. La biocompatibilidad se evaluó mediante ensayos de citotoxicidad in vitro en fibroblastos humanos (HDF), obteniéndose viabilidades superiores al 80%. Además, se determinó la capacidad antioxidante mediante el ensayo DPPH, mostrando una actividad antioxidante significativa. Estos resultados respaldan la obtención de  $\text{MoS}_2$  exfoliado con propiedades bioactivas, potencialmente aplicables en diversas áreas tecnológicas y biomédicas, tales como el desarrollo de apósitos inteligentes para la cicatrización de heridas, sistemas de liberación controlada de fármacos, ingeniería de tejidos, biosensores electroquímicos y electrodos flexibles para almacenamiento energético.

## Effect of thermal homogenization on candelilla wax and canola oil oleogels

Nicole Iturra<sup>1</sup>; Marcela Quilaqueo<sup>1</sup>; Samantha De Pinho<sup>2</sup>; Mónica Rubilar<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Departamento de Ingeniería Química, Facultad de Ingeniería y Ciencias, Universidad de La Frontera. Avenida Francisco Salazar 01145, Temuco, Chile.

<sup>2</sup>Departamento Engenharia de Alimentos, Faculdade de Zootecnia e Engenharia de Alimentos (FZEA), Universidade de São Paulo (USP), Pirassununga – SP, Brasil.

*n.iturra03@ufromail.cl*

Oleogels are solid or semi-solid matrices in which oil droplets are trapped within a three-dimensional network formed by a structuring agent, without compromising the nutritional quality of the oil. Currently, they represent a promising alternative to replace saturated fatty acids (SFA) and *trans* fatty acids (TFA) in processed foods, improving the nutritional profile without adversely affecting their organoleptic properties (texture, aroma, color, and flavor). The functional and chemical properties of oleogels such as oil binding capacity (OBC), firmness, and oxidative stability depend on the type and concentration of the structurant, the nature of the oil phase, and the cooling and storage conditions. The objective of this study was: To evaluate the effect of the homogenization of wax crystals by reheating the oleogels at low temperatures (30°C, 35°C and 40°C) on their OBC and firmness. The oleogels were prepared with canola oil and candelilla wax. First, a screening of OBC was carried out to select the oleogels with OBC  $\geq 90\%$  (this level of oil retention, considered adequate in the literature, indicates a stable and well-structured three-dimensional network), evaluating three wax concentration (3, 6 and 9%). OBC was determined via centrifugation at 7000 rpm for 40 minutes at 4 °C. Firmness was assessed using a texture analyzer with a penetration probe, and oxidation was evaluated through the peroxide value. The results showed that oleogels with 6% and 9% wax exhibited OBC values  $\geq 90\%$  ( $96.7 \pm 0.70\%$  and  $99.04 \pm 0.15\%$ , respectively), and were therefore selected for further processing. Following physicochemical characterization, 9% oleogels showed significantly higher firmness compared to the non-homogenized control ( $198.4 \pm 2.6$  g), with the sample treated at 40 °C exhibiting the highest value ( $346.2 \pm 6.8$  g). Among the 6% oleogels, only the sample treated at 40 °C showed a significant increase ( $184.7 \pm 10.7$  g) compared to the control ( $129.0 \pm 4.3$  g). The firmness enhancement induced by thermal homogenization may allow for a reduction in wax concentration, enabling greater oil incorporation while minimizing sensory impact, particularly in terms of flavor. Regarding oxidation, the 9% homogenized oleogels showed a significant increase in peroxide value ( $3.53 \pm 0.19$  mEq O<sub>2</sub>/kg oil) compared to the control ( $2.70 \pm 0.0001$  mEq O<sub>2</sub>/kg oil), with no significant differences among the homogenized samples. A similar trend was observed for the 6% oleogels, where the treated samples exhibited higher initial peroxide values ( $3.53 \pm 0.28$  mEq O<sub>2</sub>/kg oil) than the control ( $1.97 \pm 0.0007$  mEq O<sub>2</sub>/kg oil). Also, the microstructure of the oleogels was evaluated using polarized light microscopy, revealing a reorganization and increased homogeneity of the internal structure. In conclusion, oleogels formulated with 6% and 9% candelilla wax demonstrated effective oil retention and improved mechanical strength following homogenization at 40 °C, likely due to reorganization of the crystalline structure and a reduction in crystal size. Although an increase in oxidative markers was observed, the values remained within the maximum permissible limits established by the Codex Alimentarius.



## **Efecto del pretratamiento ultrasónico sobre la hidrólisis enzimática de proteínas de subproductos de la industria alimentaria y sus propiedades funcionales**

S. Nuñez<sup>1</sup>, C. Barrera<sup>1</sup>, C. Cárdenas<sup>2</sup>, F. Guzmán<sup>2</sup>, D. Vásquez<sup>1</sup>, P. Valencia<sup>3</sup>,  
A. Córdova<sup>3</sup>, A. Levican<sup>4</sup>, W. Acevedo<sup>5</sup>

<sup>1</sup>*Escuela de Ingeniería Química, Pontificia Universidad Católica de Valparaíso, Valparaíso, Chile.*

<sup>2</sup>*Núcleo de Biotecnología Curauma, Pontificia Universidad Católica de Valparaíso, Valparaíso, Chile.*

<sup>3</sup>*Escuela de Alimentos, Pontificia Universidad Católica de Valparaíso, Valparaíso, Chile.*

<sup>4</sup>*Escuela de Tecnología Médica, Pontificia Universidad Católica de Valparaíso, Valparaíso, Chile.*

<sup>5</sup>*Instituto de Química, Pontificia Universidad Católica de Valparaíso, Valparaíso, Chile.*

*suleivys.nunez@pucv.cl*

En el marco de la valorización de subproductos agroindustriales y bajo el enfoque de economía circular, este estudio evaluó el efecto del pretratamiento ultrasónico sobre la hidrólisis enzimática de proteínas provenientes de tres matrices ricas en proteína: esquelones de salmón, pulpina de pollo y pulpina de pavo. Se analizó la eficiencia de hidrólisis y las propiedades funcionales de los hidrolizados resultantes, incluyendo su capacidad antioxidante, de retención de agua (CRA) y actividad antimicrobiana.

El pretratamiento ultrasónico se aplicó bajo dos condiciones (modo continuo y pulsado), antes de la hidrólisis con la enzima Alcalasa. Se midieron parámetros como el grado de hidrólisis (GH), la extracción de nitrógeno, el rendimiento y la susceptibilidad proteolítica. La actividad antioxidante se evaluó mediante los métodos DPPH y ABTS, y la CRA se determinó como pérdida de agua en muestras cárnicas procesadas térmicamente. La actividad antimicrobiana se ensayó frente a cepas patógenas alimentarias mediante el método de dilución en agar.

Los resultados indican que el ultrasonido mejoró significativamente ( $p \leq 0,05$ ) la eficiencia de la hidrólisis en pulpina de pollo y pavo, incrementando la liberación de grupos  $\alpha$ -NH hasta en un 30% en comparación con las muestras sin ultrasonido. En cuanto a la capacidad antioxidante, los hidrolizados tratados lograron una captura del 52% del radical DPPH y del 51% del radical ABTS a una concentración de 10 mg/mL, siendo estos valores dependientes de la concentración y superiores a los del trifosfato de sodio (STPP). En cuanto a la CRA, los hidrolizados de pulpina de pollo con pretratamiento ultrasónico en modo continuo y discontinuo lograron una pérdida de agua de solo 19%, lo que representa una reducción del 58% en comparación con el control negativo. En cuanto a la capacidad antimicrobiana, a las concentraciones evaluadas, los hidrolizados tratados no mostraron inhibición de bacterias representativas de patógenos asociados a los alimentos. Estas mejoras demuestran que el ultrasonido es una herramienta eficaz para optimizar la hidrólisis enzimática y revalorizar los subproductos alimentarios. Dado su alto rendimiento funcional, especialmente en capacidad antioxidante y retención de agua, los hidrolizados obtenidos podrían valorizarse como ingredientes funcionales con potencial uso como antioxidantes naturales o agentes retenedores de agua en alimentos procesados.

## Síntesis Enzimática de 5- Estearil-hidroximetilfurfural operando en un Biorreactor por Lotes y Continuo de Lecho Empacado.

N. Guajardo<sup>1</sup>, N. Gajardo-Parra<sup>1</sup>, R. Canales<sup>1</sup>, M.E. Lienqueo<sup>2</sup>

<sup>1</sup>*Departamento de Ingeniería Química y Bioprocesos, Escuela de Ingeniería, Pontificia Universidad Católica de Chile, Santiago, Chile.*

<sup>2</sup> *Centro de Biotecnología y Bioingeniería (CeBiB), Departamento de Ingeniería Química, Biotecnología Y Materiales, Universidad de Chile, Santiago, Chile.*

*nadia.guajardo@uc.cl*

La reducción de recursos fósiles para la generación de energía y la fabricación de diversos compuestos de interés comercial ha desencadenado la búsqueda de alternativas para su fabricación a partir de fuentes renovables para lograr la sostenibilidad. Entre estas alternativas se encuentran los furanos obtenidos a partir de residuos lignocelulósicos en la producción de bioetanol. El furano con mayor potencial es el 5-hydroxymethylfurfural (HMF), que se puede funcionalizar para producir bioplásticos, combustibles líquidos y ésteres. Las reacciones de esterificación enzimática son una alternativa para la funcionalización del HMF. Estas reacciones son más sostenibles y pueden generar productos de interés comercial, como agentes de mezcla para combustibles, monómeros de polimerización, surfactantes naturales, fungicidas y biolubricantes [1]. Motivados por sus potenciales aplicaciones, el objetivo de este trabajo fue evaluar la esterificación de HMF y ácido esteárico catalizada por lipasas inmovilizadas utilizando solventes de base biológica en biorreactores por lotes y continuo de lecho empacado.

La selección del solvente se realizó llevando a cabo la esterificación de HMF y ácido esteárico en presencia de 2-methyl-3-buten-2-ol (2-MB), cyclopentyl methyl ether (CMPE), Tert-butanol (TB), y 2-methyl-THF (2-THF) a 50°C, con una agitación de 165 rpm, durante cuatro días. Las mejores conversiones (50%) se alcanzaron a una concentración de 15 mM y 250 mM de HMF y ácido esteárico respectivamente, catalizada por la lipasa CALB inmovilizada (Novozym 435®) en presencia del solvente CMP, que fue seleccionado para llevar a cabo las siguientes pruebas experimentales.

Se realizaron cinéticas de conversión de HMF con CMP en un biorreactor por lotes a diferentes concentraciones de HMF y temperatura, siendo el mejor resultado un 60 % de conversión utilizando un 30 mM de HMF 250 mM de ácido esteárico, 165 rpm y 40 °C, catalizada por Novozym 435®.

Se realizaron pruebas de estabilidad operacional del biocatalizador en condiciones de reacción con el solvente CMPE a 30 mM HMF y 250 mM de ácido esteárico a una temperatura de 40 °C durante 1 día en biorreactores por lotes sucesivos. Luego de 4 ciclos de reúso el biocatalizador conservó su actividad inicial. En los biorreactores continuos (volumen del biorreactor 2,8 cm<sup>3</sup>), se estudiaron diferentes flujos de alimentación (0,02 ml/min, 0,03 mL/ min y 0,05 mL/ min), alcanzándose el mejor resultado (70%) con un flujo de 0,02 mL/ min, empleando una concentración de 30 mM de HMF y 250 mM de ácido esteárico. Cabe señalar que después de las 2 horas de reacción la conversión baja drásticamente, probablemente debido a que el producto de reacción se queda en el biocatalizador obstruyendo el sitio activo de la enzima. De acuerdo con estos resultados se puede concluir que existe la factibilidad técnica para la producción de ésteres de HMF con aplicaciones como compuesto biolubricante.

## Assessing the Effect of Deep Eutectic Solvents on $\alpha$ - Chymotrypsin Thermal Stability and Activity

Nicolás Gajardo-Parra<sup>a,\*</sup>, Esteban Cea-Klapp<sup>b</sup>, Roberto Canales<sup>a</sup>, José Matías Garrido<sup>b</sup>, Christoph Held<sup>c</sup> and Nadia Guajardo<sup>a</sup>

<sup>a</sup>Departamento de Ingeniería Química y Bioprocesos, Pontificia Universidad Católica de Chile, Avenida Vicuña Mackenna 4860, Macul, Santiago, Chile

<sup>b</sup>Departamento de Ingeniería Química, Universidad de Concepción, Víctor Lamas 1290, Concepción, Chile

<sup>c</sup>Laboratory of Thermodynamics, Department of Biochemical and Chemical Engineering, TU Dortmund University, Emil-Figge-Str. 70, 44227 Dortmund, Germany

\* Email: nfgajardo@uc.cl

The protein's ability to form intricate structures is captivating as it involves biophysical, structural, and catalytic properties. A crucial aspect of protein structural stability consists in describing the forces governing the biomolecular interactions in liquid environments, which are essential for maintaining a protein molecule in its specific rigid conformation. Optimizing the liquid reaction phase holds significant potential for enhancing the efficiency of biocatalytic processes since it determines reaction equilibrium and kinetics. This study investigates the influence of the addition of Deep Eutectic Solvents (DES) on the stability and activity of  $\alpha$ -chymotrypsin ( $\alpha$ -CT), a proteolytic enzyme with applications in food, pharmaceutical and wastewater industries. DES composed of choline chloride or betaine mixed with glycerol or sorbitol, were added in the reaction phase at various concentrations. Experimental techniques, including kinetic and fluorometry, assessed the  $\alpha$ -CT enzymatic activity, thermal stability, and unfolding reversibility. Several thermodynamic parameters were recovered from the unfolding curves as shown in Figure 1, in order to discriminate the positive effects on enzyme

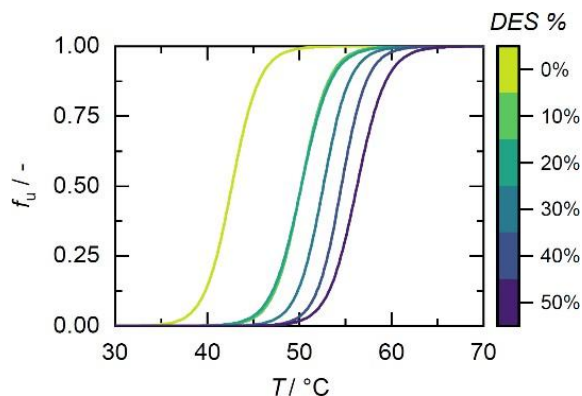


Figure 1: Unfolded fraction sigmoidal curves for  $\alpha$ -CT in choline chloride+sorbitol at several concentrations

stability qualitatively. Atomistic molecular dynamics simulations were also conducted to assess the interactions and provide molecular-level insights between  $\alpha$ -CT and the solvent.

The results showed that among all studied mixtures, adding choline chloride + sorbitol improved thermal stability up to 18 °C and reaction kinetic efficiency up to two-fold upon adding choline chloride + glycerol. Notably, the choline chloride + sorbitol system exhibited the most substantial stabilization effect, attributed to the surface preferential accumulation of sorbitol, as corroborated by the computational analyses. Molecular dynamics simulations revealed that DES reduced the structure flexibility of  $\alpha$ -CT, leading to an enhanced stability of the active site region. This stabilizing effect is facilitated by the water exclusion phenomenon, which arises due to the interactions between the  $\alpha$ -CT surface and the DES that were analyzed using minimum-distance distribution functions and Kirkwood-buff integrals. This work highlights the potential of tailoring the liquid reaction phase of  $\alpha$ -CT catalyzed reaction using neoteric solvents such as DES to enhance  $\alpha$ -CT performance and stability in industrial applications.

## **Análisis Bibliométrico de la Productividad Científica sobre Propiedades Funcionales e Hidrólisis Enzimática de Proteínas a partir de Subproductos**

S. Plaza<sup>1</sup>, S. Nuñez<sup>2</sup>, Y. Masip<sup>3</sup>, P. Valencia<sup>4</sup>

<sup>1</sup>*Programa de Magíster en Ingeniería de Procesos, Escuela de Ingeniería Química, Pontificia Universidad Católica de Valparaíso, Valparaíso, Chile*

<sup>2</sup>*Escuela de Ingeniería Química, Pontificia Universidad Católica de Valparaíso, Valparaíso, Chile*

<sup>3</sup>*Escuela de Ingeniería Mecánica, Pontificia Universidad Católica de Valparaíso, Valparaíso, Chile*

<sup>4</sup>*Escuela de Alimentos, Pontificia Universidad Católica de Valparaíso, Valparaíso, Chile*

*sebastian.plaza.d@mail.pucv.cl*

El creciente interés por los alimentos funcionales ha impulsado una amplia producción científica en torno a los hidrolizados de proteínas obtenidos por hidrólisis enzimática, especialmente a partir de subproductos agroindustriales. Estos compuestos destacan por sus propiedades antioxidantes, antihipertensivas y bioactivas, con aplicaciones potenciales en las industrias alimentaria, farmacéutica y nutracéutica. En este contexto, el presente estudio realiza un análisis bibliométrico exhaustivo de 1498 artículos indexados en la base Web of Science durante el período 2015–2025, con el objetivo de mapear la evolución del conocimiento, identificar las líneas temáticas predominantes, los actores más influyentes y las oportunidades emergentes para la valorización de residuos mediante tecnologías enzimáticas.

La metodología se basó en una estrategia avanzada de búsqueda en el campo temático (TS), empleando combinaciones booleanas para integrar los ejes conceptuales de hidrólisis proteica, funcionalidad y sostenibilidad. Los datos se procesaron mediante Biblioshiny (RStudio) y VOSviewer, permitiendo generar mapas de coocurrencia, redes de colaboración institucional y análisis de citación. Se aplicaron filtros de calidad para depuración de duplicados, normalización de palabras clave y consolidación de metadatos relevantes.

Los resultados muestran un crecimiento sostenido en la producción científica a partir de 2018, destacándose como principales temas de investigación las “propiedades funcionales”, los “péptidos bioactivos” y la “actividad antioxidante”. Se identificaron seis clústeres temáticos interconectados, orientados hacia la optimización de procesos, la evaluación biofuncional de péptidos, la economía circular y el aprovechamiento de fuentes proteicas alternativas como subproductos marinos, vegetales e insectos. Instituciones como el CSIC (España) y Jiangnan University (China), junto con autores como Wubshet SG y Afseth NK, lideran la producción e impacto en el campo. Revistas como Foods, Food Chemistry y LWT concentraron la mayor cantidad de publicaciones relevantes.

Se concluye que el área presenta un alto grado de madurez temática, con oportunidades claras de innovación en metodologías in silico, validación funcional y revalorización de residuos alimentarios. Este análisis proporciona una visión estratégica para orientar futuras investigaciones y desarrollar tecnologías sostenibles basadas en proteínas funcionales derivadas de subproductos.

## **Efecto del extracto etanólico de pomasa de maqui (*Aristotelia chilensis*) sobre la estabilidad térmica de aceites vegetales no refinados con diferente grado de insaturación**

Marcos Flores<sup>1</sup>, Sebastián Muñoz<sup>1</sup>, Jaime Ortiz-Viedma<sup>2</sup>

<sup>1</sup> Departamento de Horticultura, Facultad de Ciencias Agrarias, Universidad de Talca, Campus Lircay, Talca 3460000, Chile.

<sup>2</sup> Departamento de Ciencia de los Alimentos y Tecnología Química, Facultad de Ciencias Químicas y Farmacéuticas, Universidad de Chile, Dr. Carlos Lorca Tobar 964, Independencia, Santiago, Chile.  
*marcos.flores@utalca.cl*

Los aceites vegetales comestibles no refinados, ricos en compuestos bioactivos, son susceptibles a la oxidación térmica. Esta oxidación genera compuestos polares y productos tóxicos, deteriorando su calidad. Frente a las limitaciones de los antioxidantes sintéticos, se propone el uso de extractos vegetales ricos en compuestos fenólicos como aditivos naturales.

El objetivo de esta investigación fue evaluar el efecto de un extracto de pomasa de maqui sobre la estabilidad térmica de aceites vegetales no refinados.

El material vegetal para la extracción (etanol 96%) de componentes antioxidantes fue pomasa de maqui deshidratada (2h a 50°C). Los aceites fortificados fueron comerciales de oliva y pepa de zapallo, puros y con adición de extracto a una concentración de 1000 ppm. Las muestras se sometieron a termooxidación a 80 °C constante en estufa sin circulación de aire durante 28 días y se midieron parámetros fisicoquímicos cada 7 días y cromatográficos iniciales y finales de ambos aceites. Se aplicó la prueba t de student para el análisis estadístico.

Los resultados mostraron que el extracto de maqui mostró una alta capacidad antioxidante ( $17.088 \pm 182 \mu\text{mol Trolox}/100\text{g}$ ) y alto contenido fenólico ( $1950 \pm 16,7 \text{ mg Ac. Gálico}/100 \text{ g muestra}$ ). Los aceites sometidos a tratamiento térmico redujeron significativamente la formación de compuestos polares y el aumento del índice de acidez en etapas finales. Además, el extracto mostró un efecto protector sobre el índice de refracción (las primeras 2 semanas), los coeficientes de absorción  $k_{232}$  y  $k_{270}$ , el contenido de clorofilas (en aceite de oliva). El perfil de ácidos grasos metilados iniciales mostró una gran proporción de ácido oleico ( $>74\% \pm 0,04$ ) para aceite de oliva y una gran proporción de ácidos grasos poliinsaturados como el linoleico y linolénico ( $>53\%$ ) para el aceite de pepa de zapallo.

El extracto etanólico de pomasa de maqui mejora la estabilidad térmica de aceites no refinados de zapallo y oliva significativamente ( $p < 0,05$ ), reduciendo por ejemplo los compuestos polares en un 0,6% al día 7 de calentamiento para aceite de oliva, además de una reducción de 3,7% de compuestos polares para el aceite de zapallo en el día 28 del calentamiento continuo. Su uso como aditivo natural es prometedor, pero requiere estrategias complementarias para mantener su eficacia antioxidante a lo largo del proceso térmico.



## Optimización del proceso de extracción de Kefirano a partir de granos de Kéfir

J. González<sup>1</sup>, M. Mamani<sup>1</sup>, V. Martínez<sup>1</sup>, F. Arto, C<sup>1</sup>. Valdés<sup>1,2</sup>, S. Moris<sup>2</sup>

<sup>1</sup>Laboratorio de Bioprocesos, Universidad Católica del Maule, Chile

<sup>2</sup>Centro de Investigación de Estudios Avanzados del Maule, Universidad Católica del Maule, Chile

[jorge.gonzalez.01@alumnos.ucm.cl](mailto:jorge.gonzalez.01@alumnos.ucm.cl)

El Kéfir es un producto fermentado compuesto por una comunidad simbiótica de bacterias lácticas, acéticas y algunas levaduras. Este conjunto se aglomera en una estructura en forma de matriz denominada granos los cuales son ricos en un exopolisacárido (EPS) llamado kefirano, el cual ha generado gran interés por su potencial aplicación en la biotecnología y farmacología debido a sus propiedades anticancerígenas, antimicrobianas y antioxidantes. Para producir el kefirano a grandes escalas es necesario estudiar su extracción, ya que la cantidad y pureza dependerá de las condiciones aplicadas. Este trabajo evaluó el efecto de distintas condiciones de extracción como el centrifugado, tiempo y temperatura para poder optimizar la obtención del kefirano.

En este estudio se utilizaron gránulos de Kéfir en triplicado cultivados a temperatura ambiente y alimentados con leche semidescremada. Para cada muestra se realizaron tres ciclos sucesivos de calentamiento, centrifugación y precipitación (en proporciones 1:1, 2:1, 3:1 de etanol absoluto). En cada ciclo los granos fueron sometidos a calor bajo una condición específica, para posteriormente centrifugar y obtener un sobrenadante, el cual fue llevado a precipitación almacenándose a  $-20\text{ }^{\circ}\text{C}$  overnight. Posteriormente se centrifugó para recuperar los pellets de kefirano. Después de obtener esos pellets se les extrajo una fracción; una parte fue guardada para poder evaluar cada ciclo cumplido, mientras que la otra fracción se utilizó para seguir los ciclos posteriores. Finalmente, ya con todos los pellets obtenidos se llevaron a liofilizar para someter a cuantificación por métodos Antrona y Bradford. También se realizó un análisis de microscopía electrónica de barrido (SEM) para observar la morfología de las muestras obtenidas, análisis de difracción de rayos X y espectroscopia infrarroja (FTIR) para evaluar pureza. Se emplearon cuatro condiciones de calentamiento:  $90\text{ }^{\circ}\text{C}$  por 60 min, a  $90\text{ }^{\circ}\text{C}$  por 90 min, a  $70\text{ }^{\circ}\text{C}$  por 60 min y  $70\text{ }^{\circ}\text{C}$  por 90 min.

Los resultados indicaron que el mayor rendimiento según el método de Antrona fue a  $90\text{ }^{\circ}\text{C}$  por 90 min, alcanzando una concentración de kefirano de  $400\text{ mg/L}$ , comparado con el peor rendimiento a  $70\text{ }^{\circ}\text{C}$  por 60 min, que alcanzó una concentración de  $91\text{ mg/L}$ . Respecto a la detección de proteínas mediante Bradford no hubo señal detectable, indicando la ausencia de proteínas en niveles cuantificables. En el análisis de FTIR se observan bandas características del kefirano como en el número de onda  $\sim 2917\text{ cm}^{-1}$  que corresponde al estiramiento C–H en grupos metilo y metileno, o también en  $\sim 1044\text{ cm}^{-1}$  el cual indica la forma piranosa del azúcar, así confirmando su presencia. Respecto a las imágenes obtenidas por SEM y DRX, se da cuenta de la obtención de kefirano y a la vez el efecto de las condiciones de la extracción empleadas en donde también, la mejor condición fue el tratamiento a  $90\text{ }^{\circ}\text{C}$  durante 90 min.

Estos hallazgos evidencian que las condiciones de temperatura y de precipitación utilizadas influyeron positivamente en el rendimiento y pureza del kefirano, sin embargo, aún es necesario realizar otros tipos de análisis para complementar esta investigación, además de seguir trabajando en el protocolo de extracción para que sea eficiente y sostenible. Asimismo, se proyecta la utilización de fuentes de carbono sustentables como los subproductos y desechos de la industria agroalimentaria con el fin de reducir costos y promover la economía circular.



## Producción de Poli- $\beta$ -Hidroxibutirato (PHB) por *Ralstonia eutropha* en una columna de burbujeo

Violeta E. Gómez-Borraz<sup>a,\*</sup>, Javier Saleh<sup>a</sup>, Felipe Scott<sup>a</sup>, Alberto Vergara-Fernández<sup>a</sup>

<sup>a</sup> Green Technology Research Group, Facultad de Ingeniería y Ciencias Aplicadas, Universidad de los Andes

\*vegomez1@miuandes.cl

Ante el impacto ambiental asociado a la producción de plásticos convencionales derivados del petróleo, resulta indispensable el desarrollo e implementación de tecnologías alternativas sostenibles. Una de ellas es la producción de polihidroxibutirato (PHB), un biopolímero con características similares al polietileno. El PHB es acumulado intracelularmente como reserva de energía y carbono bajo condiciones de limitación de nutrientes (usualmente nitrógeno o fósforo) y exceso de carbono. *Ralstonia eutropha*, una bacteria aerobia obligada gramnegativa, es uno de los microorganismos modelo más utilizados por su alta capacidad de acumulación de PHB a partir de fuentes de carbono simples. En este estudio se evaluó el crecimiento y acumulación de este biopolímero por *R. eutropha* en un reactor tipo columna de burbujeo bajo condiciones de limitación de nitrógeno. El cultivo se inoculó con 50 mL de preinóculo, a una densidad óptica inicial de 1.1 (equivalente a 0.54 g L<sup>-1</sup> de biomasa). El reactor se operó en modo lote con un volumen de operación de 1.05 L, utilizando fructosa como fuente de carbono y un flujo de aire constante de 0.30 L min<sup>-1</sup>. La temperatura fue controlada mediante un serpentín de enfriamiento, manteniéndose en promedio a 31 °C. Se realizaron análisis de peso seco para cuantificar la biomasa de cada muestra del reactor y cromatografía líquida de alta resolución (HPLC) para determinar la concentración de fructosa residual y de PHB acumulado. Los resultados indicaron una velocidad específica de crecimiento de 0.12 h<sup>-1</sup> con un tiempo de duplicación de 5.68 horas. Durante el cultivo se observó una disminución del pH de 7.22 a 6.32, atribuida a la asimilación del ion amonio, proveniente de la fuente de nitrógeno (cloruro de amonio). No obstante, este descenso no afectó el crecimiento celular, ya que se encuentra dentro del rango tolerado por esta cepa. Asimismo, la concentración de oxígeno disuelto se mantuvo dentro del rango óptimo para este organismo (60-95% de saturación). La biomasa libre de PHB alcanzó una concentración máxima de 1.26 g L<sup>-1</sup> a las 18.7 horas durante la fase exponencial. Al final del lote, la concentración de biomasa total fue de 5.46 g L<sup>-1</sup>, con un contenido de PHB correspondiente al 80% del peso celular seco (4.37 g L<sup>-1</sup>), superando el 74% reportado para sistemas airlift. Además, el consumo total de fructosa con respecto a los 17.30 g L<sup>-1</sup> iniciales fue de 12 g L<sup>-1</sup>. Finalmente, se detectó concentración de PHB intracelular desde el inicio de lote, posiblemente debido a la acumulación previa en fases de inóculo (matraz). El rendimiento observado de biomasa respecto a la fructosa fue de 0.35 g g<sup>-1</sup> y el de PHB fue de 0.52 g g<sup>-1</sup>, superando valores reportados en estudios previos. Estos resultados confirman la viabilidad del uso de columnas de burbujeo como alternativa eficiente para la producción de PHB a escala laboratorio.

Agradecimientos:

A los proyectos Anillo ATE 220045, FONDECYT N° 1251864 y FONDECYT N° 1240411 por el financiamiento recibido.

## **“Análisis de la degradación del poli(*cis*-1,4-isopreno) mediante la enzima Latex clearing protein proveniente de *Streptomyces* sp. cepa K30 (Lcp<sub>K30</sub>) bajo diferentes condiciones de operación”.**

B. Orellana Araya<sup>1</sup>, R. Andler<sup>1</sup>.

<sup>1</sup>Escuela de Ingeniería en Biotecnología, Laboratorio de Bioprocesos, Centro de Biotecnología de los Recursos Naturales (CENBio), Universidad Católica del Maule, Talca, Chile  
email: belen.orellana@alumnos.ucm.cl

El caucho natural (NR), es un elastómero con propiedades físicas y químicas únicas, compuesto de poli(*cis*-1,4-isopreno) a partir del látex extraído del árbol *Hevea brasiliensis*, el cual pasa por un proceso de vulcanización y adición de múltiples componentes para su uso industrial (REF). Principalmente lo encontramos en neumáticos, los cuales luego de su vida útil son desechados de manera irresponsable. Dentro de las estrategias de reciclaje o tratamiento de neumáticos fuera de uso (NFU), encontramos técnicas químicas y físicas, sin embargo, muchas de estas técnicas demandan grandes cantidades de energía y requieren de solventes altamente nocivos. Es por ello que los tratamientos biotecnológicos se posicionan como alternativas de gran interés para explorar. En particular, se ha reportado la existencia de enzimas con capacidad de degradar el caucho, dentro de ellas encontramos a la dioxigenasa Latex clearing protein, proveniente de *Streptomyces* sp. cepa K30 (Lcp<sub>K30</sub>), a través de una reacción de oxidación a lo largo de la cadena del poliisopreno, obteniendo productos de degradación denominados oligoisoprenoides (REF). La actividad enzimática de Lcp<sub>K30</sub> puede verse afectada por parámetros operacionales, tales como la temperatura y velocidad de agitación. Esto ya que afectan la capacidad de transferencia de masa dentro del sistema, en particular la disponibilidad del oxígeno disuelto, por lo que estos parámetros deben seleccionarse adecuadamente para evitar limitaciones en procesos de escalamiento y garantizar una dispersión, renovación y redistribución correcta del fluido. Debido a esto, el objetivo de esta investigación es analizar la actividad enzimática de Latex clearing protein (Lcp<sub>K30</sub>) sobre el poli(*cis*-1,4-isopreno) a diferentes temperaturas y velocidades de agitación. Para esto se llevó a cabo un análisis multivariado de la actividad enzimática, bajo las temperaturas de 20, 30, 40 y 50°C y las velocidades de agitación de 150, 300, 450 y 600 rpm utilizando un biorreactor multicanal (RTS-8 Plus, Biosan) con tubos de 50 mL y 10 mL de volumen de reacción. Posteriormente, se analizó los productos de degradación mediante HPLC. Se calculó y comparó la actividad enzimática de Lcp<sub>K30</sub> sobre el látex mediante un análisis de la tasa de consumo de oxígeno para cada una de las condiciones evaluadas. Los resultados obtenidos demuestran que a mayores velocidades de agitación hay una mayor tasa de consumo de oxígeno en menor tiempo, lo cual otorga una mayor actividad enzimática, pero no un mayor consumo total de oxígeno. De igual forma, las temperaturas de 30 y 40°C demuestran una tendencia a consumir oxígeno con mayor velocidad en comparación a las temperaturas de 20 y 50°C, lo cual se ve reflejado en la cuantificación relativa de los productos de degradación u oligoisoprenoides.

El presente estudio entrega un avance en torno al conocimiento actual sobre los factores que afectan la cinética enzimática de Lcp<sub>K30</sub> y su capacidad sobre la degradación del poli(*cis*-1,4-isopreno), buscando en este caso mejorar el rendimiento de la biodegradación de caucho.

## Tratamiento de Aguas Residuales con Microalga-Bacteria: Integración de Membranas Dinámicas Autoformantes

Evelyn. Gómez<sup>1</sup>, Raúl. Muñoz<sup>2</sup>, David. Jeison<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Pontificia Universidad Católica de Valparaíso, <sup>2</sup>Universidad de Valladolid

[evelyn.gomez.b@mail.pucv.cl](mailto:evelyn.gomez.b@mail.pucv.cl)

En la búsqueda de soluciones sostenibles y económicas para el tratamiento de aguas residuales, los sistemas con consorcios microalga-bacteria en reactores de membrana han demostrado gran potencial debido a su capacidad para remover contaminantes, eliminar la necesidad de aireación mecánica, retener biomasa y clarificar eficientemente el efluente. Sin embargo, el alto costo, la susceptibilidad al ensuciamiento y el mantenimiento intensivo de las membranas convencionales limitan su implementación a gran escala. Como alternativa, las membranas dinámicas autoformantes (SFDM) ofrecen una solución de menor costo y operación más sencilla.

Este trabajo evalúa su aplicación, analizando la dinámica de formación de la membrana con el objetivo de validar el concepto y establecer condiciones operativas adecuadas para su consolidación y funcionamiento estable. La biomasa microalga-bacteria fue generada en un biorreactor tipo raceway de 50 litros. Posteriormente, se realizaron ensayos de filtración en sistemas batch, utilizando un soporte de tela de polipropileno (20–100  $\mu\text{m}$ ) y evaluando diferentes combinaciones de flujo (hasta 100  $\text{L}\cdot\text{m}^{-2}\cdot\text{h}^{-1}$ ) y niveles de turbulencia, con el fin de favorecer la formación de la membrana y mantener los sólidos en suspensión.

Los resultados indican que, en menos de 5 horas, se consolida una SFDM capaz de retener más del 98 % de la biomasa, alcanzando turbiedades del permeado inferiores a 5 NTU. La operación estable se mantuvo con flujos de hasta 30  $\text{L}\cdot\text{m}^{-2}\cdot\text{h}^{-1}$ , dentro del rango habitual en procesos de membrana. Además, la membrana formada resultó firme y lo suficientemente estable para filtrar otras suspensiones a través de ella, logrando la retención de partículas de aproximadamente 5  $\mu\text{m}$ .

Estos hallazgos confirman la posibilidad de aplicar la tecnología de membranas dinámicas autoformantes en sistemas que involucran microalgas. Se ha validado el concepto, abriendo paso a tecnologías de tratamiento más simples, robustas, sostenibles y accesibles para contextos con recursos limitados.

## Producción de biodiesel a partir de MXenes Ti<sub>2</sub>CTx sintetizados mediante grabado parcial

Y. Benítez<sup>1</sup>, C. Lara<sup>2</sup>, G. Neves<sup>3</sup>, D. Salinas<sup>2</sup>, C. Salvo<sup>3</sup>,

<sup>1</sup>*Departamento de Ingeniería de Procesos y Bioproductos, Facultad de Ingeniería, Universidad del Bío-Bío, Concepción, Chile*

<sup>2</sup>*Departamento de Química, Facultad de Ciencias, Universidad del Bío-Bío, Concepción, Chile*

<sup>3</sup>*Departamento de Ingeniería Mecánica, Facultad de Ingeniería, Universidad del Bío-Bío, Concepción, Chile*

yony.benitez2401@alumnos.ubiobio.cl

Los MXenes se han posicionado como materiales altamente prometedores en catálisis heterogénea para la producción de biodiesel, debido a su estructura en capas, área superficial apropiada y alto grado de funcionalización. Estas propiedades favorecen la adsorción de reactivos y accesibilidad de sitios activos, lo que ha llevado a obtener conversiones de biodiesel superiores al 90%. No obstante, las rutas de síntesis comúnmente reportadas requieren eliminar completamente la capa "A" desde la fase MAX precursora, y la separación completa de láminas, lo cual implica tiempos prolongados de grabado, intercalación y delaminación, limitando su escalabilidad y viabilidad práctica.

En este trabajo se sintetizó MXene Ti<sub>2</sub>CTx a partir de una fase MAX comercial Ti<sub>2</sub>AlC (Nanografi, pureza > 99%), utilizando HF (Winkler, concentrado al 48%) a temperatura ambiente durante 3 y 5 horas, permitiendo la eliminación parcial de las capas de Al (correspondiente a la capa A de la fase MAX). Posteriormente, la estructura se delaminó por sonicación en baño ultrasónico utilizando agua grado HPLC (Sigma Aldrich) durante 1 h, evitando el uso de intercalantes adicionales. Los catalizadores fueron caracterizados mediante difracción de rayos x (DRX), microscopía electrónica de barrido acoplada a un sistema de espectroscopía de rayos x por dispersión de energía (SEM- EDS), área superficial (BET) y espectroscopía de fotoemisión de rayos x (XPS) para estudiar la morfología, distribución elemental, área superficial y grado de funcionalización de los MXenes obtenidos. Luego fueron evaluados en la transesterificación de aceite de canola con metanol, empleando una relación molar aceite:metanol de 1:36, a 65°C durante 5 horas. La cantidad de catalizador utilizada correspondió al 5% en masa respecto al aceite. El biodiesel obtenido fue analizado por cromatografía de gases-masas (CG-MS) para determinar la conversión de ésteres metílicos de ácidos grasos (biodiesel).

Los análisis estructurales confirmaron que los tratamientos de grabado de 3 y 5 horas permiten eliminar gran parte del Al presente en la estructura de la fase MAX inicial. La delaminación asistida con agua HPLC condujo a la formación de estructuras tipo acordeón, propias de una separación parcial de las capas, lo que se tradujo en un aumento significativo del área superficial expuesta. Las conversiones de biodiesel alcanzadas fueron superiores al 90% para las muestras grabadas durante 3 y 5 horas. Estos valores son comparables con los reportados en estudios previos que emplean síntesis de MXenes, considerablemente más extensas.

Este trabajo permite proponer que eliminar parcialmente la capa A, en conjunto con una delaminación incompleta, permite obtener MXenes con alta eficiencia catalítica en biodiesel. La delaminación parcial, genera estructuras tipo acordeón con capas parcialmente expuestas, suficiente para lograr una alta conversión a biodiesel. Esto evidencia que la funcionalización del material y área superficial juegan un rol más importante que la eliminación total del Al y la separación completa de las capas. De esta manera, se abre una vía simple, rápida y sostenible para hacer de MXenes un material eficiente como catalizador en aplicaciones de conversión energética.

## Desarrollo e implementación de una planta de producción de vacunas en Chile según las buenas prácticas de manufactura.

P. Letelier<sup>1</sup>, J. Del Río<sup>1, 2</sup>, T. Troncoso<sup>1</sup>, G. Ayala<sup>1</sup>, C. Moreno<sup>1</sup>, E. González<sup>1</sup>,  
H. Peñaloza<sup>1</sup>, S. Bueno<sup>1</sup>, A. Kalergis<sup>1, 3</sup>, P. González<sup>1</sup>

<sup>1</sup>*Instituto Milenio en Inmunología e Inmunoterapia, Facultad de Ciencias Biológicas, Pontificia Universidad Católica de Chile.*

<sup>2</sup>*Departamento de Ingeniería Química y Bioprocesos, Escuela de Ingeniería, Pontificia Universidad Católica de Chile.*

<sup>3</sup>*Departamento de Endocrinología, Facultad de Medicina, Pontificia Universidad Católica de Chile.*

[pedro.letelier@uc.cl](mailto:pedro.letelier@uc.cl)

### 1. Introducción y problema

En Latinoamérica, solo Brasil, Argentina, Cuba y México cuentan con plantas de producción de vacunas certificadas bajo Buenas Prácticas de Manufactura (BPM), debido a la alta complejidad técnica, regulatoria, política y financiera que implica su implementación. Actualmente, Chile no dispone de ninguna planta con esta certificación para vacunas humanas. La pandemia por SARS-CoV-2 evidenció la dependencia del país respecto a insumos y vacunas importadas, revelando la necesidad crítica de contar con capacidades propias de producción biofarmacéutica.

### 2. Solución propuesta

En respuesta, durante los últimos cuatro años el Instituto Milenio de Inmunología e Inmunoterapia y la Pontificia Universidad Católica de Chile han liderado el desarrollo de la primera planta piloto de vacunas humanas del país bajo normativa BPM. Esta infraestructura establece una base sólida para una producción nacional con proyección de escalamiento biomédico. Inicialmente estará enfocada en la producción de la vacuna rBCG-N-RSV, desarrollada mediante ingeniería genética para combatir el Virus Respiratorio Sincicial, pero con capacidad de adaptarse a otros bioproductos. El laboratorio se organiza en dos áreas funcionales: Control de Calidad (CC), encargada de asegurar la calidad mediante análisis microbiológicos, ambientales y fisicoquímicos bajo sistemas validados; y Producción Biofarmacéutica (PB), que albergará la manufactura de vacunas recombinantes en condiciones asépticas, con un biorreactor automatizado, sistemas de limpieza en sitio y un ambiente ISO 5 (grado A).

### 3. Resultados y avances

Actualmente, el proyecto se encuentra en una fase avanzada de validación de instalaciones y sistemas críticos, con calificaciones de diseño, instalación, operación y desempeño en curso para áreas limpias, el sistema de calefacción, ventilación y aire acondicionado (HVAC, por sus siglas en inglés), y los equipos de producción. La calificación de los equipos del área de CC ya está finalizada, mientras que en PB solo resta completar la plataforma del biorreactor. Entre los principales avances destacan la marcha blanca exitosa de CC, la instalación de equipamiento crítico en ambas zonas, la implementación de sistemas de monitoreo ambiental (remoto y no remoto), y la instalación del sistema de control HVAC. Un desafío central ha sido la implementación de normativas internacionales en un entorno con experiencia por adquirir en producción BPM, lo cual se ha abordado satisfactoriamente mediante una respuesta técnica robusta a las observaciones del Instituto de Salud Pública y una correcta adecuación de espacios y equipamiento.

### 4. Conclusiones

Este proyecto representa una infraestructura habilitante inédita en Chile para el desarrollo y producción de biofármacos bajo estándares internacionales. Su consolidación impulsa la autonomía sanitaria, promueve la innovación en biotecnología y establece una base robusta para avanzar hacia una producción sustentable de bioactivos. Además, habilita la formación de personal técnico y científico altamente calificado en normativas BPM para vacunas humanas, una capacidad inexistente hasta ahora en el país. Esto no solo fortalece las capacidades regulatorias e industriales locales, sino que también abre camino a una nueva industria nacional biofarmacéutica, con potencial de escalar innovaciones chilenas desde el laboratorio hasta la producción en condiciones de calidad internacional.



## Optimización de la producción y evaluación de la actividad de la enzima Lcp<sub>K30</sub> para la degradación enzimática del poli(*cis*-1,4- isopreno)

Camila Guajardo<sup>1,2</sup>, Rodrigo Andler<sup>2</sup>

<sup>1</sup> Facultad de Ciencias de la Ingeniería, Universidad Católica del Maule, Talca, Chile.

<sup>2</sup> Escuela de Ingeniería en Biotecnología, Centro de Biotecnología de los Recursos Naturales (CENBio), Universidad Católica del Maule, Talca, Chile.

*camila.guajardo@alu.ucm.cl*

El aumento sostenido de residuos de caucho, particularmente en forma de neumáticos fuera de uso (NFU), representa un desafío ambiental crítico debido a la resistencia del caucho vulcanizado a la degradación natural. Esta problemática se agrava por la generación de microplásticos y compuestos tóxicos, así como por la baja eficiencia y altos costos energéticos de los métodos físico-químicos de reciclaje, que además producen subproductos contaminantes. Frente a este escenario, la catálisis enzimática emerge como una alternativa sostenible para la gestión de estos residuos.

En este estudio se optimizó la producción de la enzima Latex clearing protein (Lcp<sub>K30</sub>), proveniente de *Streptomyces* sp. K30, la cual posee capacidad para escindir oxidativamente el poli(*cis*-1,4-isopreno), generando compuestos funcionales como aldehídos y cetonas. La enzima fue producida de forma recombinante en *Escherichia coli* BL21 (DE3), y su producción fue optimizada mediante un Diseño Compuesto Central (CCD), aplicado dentro de la Metodología de Superficie de Respuesta (RSM). Se evaluaron variables como tiempo de cultivo y agitación, identificando condiciones óptimas para maximizar la productividad enzimática específica.

Adicionalmente, se midió el coeficiente volumétrico de transferencia de oxígeno ( $k_La$ ) en matraces y en un sistema biorreactor, estableciendo que niveles intermedios de oxigenación podrían favorecer la producción de Lcp<sub>K30</sub>. La actividad catalítica de Lcp<sub>K30</sub> se evaluó en fase líquida usando poli(*cis*-1,4-isopreno) a 40 mg/mL en un biorreactor multicanal con monitoreo de oxígeno disuelto. Las reacciones, con volumen final de 10 mL y pH 7,2, contenían 200 µg/mL de enzima y se incubaron 1 hora a distintas temperaturas (20–50 °C) y velocidades de agitación (150–600 rpm). Finalmente, los productos de degradación fueron analizados por HPLC, confirmando la formación de oligoisoprenoides con longitudes de cadena entre C<sub>20</sub> y C<sub>65</sub>, conforme a lo reportado en la literature.

Estos resultados constituyen un avance relevante en el desarrollo de sistemas enzimáticos eficientes para la valorización biotecnológica de residuos de caucho, aportando conocimiento fundamental para futuras aplicaciones industriales.



## Comparación en la síntesis de poli-3-hidroxi-butirato (P3HB) en cultivos de *Bacillus cereus* y *Azotobacter vinelandii* OP: Efecto de la velocidad de agitación sobre la acumulación y propiedades del biopolímero

I. Morales<sup>1</sup>, E. Pérez<sup>1</sup>, M. Cancino<sup>1</sup>, R. Andler<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Escuela de Ingeniería en Biotecnología, Centro de Biotecnología de los Recursos Naturales (CENBio), Universidad Católica del Maule, Talca, Chile

[Isabo.morales@alu.ucm.cl](mailto:Isabo.morales@alu.ucm.cl)

El poli-3-hidroxi-butirato (P3HB) es un poliéster termoplástico biodegradable, cuyas propiedades mecánicas y térmicas se asemejan a las de los plásticos convencionales de origen petroquímico. Este polímero es sintetizado por diversas bacterias como producto del metabolismo secundario del microorganismo, usualmente bajo condiciones de limitación de nutrientes esenciales como nitrógeno, fósforo u oxígeno, entre otros, y un exceso de fuente de carbono, almacenándolo intracelularmente como fuente de energía<sup>1</sup>. El objetivo de este estudio fue evaluar la síntesis de P3HB en *Bacillus cereus* ATCC14579 y *Azotobacter vinelandii* OP ATCC 13705 en medios complejos bajo diferentes condiciones de agitación y tiempos de cultivo. A su vez, se buscó analizar el efecto de las condiciones de agitación sobre las propiedades del biopolímero para futuras aplicaciones.

Los resultados obtenidos muestran que en *B. cereus* se tiene una mayor concentración de biomasa a las 24 h de cultivo, alcanzando los 2,43 g/L a una velocidad de agitación de 200 rpm, condición a la cual también se logró la mayor concentración de P3HB, alcanzando los 0,37 g/L con un porcentaje de acumulación del 31,28% (p/p). En *A. vinelandii* OP se alcanzó una concentración de biomasa de 4,28 g/L a una velocidad de agitación de 150 rpm a las 48 h de cultivo, y una concentración de P3HB de 2,28 g/L con un porcentaje de acumulación de 55,83 % (p/p). Se caracterizó el biopolímero mediante ATR-FTIR, donde el espectro mostró bandas de absorción que coincidían estrechamente con las propiedades espectrales publicadas del P3HB puro<sup>2</sup>. La vibración de estiramiento más intensa es el grupo carbonilo (C=O), indicador de la estructura principal del poliéster, y se observa a una longitud de onda de 1724 cm<sup>-1</sup>. El análisis SEC-HPLC evaluó el peso molecular promedio (MMW) donde en *B. cereus* se evidenció entre 80.050 g/mol y 225.372 g/mol y en *A. vinelandii* OP de entre 75.805 g/mol y 111.000 g/mol con bajos índices de polidispersión. Se realizó un análisis TGA/DSC para evaluar la estabilidad térmica y propiedades de transición del biopolímero. Se logró evidenciar que el aumento de la agitación altera la alineación de la cadena polimérica, lo que reduce la cristalinidad y la estabilidad térmica. Se estimaron los coeficientes volumétricos de transferencia de oxígeno (k<sub>La</sub>) para correlacionar el efecto de la velocidad de agitación y la producción de P3HB. El valor de k<sub>La</sub> obtenido, confirmó su relación con la disponibilidad de oxígeno en el medio. Sin embargo, en las condiciones evaluadas en este estudio, *B. cereus* no mostró una variación significativa en su comportamiento, manteniendo una estabilidad en los rendimientos. Los resultados sugieren que la fuerza de cizallamiento asociada a mayores velocidades de agitación podría contribuir a las variaciones observadas en las propiedades del biopolímero, por lo que ambos factores parecen estar involucrados. Estos hallazgos permiten orientar estrategias de optimización de cultivos y de selección de cepas según la aplicación deseada.

## Efecto de las condiciones de cultivo sobre la producción de P3HB y su aplicación para la formulación de micropartículas como potenciales plataformas inmunoterapéuticas.

Marcela Cancino<sup>1</sup>, Rodrigo Andler<sup>1</sup>

<sup>1</sup>*Escuela de ingeniería en biotecnología, Laboratorio de Bioprocesos, Centro de Biotecnología de los Recursos Naturales (CENBio), Universidad Católica del Maule, Talca, Chile.*

*marcela.cancino@alu.ucm.cl*

Actualmente, los sistemas de liberación de fármacos presentan diferentes limitaciones, como la falta de selectividad, baja biodisponibilidad, toxicidad sistémica y, en consecuencia, efectos secundarios indeseados. Dichas limitaciones se hacen particularmente importantes en el tratamiento del cáncer, debido a la alta heterogeneidad tumoral, resistencia a terapias y evasión inmunológica, reduciendo significativamente la eficacia de los tratamientos convencionales. Ante esta problemática, la ciencia enfrenta el desafío de desarrollar sistemas de liberación de fármacos más eficientes, que integren la ingeniería de materiales avanzados con enfoques biotecnológicos y farmacológicos.

En este contexto surge la nanomedicina, disciplina orientada al estudio y diseño de estructuras capaces de actuar como sistemas de liberación nano o micrométricos. Dentro de estos sistemas, el poli-3-hidroxibutirato (P3HB), un biopolímero de origen bacteriano, ha sido ampliamente investigado para aplicaciones biomédicas debido a su biocompatibilidad, biodegradabilidad controlada, estabilidad coloidal y propiedades mecánicas ajustables, las cuales son determinantes para su desempeño en aplicaciones farmacológicas. Estas propiedades se ven fuertemente influenciadas por las condiciones de cultivo microbiano, que modulan el peso molecular, grado de cristalinidad, y composición química del polímero, afectando directamente su capacidad para formar micropartículas estables, su degradación y su interacción celular.

El presente estudio tuvo como objetivo analizar la influencia de distintos parámetros de cultivo sobre la cinética de crecimiento, producción y propiedades intrínsecas del P3HB, así como evaluar la relación entre el peso molecular y el comportamiento de las estructuras biopoliméricas frente a macrófagos derivados de la línea celular in vitro RAW 264.7. Para la obtención del polímero, se evaluaron diferentes condiciones de velocidad de agitación (100 y 250 rpm) y tiempos de incubación (48 y 72 h) en cultivos de *Azotobacter vinelandii* OP. Los cultivos desarrollados en matraces de agitación alcanzaron una concentración de biomasa de hasta 3,49 g/L y una acumulación intracelular de P3HB de hasta 57 % (p/p).

El polímero fue caracterizado mediante ATR-FTIR y SEC-HPLC, confirmándose la presencia del grupo funcional carbonilo (C=O) a  $1720\text{ cm}^{-1}$  y enlaces C–O a  $1280\text{ cm}^{-1}$ . El análisis de SEC-HPLC indicó pesos moleculares entre 828 y 241 780 g/mol, evidenciando una variación asociada a las condiciones de cultivo. La formación de micropartículas se realizó por el método de emulsión simple (w/o) mediante evaporación del solvente, obteniéndose partículas con un tamaño promedio de  $1467 \pm 60\text{ nm}$  y un potencial zeta entre  $-17,4$  y  $-28,2\text{ mV}$ , indicando una estabilidad coloidal moderada.

La internalización de las micropartículas fue evaluada mediante inmunofluorescencia indirecta, observándose una captación eficiente por parte de los macrófagos RAW 264.7, lo que confirma su potencial aplicación en estrategias de administración dirigida e inmunomodulación. En conjunto, estos resultados aportan información clave sobre la influencia de las condiciones de cultivo en las propiedades fisicoquímicas del P3HB, proponiéndose como una estrategia para ajustar las características del biopolímero según los requerimientos específicos de su aplicación farmacológica final.

## Efecto de la agitación sobre la producción y peso molecular del copolímero poli(3-hidroxibutirato-co-3-hidroxivalerato) sintetizado por *Azotobacter vinelandii* OP.

V. Urtuvia<sup>1</sup>, A. Díaz-Barrera<sup>1</sup>.

<sup>1</sup>Escuela de Ingeniería Bioquímica, Pontificia Universidad Católica de Valparaíso. Avenida Brasil 2085, Valparaíso, Chile.

*viviana.urtuvia@pucv.cl*

*Azotobacter vinelandii* OP tiene la capacidad de producir poli(3-hidroxibutirato-co-3-hidroxivalerato) (P3HBV) un biopolímero de origen biológico perteneciente a la familia de los polihidroxialcanoatos. Este poliéster se produce mediante la adición de valerato durante el crecimiento celular y se acumula en forma de gránulos intracelulares. Desde un punto de vista biotecnológico, el P3HBV es interesante, porque sus propiedades termoplásticas se han utilizado para fabricar plásticos biodegradables; además, son materiales biocompatibles. Sus distintas composiciones monomérica, permiten su uso como biopolímeros a medida para diferentes aplicaciones específicas de valor añadido. En cultivos en biorreactor, la composición molar del P3HBV y su peso molecular ( $M_w$ ) se ven afectados por la velocidad de agitación y la modalidad de cultivo. Además, la velocidad de agitación tiene diferentes efectos sobre la velocidad de transferencia de oxígeno, afectando su producción, así como el  $M_w$ , estos parámetros alcanzan sus mayores valores a medida que aumenta la velocidad de agitación. En el presente trabajo, se evaluó la producción de P3HBV sintetizado por *A. vinelandii* OP en cultivos por lote extendido a velocidades de agitación de 300 y 600 rpm. La cepa OP se creció en un fermentador Applikon (3 L) con un volumen de trabajo de 1.5 L de medio de cultivo a 1vvm y 30°C. Se midió la fracción de 3-hidroxivalerato (3HV) en el P3HBV mediante GC-MS y el  $M_w$  se determinó por cromatografía de permeación en gel acoplado a HPLC. Se determinó el rendimiento de P3HBV a partir de sacarosa ( $Y_{P3HBV/S}$ ). Los resultados indican que, en las condiciones evaluadas, se obtuvo un similar contenido de P3HBV (hasta 60% p/p) pero con diferentes fracciones 3HV en el copolímero. Utilizando una velocidad de agitación de 300 rpm, se alcanzó un  $Y_{P3HBV/S}$  de 0,16 g/g y un P3HBV con  $11,5 \pm 1,4$  mol% de 3HV (a las 96 h), mientras que a 600 rpm se alcanzó un  $Y_{P3HBV/S}$  más alto (0,23 g/g) y un P3HBV con una fracción molar de  $7,6 \pm 1,7$  mol% de 3HV (a las 48 h). El  $M_w$  del P3HBV en cultivos a 300 rpm permaneció constante durante el tiempo del cultivo, alcanzando  $708 \pm 38$  kDa. En los cultivos realizados a una mayor velocidad de agitación (a 600 rpm) el  $M_w$  alcanzó valores de  $833 \pm 31$  kDa a las 48 h, el cual disminuyó durante el tiempo de cultivo. Los resultados demuestran que la producción de P3HBV y la fracción de 3HV en el copolímero se afectan por la velocidad de agitación en cultivos por lote extendido. Así, las condiciones de fermentación determinan en buena medida las características del copolímero de P3HBV, donde la fracción de 3HV y el peso molecular pueden ser controlados ajustando las condiciones operacionales en el biorreactor. Lo que abre posibilidades para diseñar procesos de producción de PHBV hechos a medida. Esta investigación fue apoyada y financiada por la Agencia Nacional de Investigación y Desarrollo, Chile (ANID) a través de FONDECYT Iniciación 11230164 (VU) y FONDECYT Regular 1231075 (AD). Los autores agradecen al HUB Ambiental UPLA por proporcionar el equipo GC-MS.

## Coinmovilización de Galactosa Oxidasa, Peroxidasa, y Hemoglobina en forma de Nanoflores Híbridas Orgánico-Inorgánicas para la oxidación de Alcoholes Primarios

Luigi Tavernini<sup>1</sup>, Lorena Wilson<sup>1</sup>, Óscar Romero<sup>2</sup>

<sup>1</sup> Escuela de Ingeniería Bioquímica, Pontificia Universidad Católica de Valparaíso, Valparaíso, Chile.

<sup>2</sup> Ingeniería de Bioprocesos y Biotecnología Aplicada, Departamento de Ingeniería Química, Biológica y Ambiental, Universitat Autònoma de Barcelona, Barcelona, España.

luigi.tavernini@pucv.cl

La enzima galactosa oxidasa (GalOx) es clave en la síntesis de fármacos como Islatravir, utilizado para el tratamiento del SIDA, y en la producción de biopolímeros sostenibles. La GalOx se usa asociada a activadores como la enzima peroxidasa (HRP) o la hemoglobina (HB), los que tienen la función de restaurar su estado oxidado original. Recientemente, nuevas estrategias de inmovilización, como las nanoflores híbridas orgánico-inorgánicas, ofrecen ventajas como bajo costo, simplicidad de preparación, y elevada razón superficie/volumen que permite inmovilizar una alta carga enzimática debido a la ausencia de un soporte preexistente, como ha sido ampliamente reportado. En este estudio se coinmovilizó GalOx con cada activador por separado (HRP y HB), mediante la estrategia de nanoflores, con el fin de seleccionar el biocatalizador que exprese la mayor actividad específica, medida como  $\mu\text{mol}$  de oxígeno liberado por  $\text{min}$  por unidad de masa de biocatalizador, a partir de la oxidación de galactosa 250 mM en tampón fosfato 100 mM pH 7.0 y 30 °C. En una primera etapa, se evaluaron factores como razón metal/proteína, pH, y temperatura sobre la formación de nanoflores de GalOx usando los iones,  $\text{Mn}^{2+}$  y  $\text{Cu}^{2+}$  ( $\text{MnCl}_2 \cdot 4\text{H}_2\text{O}$  y  $\text{CuSO}_4 \cdot 5\text{H}_2\text{O}$ ) para determinar las condiciones de compromiso de coinmovilización, las que resultaron ser 300 mmol/g<sub>ptna</sub> con  $\text{Mn}^{2+}$  y 500 mmol/g<sub>ptna</sub> con  $\text{Cu}^{2+}$  a pH 7.4 y 25 °C para ambos casos. En la segunda etapa se estudió la coinmovilización *in situ* de GalOx-HRP y GalOx-HB, dando por resultado los biocatalizadores GalOx-HRP@Mn, GalOx-HB@Mn, GalOx-HRP@Cu y GalOx-HB@Cu. Se pudo evidenciar una actividad mayor en las nanoflores GalOx-HRP@Mn y GalOx-HB@Cu. Los resultados obtenidos para cada biocatalizador se resumen en la Tabla 1.

**Tabla 1.** Actividad específica de Biocatalizadores desarrollados mediante biomineralización

	$a_s$ [UI/g <sub>biocat</sub> ]	$\pm$
GalOx (soluble)	3983.9*	145.9
GalOx-HRP@Mn	76.8	4.0
GalOx-HB@Mn	37.6	1.6
GalOx-HRP@Cu	5.4	0.3
GalOx-HB@Cu	74.9	1.1

\*Las unidades de la actividad específica de la enzima soluble son UI/g<sub>proteína</sub>

Estos resultados se comparan favorablemente con catalizadores de GalOx desarrollados mediante inmovilización en soportes preexistentes como agarosa y purolita. Los resultados demuestran que la preparación de un catalizador de nanoflores de GalOx con HRP y HB es viable, proporcionando una alternativa sencilla y económica para estabilizar esta enzima y potenciar su aplicación en reacciones en cascada orientadas a la síntesis de compuestos industriales de alto valor.

## USO DE BACTERIOFAGOS EN PLANTAS DE TRATAMIENTO DE AGUAS SERVIDAS: DESARROLLO DE OBSERVADOR FILTRO DE KALMAN EXTENDIDO Y CONTROL ÓPTIMO MEDIANTE MODELOS MATEMÁTICOS.

M. Vesga<sup>1,2</sup>, D. Jeison<sup>1</sup>, R. Chamy<sup>1</sup>, A. Vande Wouver<sup>2</sup>

<sup>1</sup> Escuela de Ingeniería Bioquímica, Facultad de Ingeniería, Pontificia Universidad Católica de Valparaíso, Av Brasil # 2085, Valparaíso, Chile. Phone. +56 967668611

<sup>2</sup> Automatic Control Laboratory, University of Mons 31 Boulevard Dolez, B-7000 Mons, Belgium  
[maria.vesga.b@mail.pucv.cl](mailto:maria.vesga.b@mail.pucv.cl)

El proceso de lodos activados (LA) ha sido ampliamente utilizado durante casi un siglo para el tratamiento de aguas residuales industriales y municipales, y en la actualidad es la tecnología más empleada a nivel mundial. A pesar de su alta eficiencia presenta limitaciones, algunas derivadas del crecimiento excesivo de bacterias filamentosas, generando fenómenos como *bulking* y *foaming* que afectan la operación del sistema. Aunque existen diversas estrategias para controlar estos problemas, su eficacia no es consistente en todos los casos, sus costos son elevados y, en ocasiones deterioran la calidad del efluente tratado. En este contexto, se propone el uso de bacteriófagos como una estrategia biológica alternativa, gracias a su capacidad de atacar selectivamente bacterias filamentosas. Los fagos permiten abordar la raíz del problema sin comprometer la calidad del efluente. Esta propuesta se fundamenta en un modelo matemático desarrollado previamente, que describe la dinámica entre bacterias y fagos en sistemas de tratamiento de aguas residuales (Vesga-Barón et al., 2022). Este modelo fue analizado en sus propiedades, destacando que es observable en todos los escenarios estudiados, demostrando que puede utilizarse con fines de control.

El presente trabajo tiene como objetivo la reconstrucción de variables no medidas para el desarrollo de estrategias de control óptimo en el tratamiento con bacteriófagos. El observador de estado clásico Filtro de Kalman Extendido (EFK) fue utilizado. Se evaluaron dos escenarios: con medición simultánea de sustrato y fagos, y con medición exclusiva de sustrato, siendo este último el de mayor complejidad operativa. En ambos casos, el EFK permitió recrear con éxito todas las variables de estado, evidenciando su capacidad de adaptación y confiabilidad basadas en distintos escenarios, lo que respalda su aplicación en condiciones reales de operación. A partir de la estimación completa del sistema con el EFK, se propusieron estrategias de control óptimo en lazo abierto para la dosificación de fagos. Se evaluaron esquemas con flujo constante, flujo variable y restricciones de flujo que no afecten la dilución del sistema. Los resultados muestran que, si bien un flujo elevado de fagos permite eliminar en un 99% las bacterias, estrategias con limitaciones operativas realistas logran disminuir un 70% su concentración a niveles que no comprometan el desempeño del proceso. En conclusión, el uso de bacteriófagos como tratamiento biológico podría representar una alternativa más eficiente, específica y sostenible que los métodos tradicionales. La integración de modelado matemático, estimación de estados y control óptimo sienta las bases para una solución innovadora y factible para la mitigación de *bulking* y *foaming* en plantas de tratamiento de aguas residuales.



## Precipitación microbiana de carbonatos como estrategia de pretratamiento para la extracción de litio desde salmueras naturales

M. Ayala-Clavería<sup>1</sup>, G. Olguín<sup>2</sup>, M. Rivas<sup>3</sup>, A. Torres-Aravena<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Escuela de Ingeniería Bioquímica, Facultad de Ingeniería, Pontificia Universidad Católica de Valparaíso, Valparaíso 2362803, Chile.

<sup>2</sup>Escuela de Ingeniería Química, Facultad de Ingeniería, Pontificia Universidad Católica de Valparaíso, Avenida Brasil 2162, postal code: 2362854, Valparaíso, Chile.

<sup>3</sup>Laboratorio de Biotecnología Ambiental Aplicada, Departamento de Biotecnología, Facultad de Ciencias del Mar y Recursos Biológicos, Universidad de Antofagasta, Av. Angamos 601, Antofagasta 1270300, Chile

*[martin.ayala@pucv.cl](mailto:martin.ayala@pucv.cl)*

La creciente demanda de litio como insumo estratégico para la industria de baterías ha intensificado la necesidad de optimizar sus procesos de extracción, especialmente desde salmueras naturales que representan cerca del 80% de las reservas mundiales. El esquema convencional de obtención de litio a partir de salmueras requiere prolongados tiempos de evaporación solar, entre 12 y 18 meses, para la remoción secuencial de cationes como  $\text{Ca}^{2+}$  y  $\text{Mg}^{2+}$ , los cuales interfieren en las etapas posteriores de concentración y purificación del litio. Este prolongado pretratamiento constituye una de las principales limitaciones del proceso convencional. En este contexto, la precipitación inducida por microorganismos (MICP, por sus siglas en inglés) surge como una alternativa biotecnológica de alto potencial para reducir los tiempos de pretratamiento y mejorar la eficiencia global del proceso. El MICP se basa en la formación de carbonatos de calcio y magnesio a través de la inducción biológica de un ambiente favorable para su precipitación química. La ruta ureolítica, la más estudiada para este proceso, implica la hidrólisis de urea por microorganismos capaces de generar carbonatos, aumentar el pH por liberación de  $\text{NH}_4^+$  y ofrecer sitios de nucleación en su pared celular, promoviendo así la cristalización de carbonatos. El objetivo de este trabajo fue evaluar, mediante simulación, el potencial de precipitación de  $\text{Ca}^{2+}$  y  $\text{Mg}^{2+}$  en las distintas piscinas de evaporación solar de un proceso clásico de obtención de litio desde salmueras naturales. La metodología comprendió: (1) la caracterización química de una salmuera representativa del Salar de Maricunga; (2) el modelamiento de la especiación iónica y del grado de saturación mineral mediante el software Visual MINTEQ; y (3) la simulación de las condiciones bioquímicas del proceso MICP mediante la incorporación de urea y sitios de nucleación inducidos biológicamente. Se consideraron distintos escenarios de tratamiento multietapa para evaluar la eficiencia de remoción de  $\text{Ca}^{2+}$ ,  $\text{Mg}^{2+}$  y carbonatos. Los resultados de simulación indican que el proceso MICP permitiría precipitar aproximadamente el 96% de los carbonatos, el 84% del calcio y el 75% del magnesio en una primera etapa, alcanzando hasta un 99% de remoción de  $\text{Ca}^{2+}$  y 75% de  $\text{Mg}^{2+}$  residual en una segunda etapa. Además, el litio permanecería completamente soluble, lo que demuestra la selectividad del proceso y su potencial como pretratamiento previo a la concentración y purificación del metal. Si bien los resultados son promisorios, se proyecta una validación experimental para evaluar la reproducibilidad en condiciones reales y cuantificar la reducción de tiempos y costos frente a métodos químicos convencionales. La selección microbiana se enfocará en cepas halotolerantes ureolíticas que aseguren la escalabilidad del proceso. En conjunto, los resultados respaldan el potencial del MICP como una estrategia biotecnológica sustentable y selectiva para la eliminación de  $\text{Ca}^{2+}$  y  $\text{Mg}^{2+}$  en salmueras naturales, contribuyendo al desarrollo de procesos más eficientes y ambientalmente responsables en la producción de litio.



## Concentración de extracto enzimático y transferencia de $Mn^{2+}$ en cultivo de *Anthracophyllum discolor* mediante ósmosis directa

L. Fuentes<sup>1,3,4</sup>, J. Ortega<sup>3,4</sup>, F. Pinto<sup>5</sup>, O. Rubilar<sup>2,3</sup> y G. Ciudad<sup>2,3</sup> <sup>1</sup>Doctorado en Ciencias de la Ingeniería, mención Bioprocesos, Universidad de La Frontera, Avenida Francisco Salazar #01145, Temuco, Chile.

<sup>2</sup>Departamento de Ingeniería Química, Facultad de Ingeniería y Ciencias, Universidad de La Frontera, Temuco, Chile.

<sup>3</sup>Centro de Excelencia en Investigación Biotecnología aplicada al Ambiente (CIBAMA), Universidad de La Frontera, Temuco, Chile.

<sup>4</sup>Instituto del Medio Ambiente (IMA), Universidad de La Frontera, Avenida Francisco Salazar 01145, Temuco, Chile.

<sup>5</sup>Departamento de Procesos Industriales, Facultad de Ingeniería, Universidad Católica de Temuco, Casilla 15-D, Temuco, Chile.

*lilian.fuentes@ufrontera.cl*

Las enzimas ligninolíticas lacasa (Lac) y manganeso peroxidasa (MnP) producidas por el *A. discolor* son productos que poseen un alto valor biotecnológico debido a su baja especificidad que le permite ser utilizadas en procesos de biorremediación. La dificultad de su recuperación ha motivado la búsqueda de nuevas alternativas que minimicen aspectos operativos como el número de operaciones unitarias y permitan disponer del extracto ligninolítico de manera más sencilla.

La ósmosis directa (FO) emerge como una alternativa para concentrar sin emplear presión externas o temperatura, evitando así su degradación. Se utiliza una membrana semipermeable que separa la solución de alimentación (extracto enzimático) de una solución de extracción (DS) con mayor potencial osmótico. El gradiente osmótico induce la migración del agua, concentrando el extracto. En este trabajo aprovechamos un inconveniente típico de la FO, el flux reverso de sal ( $J_s$ ) de la DS hacia la alimentación para introducir intencionalmente Mn, esencial para la actividad de la MnP. Para ello, evaluamos una DS de  $MnSO_4$  que, además de concentrar, suministra Mn al extracto mediante el  $J_s$ .

Ensayos recientes mediante un diseño factorial  $2^3$  evaluaron el flux de agua ( $J_w$ ) y el flux reverso de sal ( $J_s$ ) en dos membranas de ósmosis directa (FO): una de triacetato de celulosa (CTA) y una de poliamida sobre soporte poroso (TFC). Los parámetros estudiados incluyeron: temperatura de la solución de extracción (DS: 25°C vs. 40°C), concentración de DS (0.5 M vs. 1 M) y modo de operación (FO - capa activa orientada hacia la solución de alimentación; PRO - capa activa orientada hacia la DS).

Los resultados demuestran que, para maximizar simultáneamente la concentración enzimática y la transferencia de Mn, la membrana TFC operada en modo FO con DS de 1.0 M a 25°C es la configuración óptima. Esta combinación logra: concentración del extracto en un 10% en 1 hora ( $J_w = 9.13 \text{ L} \cdot \text{m}^{-2} \cdot \text{h}^{-1}$ ) y dosificación de 28.3 mg/L de Mn ( $J_s = 7.08 \text{ g} \cdot \text{m}^{-2} \cdot \text{h}^{-1}$ ). Si bien el modo PRO mostró mayor  $J_s$  en ambas membranas, FO prioriza la eficiencia global (alto  $J_w + J_s$  controlado), evitando sobredosis. Estos hallazgos resaltan el comportamiento prometedor de  $MnSO_4$  como DS, donde el desempeño observado es consistente con estudios que usan NaCl, aportando validez a un sistema escasamente documentado.

**AGRADECIMIENTOS:** Proyecto FONDECYT Regular 1231521 del investigador Dr. Gustavo Ciudad y la Beca Doctorado Nacional ANID 21232028 junto con los recursos complementarios.

## **Producción de pecto-oligosacáridos con pectinasas inmovilizadas en nanopartículas magnéticas cubiertas con polidopamina**

F. Vergara<sup>1</sup>, M. Gabaldon<sup>2</sup>, C. Armijo<sup>1</sup>, M. Claros<sup>3</sup>, B. Urbano<sup>4</sup>, C. Guerrero<sup>1</sup>, A. Montilla<sup>2</sup>, S. Kimmins<sup>5</sup>, L. Wilson<sup>1</sup>, P. Urrutia<sup>1</sup>.

<sup>1</sup>*Escuela de Ingeniería Bioquímica, Pontificia Universidad Católica de Valparaíso, Valparaíso 2340000, Chile*

<sup>2</sup>*Instituto de Investigación en Ciencias de la Alimentación (CIAL), CSIC-Universidad Autónoma de Madrid, Madrid 28049, España*

<sup>3</sup>*Departamento de Ingeniería Metalúrgica y de Materiales, Universidad Técnica Federico Santa María, Valparaíso 2390123, Chile*

<sup>4</sup>*Departamento de Polímeros, Facultad de Ciencias Químicas, Universidad de Concepción, Concepción 3349001, Chile*

<sup>5</sup>*Instituto de Química, Pontificia Universidad Católica de Valparaíso, Valparaíso 2373223, Chile*  
*paulina.urrutia@pucv.cl*

La pectina es un heteropolisacárido natural de gran relevancia industrial. Se ha encontrado que su hidrólisis da origen a oligosacáridos pécticos (POS) con diversas propiedades bioactivas. Los POS pueden obtenerse mediante diversos métodos, destacando la hidrólisis enzimática debido a la alta especificidad del catalizador. La inmovilización enzimática es una estrategia que permite superar las limitaciones técnicas y económicas asociadas al uso de las enzimas solubles, al permitir la reutilización del catalizador y flexibilizar las modalidades de reacción. El uso de nanopartículas como soporte para la inmovilización ha despertado mucho interés, debido a su gran área superficial específica. En particular, las nanopartículas magnéticas (NPMs) ofrecen la ventaja adicional de permitir una fácil recuperación. El presente trabajo tuvo como objetivo evaluar el efecto de la aminación química de las pectinasas del preparado comercial ViscozymeL® en su inmovilización en nanopartículas magnéticas cubiertas con polidopamina (PDA-NPMs) y analizar su potencial en la producción de POS. Se sintetizaron NPMs por método hidrotermal y se incubaron con dopamina favoreciendo su polimerización sobre el soporte. El soporte fue caracterizado con FTIR y TEM. Para favorecer la unión de la enzima al soporte, se evaluó la aminación química de las enzimas con carbodiimida y etilendiamina. El catalizador fue caracterizado en términos de su perfil de pH y temperatura. Se evaluó la hidrólisis de pectina de manzana. Los monómeros y carbohidratos de bajo peso molecular (PM) fueron cuantificados por GC-FID y la distribución de PM de los productos fue analizado por HPSEC-ELSD. Las NPMs sintetizadas fueron cubiertas por una delgada capa de PDA. Al inmovilizar los catalizadores se obtuvo que la aminación favoreció la unión de la enzima, obteniendo una actividad específica expresada de  $3,03 \pm 0,32$  IU y  $25,69 \pm 2,81$  IU/g para el catalizador sin y con aminación, respectivamente. El catalizador aminado e inmovilizado fue caracterizado, obteniendo las mayores velocidades iniciales de reacción a 45-50°C y pH 4. Al evaluar el desempeño del catalizador inmovilizado en la hidrólisis de pectina de manzana, se evidenció que a lo largo de la reacción hubo una disminución en el PM del producto, pasando de un valor promedio de 158,6 kDa hasta valores cercanos 5 kDa, y aumentó la concentración de monómeros, siendo el principal componente el ácido galacturónico. Los resultados muestran que la aminación química es una estrategia efectiva para favorecer la inmovilización de pectinasas en PDA-NPMs, obteniendo un catalizador cuya aplicación en la hidrólisis de pectina permite la obtención de POS.

## Chemical crystallization of turmeric to improve its solubility and antioxidant activity, and to prevent its hydrolytic rancidity

J. Leiva-Vega<sup>1,2,\*</sup>, C. Flores-Soto<sup>2</sup>, C. Herrera-Lavados<sup>2</sup>, D. Pino-Acuña<sup>2</sup>, L. De La Fuente-Jiménez<sup>1</sup>

<sup>1</sup> Department of Aquaculture and Agri-Food Resources, University of Los Lagos, Avenida Alberto Fuchslocher 1305, Osorno, Chile.

<sup>2</sup> Research Centre of Agro-Aquaculture Residues, Avenida Diego de Almagro 1484, Osorno, Chile.

\* Corresponding author: javier.leiva.vega@gmail.com

Turmeric (*Curcuma longa*) has applications in nutraceutical, cosmetic and pharmaceutical fields, primarily due to its strong antioxidant activity. However, turmeric is practically insoluble in water and exhibits poor chemical stability, which limits its use as therapeutic agent in medicine. The objective of this study was to subject turmeric to a chemical crystallization treatment to improve its solubility and antioxidant activity, and to prevent its hydrolytic rancidity. Hexane was used as solvent for chemical crystallization. Solubility was measured in distilled water by centrifugation and quantified gravimetrically. *In vitro* antioxidant activity was assessed using the DPPH, FRAP, and ORAC methods. Hydrolytic rancidity was evaluated by measuring free fatty acids (expressed as oleic acid content). Crystallized turmeric was observed using an inverted microscope. The solubility of crystallized turmeric was increased from 2.5 g L<sup>-1</sup> to 30 g L<sup>-1</sup>. The DPPH and FRAP assays showed an increase of antioxidant activity in crystallized turmeric compared to commercial turmeric, although no significant differences were observed using the ORAC method ( $p > 0.05$ ). The formation of free fatty acids was reduced with chemical crystallization. Structurally, the commercial turmeric particles displayed a rough surface characterized by a fractal dimension of  $1.8909 \pm 0.0137$ . In contrast, crystallized turmeric was 2.6% more fractal than the commercial product, but with some surfaces exhibiting varying degrees of roughness. These findings confirm that crystallized turmeric improves its solubility and antioxidant activity, and reduces its hydrolytic rancidity. The increase in surface roughness of turmeric particles through chemical crystallization could have contributed to overcoming turmeric's limitations.

## **Efecto del recubrimiento comestible a base del látex de sande (*Brosimum utile*) sobre la vida útil de la papaya (*Carica papaya*)**

Dunia Chávez Esponda<sup>1</sup>, Vicky Katherine Solórzano Villacres<sup>1</sup>

<sup>1</sup> Facultad de Ciencias de la Vida, Universidad Estatal Amazónica, Puyo 160150, Ecuador

[dchavez@uea.edu.ec](mailto:dchavez@uea.edu.ec)

El uso de los recubrimientos es una práctica antigua que se ha utilizado con la finalidad de ralentizar la maduración de los frutos y extender su vida útil. Ecuador posee muchos productos ancestrales que en la actualidad se desconocen o carecen de estudios científicos, pudiendo citar al látex de sande (*Brosimum utile*), el cual se encuentra en la Amazonía y es conocido únicamente como un gastroprotector. Esto deja a un lado los demás beneficios que se pueden alcanzar gracias a su composición, debido a que en su estructura cuenta con una cantidad elevada de alcaloides, terpenos y resinas. Teniendo en cuenta que estos metabolitos secundarios pueden ser utilizados como antifúngicos y la presencia de resinas genera una mayor adhesividad, el látex se convierte en un producto óptimo para la elaboración de un recubrimiento comestible de origen natural. El látex de sande es un producto biodegradable, no tóxico y amigable con el ambiente. En la presente investigación se analizó el efecto del recubrimiento de látex de sande sobre la vida útil de la papaya (*Carica papaya*). Se elaboraron tres recubrimientos con porcentajes de látex de 33.3%, 66.6% y 100%. Se utilizó un diseño completamente al azar con cinco tratamientos y tres repeticiones. Los tratamientos considerados fueron: "sin recubrimiento", "con cera comercial" y los tres porcentajes de látex mencionados. Los datos fueron procesados mediante Análisis de Varianza y Test de Tukey ( $p < 0.05$ ) utilizando el software estadístico SPSS. Se analizó el comportamiento físico (pérdida de peso, textura y color), químico (sólidos solubles, acidez e índice de madurez) y microbiológico (mohos y levaduras). Las papayas sin recubrimiento presentaron diferencias significativas con respecto a las papayas con recubrimiento. Los análisis fisicoquímico y microbiológico de la papaya, utilizando látex de sande revelaron resultados positivos, mostrando un retraso en su maduración. Se observó al día 15 una mayor firmeza, menor pérdida de peso (valor promedio de 3,66%), mayor acidez (promedio de 0,17%), menor cantidad de sólidos solubles (promedio de 9,17) e índice de maduración (promedio de 56,47) en el tratamiento con 100% de látex. El análisis citotóxico evidenció que el látex es inocuo, ya que no presenta riesgo de muerte celular; mientras que el análisis microbiológico mostró ausencia de mohos y levaduras. Los aerobios mesófilos se encontraron en un rango aceptable. El mejor tratamiento resultó ser con un 100% de látex. El uso de recubrimiento a base del látex de sande retarda el proceso de maduración y contribuye a la preservación del alimento, por lo que se convierte en una alternativa para extender la vida útil de la papaya.

## Efecto de parámetros de cultivo sobre el crecimiento, metabolismo y producción de exopolisacáridos en *Piscirickettsia salmonis*: implicancias para el escalamiento de vacunas

Patricio, Zelada-Cordero<sup>1,2</sup>, Claudia Altamirano<sup>2,3,4</sup>, Alejandra Arancibia<sup>2,3</sup>  
Norma A. Valdez-Cruz<sup>5</sup> and Mauricio A. Trujillo-Roldán<sup>5</sup>

1. Programa de Posgrado en Ciencias Bioquímicas, Universidad Nacional Autónoma de México, AP. 70228, CP. 04510. Ciudad de México, México.
2. Escuela de Ingeniería Bioquímica, Facultad de Ingeniería, Pontificia Universidad Católica de Valparaíso, Brasil #2085. Valparaíso, Chile.
3. IMPACT, Center of Interventional Medicine for Precision and Advanced Cellular Therapy. Santiago de Chile, Chile.
4. Centro Regional de Estudios en Alimentos Saludables, Av. Universidad 330, Curauma-Placilla, 2373223. Valparaíso, Chile.
5. Centro de Nanociencias y Nanotecnología, Universidad Nacional Autónoma de México, Km 107 carretera Tijuana-Ensenada, Baja California, 22860. Ensenada, México.

[patricio.zelada@pucv.cl](mailto:patricio.zelada@pucv.cl)

*Piscirickettsia salmonis* es el principal patógeno bacteriano de la salmonicultura chilena, causando pérdidas anuales cercanas a USD 700 millones. La prevención de esta enfermedad se basa principalmente en vacunas inactivadas, cuyo principio activo son bacterinas, es decir, biomasa bacteriana cultivada e inactivada que conserva sus componentes inmunogénicos. La calidad y composición de esta biomasa dependen directamente de las condiciones de cultivo empleadas, especialmente en etapas tempranas, lo que influye en la eficacia final de la vacuna. Por ello, optimizar estos parámetros y comprender su efecto en la fisiología bacteriana es esencial para estandarizar procesos y mejorar el control de la piscirickettsiosis.

Este estudio evaluó el efecto del diseño de matraces agitados, bafleados (BF) y no bafleados o estandar (NF), y de biorreactores de tanque agitado (STR) sobre la fisiología y metabolismo de *P. salmonis* en condiciones axénicas y por lotes, considerando parámetros de transferencia de masa y momento.

En matraces, el cambio de diseño de NF a BF incrementó tanto la potencia específica (P/V) como el coeficiente volumétrico de transferencia de oxígeno ( $k_{La}$ ), lo que se asoció con reducciones del 22–39% en las tasas específicas de crecimiento, menor productividad volumétrica (–23%) y menor consumo de glutamato. En NF, los perfiles de OTR y CTR mostraron picos definidos, mientras que en BF fueron planos y constantes, sugiriendo estrés hidrodinámico. La producción de exopolisacáridos (EPS), vinculada a virulencia e inmunogenicidad, fue 5,5 veces superior en NF (1,48 g/L) que en BF (0,27 g/L).

En STR, manteniendo constante P/V y aumentando  $k_{La}$ , se observó un mayor crecimiento de biomasa acompañado de un menor consumo de glutamato y otros sustratos, lo que podría asociarse indirectamente a una menor producción de EPS. Consideramos que este efecto estuvo principalmente relacionado con la mayor disponibilidad de oxígeno disuelto. Finalmente, el aumento de P/V en STR inhibió completamente el crecimiento bacteriano. Estos hallazgos resaltan que el control de la transferencia de masa y momento es un factor crítico para escalar procesos de cultivo destinados a vacunas, aportando criterios operacionales para estandarizar y optimizar la producción de bacterinas funcionales.



## Integración de extracción de lípidos en un sistema tipo biorrefinería de *Gracilaria chilensis*.

N. Contreras<sup>1</sup>, D. Saucedo<sup>1</sup>, M.E. Lienqueo<sup>1</sup>

<sup>1</sup> Centro de Biotecnología y Bioingeniería (CeBiB), Departamento de Ingeniería Química, Biotecnología y Materiales, Universidad de Chile, Beauchef 851, Santiago, Chile.

dsaucedo@uchile.cl

La presente investigación se enmarca en el desarrollo de un proceso de biorrefinería integral basada en *Gracilaria chilensis* ("pelillo") cuyo objetivo es maximizar el aprovechamiento de la biomasa algal mediante la recuperación secuencial de biocompuestos de alto valor agregado. Este enfoque responde a los principios de la economía circular y sustentabilidad, promoviendo el uso eficiente de los recursos naturales a través de procesos de extracción en cascada.

El proceso propuesto integra la extracción de lípidos optimizada, compatible con la recuperación de proteínas, agar y agarosa. Estudios previos mostraron que la extracción secuencial de ficobiliproteínas y agar desde *Gracilaria chilensis*, no alteraba la calidad del agar y se obtenían 4.08 mg de proteínas/g de alga seca y 0.249 g de agar/g de alga seca. (Brain et al., 2022). Además de obtener agarosa a partir de agar de *G. chilensis* utilizando PEG-6000 a 50°C, lo que permitía obtener agarosa con una fuerza de gel de 826 g/cm<sup>3</sup> y 0.16% de contenido de sulfatos (Trujillo M, 2024). La optimización de extracción de lípidos evaluó mezclas de solventes orgánicos Cloroformo-Hexano y Heptano-Metanol, con un diseño de experimentos tipo Box Behnken, del cual se obtuvieron como óptimos 167 min de extracción a una relación 1:16.5 p:v. Por lo que se consideró relevante la integración de los parámetros optimizados en la extracción multietapa de productos desde *G. Chilensis*.

Este ensayo evaluó la extracción de lípidos tiempo y relación sólido-solvente optimizados, utilizando etanol como solvente orgánico. La extracción de proteínas se realizó mediante ciclos de congelación-descongelación con PBS. Para la extracción de agar, se empleó una solución de NaOH seguida de neutralización con H<sub>2</sub>SO<sub>4</sub>. La obtención de agarosa se llevó a cabo utilizando PEG 6000. Estas etapas se organizaron en dos secuencias de extracción de biocompuestos: Secuencia 1 (lípidos-proteínas-agar) y Secuencia 2 (proteínas-lípidos-agar). Los resultados obtenidos por gramo de alga seca indicaron para la Secuencia 1: 1.40 mg de lípidos, 1.49 mg de proteína y 0.27 g de agar, con una similitud del 88.7% respecto al agar comercial, medida por FTIR. Para la Secuencia 2, se obtuvieron 1.15 mg de lípidos, 1.67 mg de proteínas y 0.29 g de agar con una similitud del 85.89% con el agar comercial. La Secuencia 1 resultó más atractiva debido a la mayor similitud del agar y mayor cantidad de lípidos extraídos. Finalmente, la extracción de agarosa a partir del agar extraído se integró como última etapa mediante el uso de PEG 6000 a 50 °C (Trujillo M., 2024).

Esta aproximación permite configurar una biorrefinería funcional que recupera cuatro biocompuestos de interés (lípidos, proteínas, agar y agarosa) a partir de una misma fuente de biomasa, promoviendo el desarrollo de productos para las industrias alimentaria, cosmética, farmacéutica y de biomateriales, con base en un modelo sustentable de aprovechamiento de algas rojas, que valoriza integralmente el recurso, orientándose a un proceso "cero residuo".

**Agradecimientos:** Centro de Biotecnología y Bioingeniería (CeBiB) AFB240001.



## Development of a digital model for beer quality prediction integrating industrial process data and model-based fermentation descriptors

Saa, PA<sup>1,2,3</sup>

<sup>1</sup>*Departamento de Ingeniería Química y Bioprocesos, Escuela de Ingeniería, Pontificia Universidad Católica de Chile.*

<sup>2</sup>*Instituto de Ingeniería Matemática y Computacional, Pontificia Universidad Católica de Chile.*

<sup>3</sup>*Centro Nacional de Inteligencia Artificial, CENIAFB 210017, Basal ANID.*

*pnsaa@uc.cl*

Beer production consists of a series of complex chemical, physical, and biological transformations. Although modern industrial production protocols are highly standardized, external and process disturbances often lead to degradation in beer quality. While models are available to predict beer quality, their widespread use is currently limited. Typically, these models rely on input variables from products that are almost complete; therefore, corrective measures cannot be implemented on time. Advanced modeling tools, such as digital twins, are effective alternatives to tackle this limitation, as they can integrate real-time process data into a digital model of the physical system to provide online predictions. To advance the development of such a tool, we have developed a hybrid model for beer quality prediction by combining different modeling frameworks and industrial process data. First, a dynamic model of industrial beer fermentation was calibrated that satisfactorily captured the kinetics of primary (extract) and quality-associated volatile compounds (pentanedione and butanedione). In each case, the variance explained by the model surpassed the 95% and 85% level, respectively. Second, a Naïve Bayes classifier for predicting beer quality was trained using physicochemical variables that identified the most critical attributes in a high-quality beer (ethyl acetate, total esters, foam stability, bitterness, and isoamyl acetate). The classifier was able to discriminate between moderate-quality and higher quality beer with an accuracy of 71% and a recall of 85%. Lastly, a hybrid regression model was constructed using fermentation model descriptors and external process data to predict the latter attributes with high prediction fidelity (less than 10% relative root mean squared error). The model identified yeast handling—including storage and propagation—and wort preparation as critical determinants of final product quality. By exerting a reproducible management of the yeast and wort a higher quality beer, our digital model predicts a more reliable production of high-quality beer. Overall, this work represents a step toward developing a digital twin that can provide real-time process descriptors and integrate industrial data. This information will be critical for optimizing wort preparation and beer fermentation according to the manufacturer's nutrition protocols and operation policies such that the beer quality is enhanced and maintained.

## Efecto del extracto de cáscara de avellana chilena sobre la estabilidad oxidativa de aceites vegetales sometidos a tratamiento térmico

Claudia Vergara<sup>1</sup>, Cerselina Moya<sup>2</sup>, Marcos Flores<sup>2</sup>

<sup>1</sup>Departamento de Ciencias Básicas, Facultad de Ciencias, Universidad Santo Tomás. Talca, Chile.

<sup>2</sup>Departamento de Horticultura, Facultad de Ciencias agrarias, Universidad de Talca, Campus Lircay, Talca, Chile.

*claudiavergara@santotomas.cl*

La estabilidad oxidativa de aceites vegetales bajo tratamientos térmicos prolongados constituye un aspecto crítico para garantizar su calidad y seguridad en el consumo humano. Este estudio evaluó la influencia de extractos etanólicos de cáscara de avellana chilena (*Gevuina avellana*) sobre la estabilidad oxidativa de dos aceites comestibles extra-virgenes (oliva y palta) sometidos a tratamiento térmico prolongado (80°C durante 5 semanas) como alternativa al uso de antioxidantes sintéticos para mejorar la calidad y vida útil de los aceites. La metodología contempló la preparación de extractos de cáscara de avellana mediante maceración con etanol al 96%, y se realizaron cuatro tratamientos los cuales incluyeron aceites puros como control y aceites enriquecidos con una concentración de 1000 ppm de extracto, cada uno con 3 repeticiones. A intervalos de 7 a 9 días se recolectaron muestras para evaluar parámetros fisicoquímicos: compuestos polares (CP), índice de acidez (IA), índice de refracción, viscosidad, densidad, análisis de color (CIELAB), espectroscopía FTIR-ATR, coeficientes de absorción  $K_{232}$  y  $K_{270}$ , contenido de pigmentos (clorofilas y carotenoides), índice de p-anisidina y perfil de ácidos grasos por cromatografía de gases con detección de ionización de llama (GC-FID). Los datos fueron analizados mediante el test de student ( $p \leq 0,05$ ) para determinar diferencias significativas entre tratamientos.

Los resultados evidenciaron que la incorporación del extracto de avellana redujo el incremento de compuestos polares y el índice de acidez en un 10 y en un 40% respectivamente, en la semana 5 de calentamiento para el aceite de oliva y en un 3 y 19% respectivamente, en la semana 3 para el aceite de palta, prolongando la estabilidad oxidativa, especialmente en aceite de oliva extra virgen. Al término del ensayo, el aceite de oliva sin extracto superó el límite regulatorio del reglamento sanitario de los alimentos de CP (25%) en la semana 5 de calentamiento, alcanzando un valor cercano al 30%, mientras que el aceite con extracto se mantuvo bajo 20%. Un efecto similar, aunque menos pronunciado, se observó en el aceite de palta. Los parámetros espectrofotométricos ( $K_{232}$  y  $K_{270}$ ) y el índice de p-anisidina confirmaron una menor formación de productos de oxidación primaria y secundaria en los aceites con extracto, lo cual se asoció con la presencia de compuestos fenólicos en la cáscara de avellana. Además, los análisis FTIR-ATR indicaron una conservación de las bandas características de los triglicéridos en los aceites enriquecidos.

Estos resultados sugieren que la incorporación de extractos fenólicos naturales puede ser una estrategia efectiva para mejorar la estabilidad oxidativa de aceites ricos en compuestos insaturados, ofreciendo una alternativa sustentable a los aditivos sintéticos en tratamientos a altas temperaturas y por tiempo prolongado.

## Implementación de un biorreactor de membrana asistido con ultrasonido (US) para la síntesis de galacto-oligosacáridos (GOS)

Henríquez, P.<sup>1</sup>, Cordova, A.<sup>1</sup>, Mazzei, R.<sup>2</sup>, Astudillo-Castro, C.<sup>1</sup>, Carrasco, V.<sup>1</sup>

<sup>1</sup> *Facultad de Ciencias Agronómicas y de los Alimentos, Pontificia Universidad Católica de Valparaíso, Chile*

<sup>2</sup> *Institute on Membrane Technology, Consiglio Nazionale delle Ricerche, ITM-CNR, Italia*

*paola.henriquez.c@mail.pucv.cl*

Los biorreactores de membrana (MBR) han sido utilizados para la síntesis de galacto-oligosacáridos (GOS), prebióticos generados a partir de altas concentraciones de lactosa mediante  $\beta$ -galactosidasas. Sin embargo, dichas concentraciones favorecen el ensuciamiento (fouling) de las membranas, afectando la eficiencia del proceso. El uso de ultrasonido (US) ha surgido como una alternativa prometedora tanto para la limpieza como para prevenir la formación de fouling. El objetivo fue evaluar el efecto del ultrasonido (US) en el biorreactor de membrana (MBR-US), con respecto a las curvas de *flux* vs presión transmembrana (PTM), el análisis de FTIR de las membranas con y sin aplicación de US y se analizaron los cambios conformacionales de la enzima por recirculación en el MBR por difracción circular (CD). Se implementó un sistema de filtración tangencial asistido por US con membranas de PVDF y PES (cut-off 50 kDa) y una solución de lactosa a 470 g/L. Las curvas de *flux* vs PTM se construyeron a una temperatura de 40°C, con un caudal de alimentación 2,58 L/min e intensidad de 7,40 W/cm<sup>2</sup>, los resultados mostraron un incremento del 26 % en el flujo crítico y límite en la membrana PES con US respecto al control. Los análisis obtenidos en el FTIR, las membranas (PVDF y PES) fueron sometidos a una intensidad US de 7,59 W/cm<sup>2</sup>, un caudal 6,68 L/min y 40°C y un control al mismo caudal y temperatura, indicando una menor retención de proteínas en las membranas tratadas con US, lo que sugiere una reducción efectiva del fouling. Además, para los análisis de difracción circular la enzima fue sometida a recirculación durante 4 horas a un caudal de 2,58 L/min a un pH de 5,5, se observó que la recirculación de la enzima provocó una disminución de la estructura  $\alpha$ -hélice y un leve aumento en  $\beta$ -plegada, indicando una mayor rigidez estructural y posible interacción con la membrana, lo que podría afectar su funcionalidad catalítica. En conjunto, los resultados indican que la aplicación de US mejora el desempeño de filtración y presenta potencial para optimizar la síntesis de GOS, siempre que se controlen las condiciones operativas para preservar la funcionalidad enzimática.

## Un nuevo nanomaterial sintetizado mecanoquímicamente para la adsorción del fármaco anticancerígeno Mesilato de Imatinib en agua

Jean Pierre Cañarte-Chinga<sup>1,2</sup>, Alejandro Josué Gacía-Guerrero<sup>1</sup>, Bryan Fernando Rivadeneira-Mendoza<sup>1</sup>, Carlos Augusto Morales-Paredes<sup>1</sup>, Joan Manuel Rodríguez-Díaz<sup>1,3</sup>

<sup>1</sup> Laboratorio de Análisis Químicos y Biotecnológicos, Instituto de Investigación, Universidad Técnica de Manabí, Portoviejo, Ecuador

<sup>2</sup> Departamento de Ingeniería de Procesos y Bioproductos, Facultad de Ingeniería, Universidad del Bío-Bío, Concepción 4030000, Chile

<sup>3</sup> Departamento de Procesos Químicos, Alimentos y Biotecnología, Facultad de Ingenierías y Ciencias Aplicadas, Universidad Técnica de Manabí, Portoviejo, Ecuador  
*jean.canarte2501@alumnos.ubiobio.cl*

El mesilato de imatinib (IM) es un medicamento anticancerígeno que se utiliza principalmente en el tratamiento de la leucemia mieloide crónica. Su creciente uso clínico ha provocado acumulación en cuerpos de agua, al ser un contaminante orgánico recalcitrante en aguas residuales. La adsorción es una estrategia prometedora para reducir la cantidad de fármacos presentes en agua, no obstante, se ve limitada por la eficiencia de los materiales adsorbentes. El propósito de esta investigación fue proponer un nuevo nanomaterial obtenido a través de un método mecanoquímico empleando un molino planetario de bolas, para la adsorción de IM en solución acuosa. Los ensayos se realizaron en batch y flujo continuo, empleando condiciones experimentales para evaluar la dosis del adsorbente, el efecto del pH en la solución, el tiempo de contacto, la concentración del adsorbato y el efecto de la temperatura. Los resultados demostraron que se alcanzó una capacidad máxima de adsorción de 25,221 mg g<sup>-1</sup> a pH del medio de 6,83 con una cantidad de 0,8 g L<sup>-1</sup> de adsorbente durante un período de 60 min. Los modelos de Elovich y pseudo-segundo orden describieron apropiadamente la cinética de adsorción y el equilibrio mediante los modelos de Sips y de Toth, sugiriendo una adsorción desordenada por la heterogeneidad de la superficie del material, donde el adsorbato interactúa con sitios activos de diferentes energías. En el estudio termodinámico, el valor de la entalpía ( $\Delta H^\circ = 20.33 \text{ kJ mol}^{-1}$ ) indicó que la adsorción es de naturaleza endotérmica y que la fisisorción es el mecanismo predominante mediante el cual las moléculas interactúan con la superficie del material. En flujo continuo, las curvas de ruptura a diferentes caudales (0.2, 0.3 y 0.4 mL min<sup>-1</sup>) mostraron una baja capacidad de adsorción en el sistema (2.43, 1.64 y 5.17 mg g<sup>-1</sup>) con respecto a los ensayos en batch, debido a la distancia entre el punto de ruptura (5 % de IM en el efluente) y el punto de saturación de la columna (95 % de IM en el efluente). El estudio de reúso demostró que, a pesar de 10 ciclos operativos consecutivos en batch, la capacidad de adsorción del material no se vio afectada de manera significativa, lo cual resultaría beneficioso en cuanto a la reducción de costos, residuos y complejidad operativa en sistemas a gran escala.

## Solubility measurement of two new synthesized derivatives of 2,3-dichloronaphthalene-1,4-dione (dichlone) in supercritical carbon dioxide

Eduarda A. Villar<sup>1</sup>, Adolfo L. Cabrera<sup>1</sup>, Flavia C. Zacconi<sup>2</sup>, José M. del Valle<sup>2</sup>, Juan C. de la Fuente<sup>1</sup>

<sup>1</sup> *Universidad Técnica Federico Santa María, Valparaíso, 239-0123, Chile*

<sup>2</sup> *Pontificia Universidad Católica de Chile, Santiago, 782-0436, Chile*

*eduarda.villar@sansano.usm.cl*

Dichlone (2,3-dichloronaphthalene-1,4-dione) is widely used in agriculture as a fungicide, yet the influence of targeted structural modifications on its recovery by supercritical CO<sub>2</sub> (SC-CO<sub>2</sub>) extraction remains underexplored. Assessing the solubility of its derivatives in SC-CO<sub>2</sub> is relevant for designing cleaner and more sustainable separation processes in the agrochemical and food industries, where supercritical fluid extraction represents a green alternative to conventional organic solvents, and where such derivatives may enable safer and more efficient agrochemical applications.

In this work, two brominated derivatives were synthesized and characterized: 2-((4-bromobenzyl)amino)-3-chloronaphthalene-1,4-dione (dCl-2B(Br)) and 2-((4-bromophenethyl)amino)-3-chloronaphthalene-1,4-dione (dCl-3P(Br)). Their solubility in SC-CO<sub>2</sub> was determined in visually confirmed {solid + fluid} systems at 313–333 K and 8–32 MPa using a dynamic-analytic methodology. Data validation included uncertainty estimation (inherited error and repeatability), thermodynamic consistency and self-consistency.

Experimental solubility values ranged from 2.1–7.0  $\mu\text{mol}\cdot\text{mol}^{-1}$  for dCl-2B(Br) and 3.7–16.2  $\mu\text{mol}\cdot\text{mol}^{-1}$  for dCl-3P(Br), increasing with temperature at constant density and increased with density at constant temperature for both solutes. Under all tested conditions, dCl-3P(Br) was approximately twice as soluble as dCl-2B(Br). Solubility increased with solute size, which is contrary to the expected trend, as has been reported for homologous compounds in our previous works. The experimental solubility was then compared with the solubility data of previously synthesized dichlone derivatives: dCl-2B(H), dCl-3P(H), dCl-2B(Cl), dCl-3P(Cl), dCl-2B(F), dCl-3P(F), which have the same structure dCl-2B(Br) and dCl-3P(Br), only differing in the bromine atom, having either a hydrogen, a chlorine or a fluorine atom instead. The brominated derivatives were the least soluble in the series previously reported and the -3P derivatives were consistently more soluble than their -2P analogues. Solubility data were modeled using SAFT-VR Mie EoS and Chrastil correlation, yielding satisfactory agreement with experimental data. These findings highlight the need for accurate solubility data across wide T and P ranges to design SC-CO<sub>2</sub> separation processes, as small structural variations can markedly affect solubility.

These results highlight the need for accurate solubility data across wide temperature and pressure ranges for the design of SC-CO<sub>2</sub> separation processes, as small structural variations can significantly modify solubility. Such information provides a useful basis for optimizing supercritical extraction in agrochemical and food applications, supporting cleaner and more efficient production strategies.

## EVALUACIÓN TÉCNICO-ECONÓMICA Y DE EMISIÓN DE CO<sub>2</sub> DE LA PRODUCCIÓN DE 1,3-BUTANODIOL MEDIANTE FERMENTACIÓN Y CONVERSIÓN QUÍMICA

J. Saavedra<sup>1</sup>, F. España<sup>1</sup>, F. Scott<sup>1,2</sup>

<sup>1</sup> Universidad de los Andes, Facultad de Ingeniería y Ciencias Aplicadas.

<sup>2</sup> Green Technologies Research Group (G-Tech).

*jpsaavedra@miuandes.cl*

La industria química enfrenta el desafío urgente de reducir su dependencia de fuentes fósiles y mitigar sus elevadas emisiones de gases de efecto invernadero (GEI). Este problema es particularmente relevante en la producción de 1,3-butanodiol (1,3-BDO), compuesto de creciente interés por sus aplicaciones en polímeros de especialidad, pinturas y cosméticos, que hoy se obtiene mayoritariamente de fuentes petroquímicas en forma de mezclas racémicas de isómeros *R* y *S*. En este contexto, el *R*-1,3-BDO representa una alternativa diferenciadora de alto valor agregado, tanto por sus propiedades funcionales como por su potencial en mercados especializados, incluyendo la industria química y farmacéutica, donde la demanda por compuestos de origen renovable es cada vez más significativa.

Esta investigación propone una vía más sustentable basada en la producción biotecnológica de *R*-1,3-BDO a partir de sacarosa, a través de un proceso que integra la obtención de polihidroxibutirato (PHB), su esterificación y posterior hidrogenación. Se evaluó el proceso mediante simulaciones en Aspen Plus V14, comparando cuatro escenarios que difirieron en el solvente de extracción del PHB (dimetil carbonato o butil acetato) y en ciertas condiciones operativas. El análisis abarcó aspectos técnicos, económicos y ambientales, con énfasis en rentabilidad y emisiones de GEI (alcances 1 y 2, además de parte del alcance 3, centrado principalmente en el tratamiento externo de residuos). Adicionalmente, se elaboró un diagrama de flujo de procesos y se elaboraron estimaciones de inversión y operación, permitiendo obtener una visión más integral del desempeño del sistema.

Los resultados muestran que los escenarios con butil acetato presentan menores costos operativos, una rentabilidad positiva y una reducción de la huella ambiental, en comparación con aquellos que emplearon dimetil carbonato. El precio mínimo de venta del producto se estimó en torno a 2,2-2,5 [USD/kg], lo que lo sitúa dentro de un rango competitivo frente a los valores reportados en la literatura. Cabe destacar que, en aplicaciones de mayor valor y enantiopuras, el *R*-1,3-BDO puede alcanzar precios considerablemente más altos, lo que aumenta su atractivo económico y su potencial de mercado.

En síntesis, los resultados indican que la producción biotecnológica de *R*-1,3-BDO es factible, ambientalmente más favorable, y al mismo tiempo, constituye una alternativa estratégica por el valor agregado que ofrece un producto enantiopuro frente a las mezclas petroquímicas. De esta manera, se abre una oportunidad concreta para avanzar hacia una industria química más verde, competitiva y alineada con las tendencias globales de sostenibilidad.



## Microencapsulación de oleogeles de aceite de chía mediante emulsión Pickering O/W y secado por aspersión: Efecto de ceras naturales y materiales de pared sobre la eficiencia de encapsulación

Matias Leiva<sup>1</sup>, Eduardo Morales<sup>1,2\*</sup>, Mónica Rubilar<sup>1,2</sup>

<sup>1</sup>*Departamento de Ingeniería Química, Facultad de Ingeniería y Ciencia, Universidad de La Frontera, Temuco, Chile.*

<sup>2</sup>*Núcleo Científico y Tecnológico en Biorecursos, BIOREN, Universidad de La Frontera, Temuco, Chile*

*[m.leiva04@ufromail.cl](mailto:m.leiva04@ufromail.cl); [\\*eduardo.morales@ufrontera.cl](mailto:*eduardo.morales@ufrontera.cl)*

Los aceites vegetales estructurados con ceras naturales, conocidos como oleogeles, pueden encapsularse mediante emulsiones Pickering de tipo O/W, lo que ha despertado gran interés, ya que la formación de cristales en la fase oleosa favorece la retención del aceite y estabilidad frente a la oxidación. No obstante, existe poca información sobre su conversión en polvos microencapsulados mediante secado por aspersión con diferentes materiales de pared, por lo que su aplicabilidad aún requiere ser investigada. El objetivo de este estudio fue evaluar el efecto de ceras naturales y materiales de pared en la eficiencia de encapsulación de oleogeles de aceite de chía mediante emulsión Pickering y secado por aspersión. Los oleogeles de aceite de chía fueron preparados con cera de abeja (BW) y cera shellac (SW) a 70 y 80 °C, respectivamente, a 300 rpm durante 30 minutos. Posteriormente, el oleogel se incorporó en una emulsión O/W estabilizada con partículas Pickering de aislado proteico de lupino (3% p/v), utilizando un homogeneizador de alta velocidad a 10.000 rpm durante 5 minutos. A la emulsión resultante se adicionó un 15% (p/p) de material de pared, específicamente goma arábica (GA) y maltodextrina (MD) antes del proceso de secado por aspersión a 140 °C. Se empleó un diseño experimental mediante el método Taguchi con un arreglo ortogonal L<sub>4</sub> (2<sup>3</sup>) para optimizar el proceso de formulación de microcápsulas de oleogeles de aceite de chía. Se evaluó el efecto de tres variables independientes: tipo de oleogelante (BW y SW), contenido de oleogelante en la fase oleosa (2,5 y 5%) y tipo de material de pared (GA y MD), sobre la EE. Finalmente, las microcápsulas fueron caracterizadas mediante microscopía electrónica de barrido (SEM). Los resultados de eficiencia de encapsulación (EE) de las microcápsulas de oleogeles de aceite de chía fueron analizados estadísticamente mediante ANOVA, con el fin de evaluar la influencia de las variables de control sobre la respuesta. La variable que mostró mayor efecto en la EE fue el material de pared ( $R^2=62,6\%$ ), seguida por el tipo de oleogelante ( $R^2=21,6\%$ ) y el contenido de oleogelante ( $R^2=4,4\%$ ). A su vez, las condiciones óptimas de formulación para obtener microcápsulas de oleogeles de aceite de chía con alta EE fueron: BW, 2,5% en la fase oleosa y GA. Bajo estas condiciones, la EE alcanzada fue  $64,1 \pm 1,97\%$ . Esto confirma que la combinación de variables de control y niveles de trabajo seleccionados fue adecuada para maximizar la EE de las microcápsulas. En cuanto a la morfología, las microcápsulas presentaron predominantemente una forma semiesférica con concavidades y abolladuras superficiales, y un tamaño de partícula inferior a 20  $\mu\text{m}$ . La presencia de concavidades se atribuye a la rápida evaporación del agua y a la contracción de las partículas durante el secado por aspersión. En conclusión, los resultados obtenidos demostraron que los oleogeles de aceite de chía microencapsulados tienen un gran potencial para su aplicación como ingrediente funcional en polvo en los alimentos.

**Agradecimientos:** Esta investigación fue financiada por ANID a través del proyecto FONDECYT POSTDOCTORADO N° 3230437.

## Microplásticos en los sistemas de tratamiento de aguas residuales: Implicancias en los consorcios microalgas-bacteria

V. Brito<sup>1\*</sup>, M. Vesga<sup>1</sup>, D. Jeison<sup>1</sup>, V. Oyanedel-Craver<sup>2</sup>

<sup>1</sup>Escuela de Ingeniería Bioquímica, Facultad de Ingeniería, Pontificia Universidad Católica de Valparaíso, Chile.

<sup>2</sup>Fascitelli Center for Advanced Engineering, Rhode Island University, United States.

\*Valeria.brito.e@mail.pucv.cl

Actualmente, el plástico está presente en prácticamente todos los ámbitos de la vida moderna, generando constantemente microplásticos (MPs), partículas peligrosas por su resistencia a la degradación. Los MPs ingresan a los sistemas de alcantarillados y llegan a las plantas de tratamiento de aguas residuales (PTAR) y retornan al medio ambiente ante la ausencia de procesos específicos para su eliminación. Esta problemática se acentúa en zonas rurales y pequeñas comunidades, donde los sistemas tradicionales no son factibles ya que no existe la infraestructura ni los recursos. En este sentido, los sistemas microalgas-bacterias (MBC) son una alternativa prometedora, por su bajo costo, operación sencilla y alta eficiencia en la remoción de nutrientes. Esta investigación se enfoca en el seguimiento de MPs en sistemas MBC. El trabajo se desarrolló en dos etapas: la primera correspondió a ensayos por lotes y la segunda en continuo en un reactor MBC. Se seleccionó HDPE reciclado como MPs modelo para los ensayos, debido a su facilidad de caracterización y amplia presencia en productos de uso cotidiano. El HDPE se obtuvo de tapas de botellas plásticas trituradas y tamizadas en un rango de 650-850  $\mu\text{m}$ . Para los ensayos de toxicidad de MPs en microalgas, se expuso un cultivo de *Chlorella vulgaris* a 100 mg/L de HDPE y un control sin presencia de MPs por triplicado. A partir de los ensayos, se obtuvieron las siguientes velocidades específicas de crecimiento:  $0.027 \pm 0.003 \text{ h}^{-1}$  para el cultivo control y  $0.020 \pm 0.011 \text{ h}^{-1}$  para el cultivo con MPs. Al no observarse diferencias significativas, se espera que la adición de HDPE en el reactor no altere el funcionamiento del sistema. Para la segunda etapa se operó un reactor raceway de 50L por 30 días, en condiciones ambientales reales (ubicado en exterior y expuesto a luz solar) alimentado con agua residual sintética y 20mg/L de HDPE a un caudal de 0.3L/h. Las muestras de MPs fueron procesadas con el reactivo de Fenton para realizar un balance de masa. Además, se analizaron los cambios químicos del polímero debido al sistema MBC por espectroscopía Raman, donde se concluye que no evidencian cambios significativos, manteniendo los peaks característicos del polímero. No obstante, se observaron peaks adicionales en la región entre 1500 y 1750  $\text{cm}^{-1}$ , lo que sugiere la posible presencia de nuevos grupos funcionales o compuestos adsorbidos sobre la superficie del MPs. Respecto a la distribución de MPs en el reactor, existe una retención del 87% de los MPs añadidos, tanto adheridos a las paredes del reactor, en suspensión y asociados débilmente a los flóculos. Estos hallazgos permiten orientar el enfoque y consideraciones a tener en cuenta para las próximas investigaciones respecto a los MPs en sistemas MBC.

## Comportamiento térmico de Oleogel en base a aceite de oliva comercial virgen extra y cera de abeja

Marcos Flores<sup>1</sup>, Roberto Quiroz<sup>1</sup>, Vicente Barros<sup>1</sup>, Jaime Ortiz-Viedma<sup>2</sup>

<sup>1</sup> Departamento de Horticultura, Facultad de Ciencias Agrarias, Universidad de Talca, Campus Lircay, Talca 3460000, Chile.

<sup>2</sup> Departamento de Ciencia de los Alimentos y Tecnología Química, Facultad de Ciencias Químicas y Farmacéuticas, Universidad de Chile, Dr. Carlos Lorca Tobar 964, Independencia, Santiago, Chile.

*marcos.flores@utalca.cl*

El desarrollo de oleogeles a partir de aceites vegetales no refinados y agentes estructurantes se ha posicionado como una estrategia innovadora en ciencia de alimentos para mejorar la estabilidad y funcionalidad de lípidos, además de aplicaciones tecnológicas como la sustitución de grasas. La evaluación de la estabilidad oxidativa permite comprender los mecanismos de degradación y los cambios fisicoquímicos que sufren estos materiales bajo calentamiento prolongado, semejante a procesos culinarios.

En este estudio se utilizó aceite de oliva comercial virgen extra (AO) y AO estructurado con cera de abeja (CA) de la región del Maule. El oleogel (OG) se elaboró con 6% de CA, agitado a 150 rpm a 70 °C durante 90 min. Posteriormente, OG y AO se sometieron a calentamiento constante a 80 °C en estufa sin circulación de aire por 21 días, evaluándose semanalmente parámetros como compuestos polares (CP), índice de acidez (IA), coeficientes de absorción (k232, k270), índice de refracción (IR), perfil de ácidos grasos (GC-FID), análisis termogravimétrico (TGA) y perfil de textura (PT). La prueba t de Student determinó las diferencias significativas.

Los resultados muestran que los CP presentaron diferencias a partir del día 14 (5,50 % en AO vs 4,83 % en OG). El IR también difirió (1,4676 en AO vs 1,4641 en OG), al igual que k232 y k270, que mostraron diferencias significativas desde el inicio ( $p < 0,05$ ). El perfil de ácidos grasos de OG reveló alta proporción de oleico (74 %), seguido de palmítico (14,3 %) y linoleico (7,4 %). El TGA indicó un Tonset superior en OG (401,6 °C) respecto a AO (397,3 °C), y una pérdida total de masa a temperaturas mayores (552 °C en OG vs 462,2 °C en AO), demostrando mayor resistencia térmica del oleogel.

El análisis de textura confirmó que la CA se comporta como un sólido duro y quebradizo (fracturabilidad: 497 g; dureza: 7763 g), mientras que el OG mostró baja dureza (79 g), gomosidad (10 g) y masticabilidad (3 g), lo que sugiere una estructura maleable, fácil de desintegrar y con menor cohesión interna. En elasticidad y resiliencia, CA presentó valores más altos (41,2 % y 137,7 % respectivamente), en contraste con OG (26,3 % y 5,2 %). La cohesividad fue similar en ambos materiales.

En conclusión, mientras la CA exhibe gran rigidez y resistencia mecánica, el OG forma una red blanda y flexible con potencial en aplicaciones de textura cremosa o untuosa. La menor formación de CP y la mayor estabilidad térmica (Tonset y temperatura de degradación) confirman que el OG ofrece ventajas frente al AO bajo condiciones de calentamiento prolongado.

## Caracterización de nuevas cepas degradadoras de caucho aisladas desde sitios contaminados

J. Rojas<sup>1</sup>, J. Brito<sup>2</sup>, A. Hernández<sup>2</sup>, M. Rojo<sup>2</sup>, R. Andler<sup>2</sup>

<sup>1</sup> Doctorado en Biotecnología Traslacional, Facultad de Ciencias Agrarias y Forestales, Universidad Católica del Maule, Talca, Chile.

<sup>2</sup> Escuela de Ingeniería en Biotecnología, Laboratorio de Bioprocesos, Centro de Biotecnología de los Recursos Naturales, Universidad Católica del Maule, Talca, Chile.

Josefa.rojas@alumnos.ucm.cl

Los neumáticos constituyen un producto esencial en la industria automotriz, sin embargo, poseen una corta vida útil y tras su descarte, pueden tardar hasta 2000 años en descomponerse. Como consecuencia, se han ido acumulando en vertederos, donde lamentablemente la incineración es una práctica común. Dicho proceso genera la emisión de compuestos altamente tóxicos tanto para el medioambiente como para la salud humana, tales como, dioxinas, furanos, óxidos de zinc, hidrocarburos aromáticos policíclicos (HAPs), entre otros. Uno de los principales desafíos para el reciclaje de este desecho es la estructura reticulada formada durante la vulcanización, la cual está compuesta por diferentes tipos de enlaces con azufre, limitando su biodegradabilidad. Los métodos químicos o termo-mecánicos propuestos presentan la desventaja de ser inespecíficos, es decir, rompen los enlaces C-C, como consecuencia se genera un producto con propiedades mecánicas débiles. En este contexto, al ser más específicos, el uso de microorganismos se ha vuelto una alternativa biotecnológica prometedora para el tratamiento de estos residuos, lo cual ha reforzado la necesidad de encontrar nuevos microorganismos con años de adaptación a este contaminante. El objetivo de este estudio fue evaluar el potencial de degradación de nuevas cepas aisladas desde sitios contaminados utilizando cultivos líquidos que contenían diferentes mezclas de caucho. Incluyendo caucho natural (NR), caucho butílico (BR), caucho estireno-butadieno (SBR) y granulados de caucho (CR), este último proveniente de una empresa recicladora de neumáticos. Además, contienen los siguientes aditivos, óxido de zinc (ZnO), ácido esteárico, bisulfuro de benzotiazol (MBTS) y azufre. Primero, se seleccionaron tres muestras, i) Neumático en contacto con suelo, ii) Biofilm formado en un neumático inmerso en agua, iii) Partes deterioradas del neumático inmerso en agua. A partir de las colonias crecidas en un medio selectivo de agar-látex, se aislaron e identificaron dos microorganismos, *Acinetobacter lwoffii* y *Paeniglutamicibacter quisquiliarum* que posteriormente fueron cultivados con las diferentes mezclas de caucho. Luego de cuatro semanas de cultivos, se analizaron todas las mezclas de caucho y los respectivos sobrenadantes. Ambas cepas presentaron crecimiento en todas las mezclas de caucho utilizadas. Los análisis SEM y ATR- FTIR revelaron cambios en la estructura de los compuestos, mostrando alteraciones en los enlaces C-S, sugiriendo potencial biodesulfurizador para ambas cepas. GC-MS identificó la presencia de un compuesto volátil (diciclohexilamina), un potencial producto de la degradación de MBTS. A partir del análisis proteómico-bioinformático, se descartó la presencia de las oxigenasas del caucho reportadas y se logró identificar una enzima con potencial biodesulfurizador presente en ambas cepas, la Thioredoxin-disulfide reductase (TrxB). Por primera vez, se reporta el potencial de ambas cepas en el contexto de la degradación de caucho, sentando las bases para futuros estudios que busquen evaluar el potencial de biodegradación de estos microorganismos o bien caracterizar a las enzimas. Este estudio destaca el uso de herramientas bioinformáticas para la obtención de resultados que complementen aquellos obtenidos con análisis *in vivo* y además, contribuye al desarrollo de tecnologías más sostenibles para la gestión de neumáticos fuera de uso.

## Identificación de bacterias con capacidades para la fijación de nitrógeno o la solubilización de fosfato provenientes de humedales.

Sofía Apablaza Bustamante<sup>1,2,4</sup>, Gabriel Gálvez Jiménez<sup>2,3</sup>, Mauricio Latorre Mora<sup>2,3,4</sup>.

<sup>1</sup> *Universidad de Chile, Facultad de Ciencias Químicas y Farmacéuticas, Dr. Carlos Lorca Tobar 964, Santiago, Chile.*

<sup>2</sup> *Universidad de O'Higgins, Laboratorio de Bioingeniería, Instituto de Ciencias de la Ingeniería, Libertador Bernardo O'Higgins 611, Rancagua, Chile.*

<sup>3</sup> *Universidad de O'Higgins, SYSTEMIX, Libertador Bernardo O'Higgins 611, Rancagua, Chile.*

<sup>4</sup> *Universidad de O'Higgins, BioSav, Ruta I-90 S/N, San Fernando, Chile.*

[sofia.apablaza@ug.uchile.cl](mailto:sofia.apablaza@ug.uchile.cl)

Los humedales corresponden a zonas de transición entre los ambientes terrestres y acuáticos. Presentan numerosas funciones ecológicas y son fundamentales para una variedad de procesos, tales como la purificación de las fuentes de agua, control de la liberación de gases de efecto invernadero, mantención del balance ecológico, entre otros. Asimismo, son ecosistemas altamente productivos por sus ciclos biogeoquímicos, entre los que destacan los ciclos del nitrógeno y el fósforo, los cuales abarcan procesos como la fijación de nitrógeno y la solubilización de fosfato. Las bacterias fijadoras de nitrógeno y solubilizadoras de fosfato tienen un rol clave, con potencial biotecnológico en agricultura, minería y biorremediación, ofreciendo soluciones sostenibles para el manejo de nutrientes y recuperación ambiental. Pese a su importancia, en Chile los estudios sobre la microbiología de humedales junto con su potencial biotecnológico son escasos.

En este contexto, este trabajo tiene como objetivo principal identificar bacterias con capacidad de fijación de nitrógeno o solubilización de fosfato provenientes de los humedales Las Juntas, San José y Río Tinguiririca, ubicados en la Región de O'Higgins. Primero, se analizó la diversidad bacteriana en humedales mediante secuenciación 16S rRNA, evaluando diversidad alfa y beta con los índices ecológicos correspondientes. En paralelo, se analizó la química del suelo. Luego, se diseñaron diferentes medios de cultivo con la finalidad de aislar la mayor cantidad de bacterias, construyendo una colección bacteriana, la cual será sometida a ensayos fenotípicos y genotípicos con tal de evaluar las capacidades de interés. Los resultados de los análisis de diversidad alfa y beta revelaron que en los 3 humedales existe una alta diversidad bacteriana, con distribución uniforme de especies. Además, la comunidad bacteriana entre los humedales de estudio es diferente. Con respecto a los aislados bacterianos mediante medios nutritivos, se logró generar una colección de 158 bacterias en total provenientes de los 3 humedales. Cada uno de los aislados fueron sometidos a los ensayos fenotípicos correspondientes, encontrándose 68 bacterias capaces de fijar nitrógeno, 13 que pueden solubilizar fosfato y 27 con ambas capacidades. Las bacterias con estas capacidades estarán sujetas a la secuenciación 16S rRNA para eliminar redundancia con un umbral de identidad del 99%. Luego, se llevarán a cabo los análisis genotípicos con la finalidad de ratificar la presencia de los genes involucrados en la fijación de nitrógeno y solubilización de fosfato. Es imperante señalar nuevamente que existen escasos estudios a nivel nacional con este enfoque, lo cual entrega una oportunidad para la búsqueda de soluciones sostenibles en estos ecosistemas.

Financiamiento: ANILLO ANID ACT210004; CMM ACE210010; MiCRG ICN2021\_044; Fondo Basal FB210005; FONDECYT 1230194; BASAL UOH-BioSav.



## RHEOLOGICAL PROPERTIES OF FOOD-GRADE BIGESL PREPARED WITH DIFFERENT NATURAL WAXES

Catalán, K.<sup>1</sup>, Millao, S.<sup>1</sup>, Contardo, I.<sup>2,3</sup>, Rubilar, M.<sup>1</sup>, Quilaqueo, M.<sup>1</sup>

<sup>1</sup>*Department of Chemical Engineering, Faculty of Engineering and Science, Universidad de La Frontera, Temuco, Chile*

<sup>2</sup>*Biopolymer Research & Engineering Laboratory (BiopREL), School of Nutrition and Dietetics, Faculty of Medicine, Universidad de los Andes, Chile. Monseñor Álvaro del Portillo 12.455, Las Condes, Santiago, 7620086, Chile.*

<sup>3</sup>*Centro de Investigación e Innovación Biomédica (CIIB), Universidad de los Andes, Chile. Monseñor Álvaro del Portillo 12.455, Las Condes, Santiago, 7620086, Chile*

[k.catalan02@ufromail.cl](mailto:k.catalan02@ufromail.cl)

Bigels are hybrid systems formed by an aqueous gel phase (hydrogel) and a lipid gel phase (oleogel). They offer the advantage of maintaining characteristics of both phases, including semisolid texture, thermodynamic stability, and controlled delivery properties. Gel-based food systems have emerged as materials with high potential for application in food ingredients as fat substitutes and as bioactive delivery systems. The properties of bigels are influenced by their composition and preparation factors. The purpose of this study was to evaluate the impact of oleogelator type and concentration on the physical and chemical properties of food-grade bigels. Bigels were prepared using hydrogel with gellan gum (1% w/w) and oleogel formulated with linseed oil and three types of wax (beeswax (BW), candelilla (CLW), and carnauba wax (CRW)) at three concentrations (6, 8, and 10% w/w). The oleogel and the hydrogel were mixed at a ratio of 90/10 oleogel/hydrogel w/w. FTIR, rheology, and microstructure were determined. FTIR spectra confirmed bigels presented characteristic C-H stretching of unsaturated hydrocarbons from LO. Asymmetric and symmetric CH stretching of the alkane and hydrocarbon groups in the oil and wax were observed, revealing the abundance of triglycerides. Comparing the three waxes peaks showed statistically significant differences in their intensities, mainly due to differences related to hydrocarbon composition and to ester groups. The intensity of ester-related peaks was higher for CRW, followed by BW, and lower for CLW. The mixture of the oleogels with a hydrogel resulted in the formation of an emulsion. CLW Bigels exhibited hydrogel droplets of smaller equivalent diameter (D50 2.9 – 3.3  $\mu\text{m}$ ). BW Bigels presented an intermediate equivalent diameter (D50 4.6 - 6.0  $\mu\text{m}$ ). CRW Bigels presented a higher equivalent diameter, especially at lower concentration (D50 3.4 – 7.7  $\mu\text{m}$ ). Rheological analysis showed that bigel viscosity and moduli depended on wax type. CLW bigel presented the highest viscosity, exceeding 100 Pa, followed by BW bigels, which began around 100 Pa, and CRW, which began at 100 Pa or below this value. In the linear viscosity region, all bigels showed a solid-like behavior ( $G' > G''$ ), and no crossover points; the analyses showed a slight positive frequency dependence of moduli. In the temperature sweep test, all samples presented a drop in moduli with a crossover between  $G'$  and  $G''$ , indicating thermal destabilization at different temperatures. For CLW bigels, the pronounced moduli drop started before 50°C, similar to BW bigels. However, for CRW bigels, thermal stability was found until 70°C. The results showed the importance of selecting the oleogel and its concentration in order to tailor the appropriate bigels matrix for the desired application. The wax composition directly affects the formation of crystals during oleogelation, influencing the molecular organization and, consequently, the thermal and mechanical properties of wax oleogels.



## Estudio de la Degradación de Ibuprofeno y Diclofenaco en un Reactor Batch Secuencial de Lecho Móvil Nitrificante

J. Quezada-Cáceres<sup>1\*</sup>, L. Hernandez<sup>2</sup>, J. Leiva-Gonzalez<sup>3</sup>, C. Huiliñir<sup>1</sup>

*1 Green Technologies Research Group, Facultad de Ingeniería y Ciencias Aplicadas, Universidad de los Andes, Chile.*

*2 Departamento de Ingeniería Química y Bioprocesos, Universidad de Santiago de Chile, Chile.*

*3 Facultad de Ingeniería, Ciencia y Tecnología, Universidad Bernardo O'Higgins, Chile.*

*\*jequezada1@miuandes.cl*

Producto del aumento en el consumo de fármacos, la presencia de contaminantes emergentes como Ibuprofeno y Diclofenaco en las aguas residuales se ha hecho más importante debido a la falta de tratamientos para remover estos compuestos. La biodegradación de los contaminantes emergentes se destaca entre los métodos de remoción por sus bajos costos y su potencial de destrucción total de ellos, siendo favorecida por las altas actividades oxidantes que se alcanzan durante el tratamiento biológico de aguas residuales mediante nitrificación. Para estudiar la degradación de Ibuprofeno y Diclofenaco en un reactor batch secuencial de lecho móvil (RBSLM) y un reactor batch secuencial (RBS) nitrificante, se utilizaron dos reactores de 2[L]. Se utilizó, para la primera carga nitrogenada, un residuo líquido sintético de 400 [mgTAN/L h], para luego aumentar la concentración a 460 [mgTAN/L h]. Los reactores se mantuvieron en una temperatura entre 23 y 27[°C], con aireación de 0,25 [vvm] y agitación mecánica a 400 [RPM]. Se agregaron 100 soportes industriales del tipo AnoxKaldnes K1 al RBSLM al inicio de los experimentos. Ambos contaminantes, Ibuprofeno y Diclofenaco, son añadidos a concentración de 40 [ug/L] de cada uno al inicio de cada ciclo batch. Al aumentar la carga nitrogenada, la velocidad específica de remoción de TAN no se vio afectada de manera significativa para ambos reactores (de -9,54 [mg/gSSV h] a -8,45 [mg/gSSV h] para el RBSLM, y de -9,39 [mg/gSSV h] a -7,63 [mg/gSSV h] para RBS), pero sí ocurrió un cambio relevante en la velocidad de formación de nitratos, la cual está ligada a la acumulación de nitritos los reactores, evidenciando una mayor acumulación en el reactor RBSLM, y a su vez, evidenciando una menor velocidad específica de formación de nitratos que el RBS (de 10,96 [mg/gSSV h] a 3,74 [mg/gSSV h] para el RBSLM, y de 4,8 [mg/gSSV h] a 7,82 [mg/gSSV h] para RBS). El aumento de biomasa por el aumento de la carga nitrogenada pudo influir en el cambio de las poblaciones microbianas en ambos reactores, ocurriendo un cambio en la mezcla entre bacterias amonio oxidasas (AOB) y las nitrito oxidasas (NOB). Se ha descrito en literatura (Fernandez-Fontaina et al., 2016) la relación entre la degradación de ibuprofeno y la transformación de nitritos a nitratos por las bacterias NOB, de forma que la acumulación de nitritos se encuentra estrechamente relacionada con la disminución de la constante de biodegradación de Ibuprofeno para el reactor RBSLM (de 0,7138 [L/gSSV día] a 0,6526 [L/gSSV día] para el RBSLM, y de 0,3557 [L/gSSV día] a 0,3974 [L/gSSV día] para RBS). Se evidencia también una disminución en la constante de velocidad de biodegradación de Diclofenaco para el SBBR, y un aumento para el SBR (de 0,039 [L/gSSV día] a 0,0155 [L/gSSV día] para el RBSLM, y de 0,0535 [L/gSSV día] a 0,0595 [L/gSSV día] para RBS). El aumento de velocidad de carga nitrogenada no permitió obtener constantes de velocidad de biodegradación de contaminantes emergentes, ni velocidades específicas favorecedoras para el reactor RBSLM con soportes industriales, pero permitió evidenciar en su comportamiento que la acumulación de nitritos influye en la degradación de Ibuprofeno, identificando que las bacterias NOB intervienen en esa degradación además de las bacterias AOB con la enzima AMO según lo visto en literatura.

## Modelación matemática posibilita superar las limitaciones de biodegradación de diésel a 4 °C en reactor *Airlift* continuo

Fabián Rodríguez-Oyarzo<sup>1</sup>, Matías Orellana-Sáez<sup>1</sup>, Silvana Guerra-Arredondo<sup>1</sup>, Andrea Carvajal<sup>2</sup>, Ignacio Poblete-Castro<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Laboratorio de Ingeniería en Biosistemas, Departamento de Ingeniería Química y Bioprocesos, Universidad de Santiago de Chile, Av. Libertador Bernardo O'Higgins 3363, Estación Central, Chile

<sup>2</sup>Departamento de Ingeniería Química y Ambiental, Universidad Técnica Federico Santa María, Av. Vicuña Mackenna 3939, San Joaquín, Chile

*fabian.rodriguez.o@usach.cl*

La contaminación por hidrocarburos derivados del petróleo constituye un desafío ambiental significativo, debido a su complejidad química, baja solubilidad y ecotoxicidad. Este problema se ve particularmente exacerbado en ecosistemas fríos, donde las bajas temperaturas limitan la degradación natural y la aplicación de tecnologías de remediación. En este contexto, la biorremediación de diésel mediante microorganismos provenientes de zonas extremas como la Antártica representa una estrategia prometedora para mitigar los impactos ambientales asociados a este contaminante. Sin embargo, hasta la fecha los estudios sobre biodegradación de hidrocarburos alifáticos y aromáticos policíclicos (HAPs) a bajas temperaturas (4 °C) son limitados.

Para abordar este problema, se acondicionó a 4 °C el consorcio LR, aislado de la rizosfera de *Deschampsia antártica* de la Isla Livingston, usando diésel como única fuente de carbono, dando lugar al consorcio LR-4. Este exhibió una alta capacidad de degradación de hidrocarburos, respaldando su potencial aplicación en procesos de biorremediación bajo condiciones psicrófilas. En este estudio se evaluó la capacidad degradativa de diésel por parte del consorcio LR-4 mediante ensayos cinéticos a distintas concentraciones de sustrato, en conjunto con el desarrollo, modelación y optimización del primer sistema continuo de biorremediación de diésel a 4 °C reportado en la literatura.

Los resultados cinéticos experimentales se ajustaron al modelo de inhibición por sustrato de Andrews, obteniéndose un  $R^2 = 0.96$ , con parámetros cinéticos  $\mu_{\max} = 2.71 \text{ d}^{-1}$ ,  $K_S = 58.72 \text{ g} \cdot \text{L}^{-1}$  y  $K_I = 0.57 \text{ g} \cdot \text{L}^{-1}$ . Con estos valores se modeló una superficie de respuesta teórica que permitió estimar condiciones óptimas de operación en un biorreactor continuo con recirculación de biomasa, el cual fue parametrizado en función del factor másico de recirculado de biomasa ( $c$ ) y factor volumétrico de recirculación ( $\alpha$ ), prediciendo una degradación óptima del diésel alimentado de al menos un 95 % utilizando  $c=2.5$  y  $\alpha=0.5$ . En la operación del reactor *Airlift* durante 149 días se obtuvieron dos condiciones estables en las que se alimentó diésel a una tasa de  $0.97 \text{ g} \cdot \text{L}^{-1} \cdot \text{d}^{-1}$ ; la primera, con una tasa de dilución de 0.068 1/d, logrando una degradación del 66 % a una tasa de  $0.64 \text{ g} \cdot \text{L}^{-1} \cdot \text{d}^{-1}$ , en la que predominaron los géneros bacterianos *Acinetobacter*, *Pseudomonas* y *Arthrobacter*. La segunda condición, correspondiente al modelamiento de la superficie de respuesta, se operó a una tasa de dilución de 0.103 d<sup>-1</sup>, alcanzando un 95 % de degradación a una tasa de  $0.94 \text{ g} \cdot \text{L}^{-1} \cdot \text{d}^{-1}$ , significativamente superior al 66% obtenido en la primera, observándose además el aumento del género *Acinetobacter* por sobre *Pseudomonas*, junto con la aparición de *Stenotrophomonas*. En conclusión, los resultados del estudio cinético y la operación del primer sistema continuo reportado a 4 °C usando diésel, permitieron modelar y optimizar satisfactoriamente la dinámica de degradación, sustentando el potencial biotecnológico del consorcio LR-4 y su aplicabilidad en sistemas continuos de biorremediación de diésel bajo temperatura psicrófila.

## Use of ethanol-water mixtures as suspension medium and cosolvent for the extraction of polyphenols from calafate with supercritical CO<sub>2</sub>

Laura María Cuellar,<sup>1,3,\*</sup> Cristián Moreno,<sup>2</sup> José Manuel del Valle,<sup>1</sup> Zamantha Escobedo,<sup>3</sup> Gonzalo Nuñez,<sup>2</sup> Esteban Narváez<sup>4</sup>

<sup>1</sup>*Departamento de Ingeniería Química y Bioprocesos, Pontificia Universidad Católica de Chile, Santiago, 7810000, Chile.*

<sup>2</sup>*Department of Chemical, Biotechnological and Environmental Processes, Universidad Técnica Federico Santa María, Santiago, 7810000, Chile.*

<sup>3</sup>*Escuela de Ingeniería y Ciencias, Tecnológico de Monterrey, Monterrey, 64700, México.*

<sup>4</sup>*Department of Chemistry and Pharmacy, Pontificia Universidad Católica de Chile, Santiago 7810000, Chile.*

\* Corresponding author: [lmcuellar@uc.cl](mailto:lmcuellar@uc.cl)

Supercritical carbon dioxide (SC-CO<sub>2</sub>) extraction is an environmentally friendly route to recover bioactive compounds, although its low polarity limits the recovery of high molecular mass polyphenols present in calafate (*Berberis microphylla* G. Forst.). This study evaluates ethanol-water mixtures as co-solvent and suspension medium, operating in the two-phase regime-a CO<sub>2</sub>-rich supercritical phase in equilibrium with an ethanol-water-rich liquid phase-to observe phase behavior and phenolic partitioning.

Experiments were conducted at 40 and 70 °C, 20 and 30 MPa, and with liquid phase water contents of 35 %, 55 %, and 85 % on a CO<sub>2</sub>-free basis. An intermediate water fraction (35-55 %) increased the solubility of polyphenols and promoted partitioning towards the CO<sub>2</sub>-rich phase, yielding up to 8 mg GAE g<sup>-1</sup> of dry substrate (GAE: gallic acid equivalents). In contrast, 85 % water drastically reduced total solids yields, consistent with a larger miscibility gap, lower CO<sub>2</sub> solubility in the aqueous phase and lower co-solvent carryover.

These results demonstrate that solvent composition governs phase behavior and mass transfer in SC-CO<sub>2</sub> processing of caulk suspensions. Fundamentally, operating in a two-phase region, the liquid-phase water content along with the feed mode drive partitioning and-when judiciously adjusted-enable enhanced polyphenol recovery and selectivity, which could support sustainable applications in the food and pharmaceutical sectors.

## Estructuración de aceite vegetal mediante mezclas de ceras: una estrategia para el desarrollo de matrices grasas más saludables

M. Martínez<sup>1</sup>, N. Cid, K<sup>3</sup>. Catalán<sup>1</sup>, E. Morales<sup>1,2</sup>, M. Quilaqueo<sup>1,2</sup>, S. Millao<sup>1,2</sup>,  
M. Rubilar<sup>1,2</sup>.

<sup>1</sup>Departamento de Ingeniería Química, Universidad de La Frontera, Temuco, Chile

<sup>2</sup>Scientific and Technological Bioresource Nucleus, BIOREN, Universidad de La Frontera, Temuco, Chile.

<sup>3</sup>Departamento de Ingeniería Industrial y de Sistemas, Universidad de La Frontera, Temuco, Chile

\* e-mail: m.martinez26@ufromail.cl

Los aceites vegetales estructurados con ceras naturales han ganado interés por sus propiedades de gelificación ajustables y su comportamiento versátil en cristalización. En este estudio se formularon oleogeles a partir de mezclas de ceras y aceite vegetal para evaluar cómo las proporciones de ceras afectan la firmeza, la capacidad de retención de aceite (CRA) y la microestructura de los oleogeles.

Los oleogeles se formularon con 10% de estructurante, evaluando tres proporciones de mezcla (2,5:7,5; 5:5; 7,5:2,5). La mezcla se realizó a 70 °C durante 30 min con agitación a 300 rpm. La firmeza de los oleogeles se evaluó mediante una prueba de penetración utilizando un analizador de textura TA.XT PlusC. La CRA se determinó mediante un método de centrifugación a 7000 rpm durante 40 minutos. Además, la microestructura se analizó mediante microscopía óptica.

Los valores de firmeza para cada proporción de mezcla fueron 497,25, 566,80 y 333,52 g respectivamente, mientras que la capacidad de retención de aceite fue de 99,5, 99,3 y 98,4%, respectivamente. La mayor firmeza se obtuvo en la proporción 5:5, lo que sugiere un efecto sinérgico entre las dos ceras utilizadas, generando una estructura más compacta y resistente a la deformación cuando se mezclan en esta proporción. Además, el alto CRA (99,3%) sugiere que la estructura compacta favorece la formación de una red tridimensional más densa y estable. Esta red no solo resiste mejor la deformación mecánica, sino que también resulta más eficiente para inmovilizar la fase oleosa dentro de su estructura. A su vez, presenta una microestructura más organizada y continua, con cristales de menor tamaño y mayor uniformidad, lo que contribuye a mejorar su estabilidad durante el almacenamiento y a reforzar su resistencia mecánica. Cabe destacar que todas las muestras presentan una red bien definida que permite la retención del aceite y la formación de una fase sólida estable, lo cual es característico de sistemas con alta capacidad de gelificación y buenas propiedades mecánicas. Este comportamiento demuestra que se ha logrado con éxito la estructuración del aceite en todas las proporciones de mezcla estudiadas, ofreciendo una alternativa tecnológica viable para la reformulación de productos alimentarios con menor contenido de grasas saturadas, sin comprometer su funcionalidad ni su estabilidad.

**Agradecimientos:** Investigación financiada (parcialmente) por la Dirección de Investigación, Universidad de La Frontera, Apoyo PP25-0025 y por el Proyecto FONDEF IDEA N° ID24110245.

**Observación:** Se han omitido algunos datos por estar en proceso de protección.

## **Congelación al vacío como estrategia tecnológica para mejorar la liofilización de alimentos**

L. Segura-Ponce, P. Hidalgo, C. Troncoso, M. Guzmán

*Departamento de Ingeniería de Alimentos, Universidad del Bío-Bío, Avda. Andrés Bello 720, Chillán, Chile.*

*[lsegura@ubiobio.cl](mailto:lsegura@ubiobio.cl)*

La liofilización es una de las técnicas eficientes para extender la vida útil y preservar la calidad de los alimentos, siendo la congelación determinante para el resultado del proceso. La congelación al vacío permite un enfriamiento más rápido y la formación de microestructuras que favorecen la sublimación del agua. En este estudio se comparó la congelación al vacío con la congelación convencional en manzana *Granny Smith* y queso fresco, aplicando un diseño factorial  $2^2$  para evaluar el efecto del tipo de congelación y el espesor de la muestra. La congelación convencional se realizó en un abatidor de temperatura, mientras que la congelación al vacío se efectuó en el liofilizador CHRIST BETA 1-8 LD Plus, equipo utilizado también para la posterior liofilización. Se analizaron curvas de congelación, tiempo de proceso, difusividad efectiva, pérdida por evaporación, humedad, actividad de agua, rehidratación, porosidad, exudación, perfil de textura (TPA) y costos operacionales. Los resultados mostraron que, aunque el punto de congelación de ambos alimentos fue similar en los métodos, la congelación al vacío permitió alcanzar  $-18\text{ }^{\circ}\text{C}$  en menor tiempo, confirmando una mayor eficiencia en la etapa de enfriamiento y favoreciendo una liofilización más rápida. Este comportamiento se asoció a la formación de cristales de hielo pequeños y uniformes, que facilitaron la sublimación y mejoraron la rehidratación, especialmente en manzana. Las muestras congeladas al vacío presentaron mayor porosidad y menor exudación tras el descongelado, lo que reflejó una mayor estabilidad estructural. Sin embargo, este método también se vinculó a mayores pérdidas por evaporación, fenómeno que, si bien no comprometió la calidad final, requiere control para evitar disminuciones en el rendimiento. En queso fresco, la influencia del método dependió del espesor: la congelación al vacío redujo tiempos y exudación en muestras delgadas, mientras que en muestras más gruesas la congelación convencional mostró mayor difusividad efectiva. El análisis de textura no evidenció diferencias relevantes atribuibles al tipo de congelación, sugiriendo que parámetros como dureza y cohesividad permanecen estables bajo ambas condiciones. A nivel operativo, la combinación de congelación al vacío y menor espesor se identificó como la alternativa más ventajosa, al reducir significativamente los tiempos de liofilización y, en consecuencia, el consumo energético. En conjunto, los hallazgos respaldan la congelación al vacío como una alternativa tecnológica capaz de mejorar la eficiencia de la liofilización y potenciar la calidad funcional de los productos, en particular la capacidad de rehidratación y la reducción de los tiempos de operación.



## Expresión de la enzima HMG-CoA en la producción de escualeno por *Thraustochytrium* sp.: efecto de la terbinafina y polifenoles de bagazo de cebada

P. Paredes<sup>1</sup>, J. Iturra<sup>2</sup>, C. Shene<sup>2</sup>

<sup>1</sup>Programa de Doctorado en Ciencia de la Ingeniería mención Bioprocesos, Universidad de La Frontera, Temuco, Chile

<sup>2</sup>Departamento de Ingeniería Química, Centro de Biotecnología de los Alimentos y Bioseparaciones, BIOREN, y Centro de Biotecnología y Bioingeniería, Universidad de La Frontera, Temuco, Chile  
[paris.paredes@ufrontera.cl](mailto:paris.paredes@ufrontera.cl)

El escualeno (SQ), es un hidrocarburo con aplicaciones en la industria cosmética, farmacéutica y nutracéutica dada sus propiedades emolientes y antioxidantes. El SQ se obtiene desde fuentes vegetales, animales y microbiológicas. Los traustoquitridios son conocidos por su capacidad de acumular altos niveles de lípidos (30-50% p/p); algunas cepas acumulan SQ. La terbinafina, compuesto antifúngico, y los polifenoles, compuestos naturales obtenidos de plantas, tienen un efecto inhibitorio sobre la escualeno epoxidasa (SQE) enzima que oxida el escualeno en otros esteroides, lo que conduce a la acumulación de SQ en algunos microorganismos. El objetivo de este trabajo fue evaluar el efecto de terbinafina y polifenoles en la producción de SQ por *Thraustochytrium* sp. El nivel de expresión del gen que codifica por la HMG-CoA, enzima clave en la ruta de síntesis de los precursores del colesterol fue determinado.

Los ensayos se realizaron en matraces Erlenmeyer de 250 mL con 100 mL de medio estéril que contenía glucosa (20 g/L), extracto de levadura (6 g/L) y glutamato monosódico (0,6 g/L) en agua de mar artificial al 50% v/v. Se realizaron tres curvas de crecimiento: el control (C1), cultivo suplementado con 45 mg/L de terbinafina (C2) y cultivo suplementado con 45 mg/L de polifenoles extraídos desde bagazo de cebada (C3). Cada 24 h se tomaron 2 matraces de cada curva para evaluar: concentración de biomasa, el contenido de lípidos y contenido de escualeno en la biomasa. Se utilizó la prueba de Tukey ( $\alpha=0,05$ ) para establecer la significancia de las diferencias. El nivel de expresión de algunos genes asociados a la producción de SQ fue determinado en PCR en tiempo real.

La concentración máxima de biomasa libre de lípidos fue  $4,5 \pm 0,3$  g/L (168 h) en las curvas, lo que sugiere que ni la terbinafina ni el extracto de polifenoles tienen un efecto en el crecimiento del microorganismo. Por otro lado, el porcentaje de lípidos se vio afectado negativamente, 1,3 veces respecto de C1 a las 144 h de cultivo ( $38,5 \pm 1,3$  %p/p) cuando el microorganismo creció suplementado con terbinafina. El contenido de SQ se incrementó en la biomasa cultivada con terbinafina y polifenoles (3,7 y 3,4 veces, respectivamente, respecto del control ( $12,8 \pm 1,1$  mg/g)). El incremento de SQ se asocia a la inhibición de la escualeno epoxidasa (SQE), que activa la vía del mevalonato y conduce a la acumulación de escualeno.

La suplementación del medio de cultivo desde el tercer día con terbinafina y extracto de polifenoles de bagazo de cebada tuvieron un efecto positivo sobre el contenido de SQ en la biomasa de *Thraustochytrium* sp.



## Inactivación de *Escherichia coli* y *Listeria innocua* y modificación superficial de manzanas de la variedad *Granny Smith* mediante la aplicación de plasma medio activado (PMA).

Segura-Ponce, L.; Cubillos, C.; Reyes, J; Guzmán, M.

Departamento de Ingeniería de Alimentos, Universidad del Bío-Bío, Avda. Andrés Bello 720, Chillán, Chile.

*lsegura@ubiobio.cl*

El plasma frío es una tecnología no térmica eficaz para inactivar microorganismos sin afectar la calidad de los alimentos. Su versión activada con agua (plasma medio activado, PMA) aumenta la generación de radicales libres, mejorando la eficiencia del proceso. En este estudio se evaluó la efectividad del plasma medio activado (PMA) y se comparó con el plasma frío sin la adición de agua para inactivar *Escherichia coli* ATCC 11775 y *Listeria innocua* ATCC 33090 inoculadas en piel de manzanas de la variedad *Granny Smith*, así como su efecto sobre la modificación su ángulo de contacto dinámico. Se utilizó un equipo generador de Plasma (Expanded Plasma Cleaner PDC-001/002) equipado con un mezclador de gases (PlasmaFlo Gas Flow Mixer PDC-FMG/FMG-2). Los tratamientos para ambos tratamientos se realizaron con los gases puros y mezclas de ellos ( $O_2$ ,  $N_2$  y  $O_2+N_2$ ). A su vez los tratamientos con PMA se realizaron combinando gases como el nitrógeno y oxígeno más agua ( $N_2+H_2O$ ,  $O_2+H_2O$  y  $N_2+O_2+H_2O$ ), con un flujo de gases de 30 ml/min y tiempos de aplicación del PMA de 3 a 20 min y a una potencia de 29,6 W. La hidrofobicidad superficial se evaluó, midiendo el ángulo de contacto dinámico a través de un tensiómetro (KSV Sigma 701). Los datos obtenidos sobre la supervivencia bacteriana se ajustaron a modelos no lineales de activación con el propósito de describir las cinéticas de inactivación microbiana. Los resultados revelaron reducciones significativas en los recuentos de *Escherichia coli* (6.7log) y *Listeria innocua* (6.6 log); además, se observó una disminución en la hidrofobicidad superficial para las muestras tratadas con PMA. Este comportamiento sugiere que el PMA no sólo es efectivo para la inactivación microbiana, sino que también podría dificultar la posterior adherencia de microorganismos a la superficie

## **Cinética de inactivación térmica de proteasas en la hidrólisis enzimática de proteínas de esquelón de salmón: Ajuste modelo bifásico**

S. Valdivia<sup>1</sup>, T. Solís<sup>1</sup>, P. Valencia<sup>2</sup>

<sup>1</sup>*Programa de Doctorado en Biotecnología, Universidad Técnica Federico Santa María/ Pontificia Universidad Católica de Valparaíso, Valparaíso 2390123, Chile*

<sup>2</sup>*Escuela de Alimentos, Facultad de Ciencias Agronómicas y de los Alimentos, Pontificia Universidad Católica de Valparaíso, Valparaíso 2390100, Chile*

*valdiviamsc5@gmail.com*

La inactivación térmica de las proteasas es un factor importante en el diseño y optimización de procesos biotecnológicos, dado que la estabilidad de estas puede presentar diferencias debido a su estructura, origen e interacción con el sustrato. El objetivo del presente estudio fue evaluar la cinética de la inactivación térmica de distintas proteasas, a diferentes temperaturas y concentración de esquelón en la mezcla de reacción. Se cuantificó la actividad residual ( $A/A_0$ ) a través de un ensayo con azocaseína durante 3 horas de tres proteasas comerciales, Alcalase 2.5L, Flavourzyme 1000L y Neutrase 5BG. Se trabajó con tres temperaturas (45, 55 y 65°C), variando la concentración de esquelón en la mezcla de reacción (0.01 g/g – 0.1 g/g – 0.5 g/g) y con una concentración de enzima de 5 UA por kg de mezcla de reacción. Adicionalmente se analizó la estabilidad en condición no reactiva (sin esquelón) durante 2 horas. El pH se controló en 6.5 durante toda la reacción. Se ajustó el modelo bifásico ( $\frac{A}{A_0} = f \cdot e^{-k_1 \cdot t} + (1 - f) \cdot e^{-k_2 \cdot t}$ ) a las curvas de actividad residual en el tiempo.

Se observa que la estabilidad térmica aumenta en presencia de una mayor concentración de esquelón, disminuye a una mayor temperatura y cada enzima tiene un comportamiento distinto, siendo Alcalase la que mantiene una mayor estabilidad. Se destaca que luego de una hora de reacción, Flavourzyme y Neutrase expuestas a 55 y 65°C, perdieron más de un 60% de su actividad inicial. Con respecto al ajuste el modelo bifásico se ajusta bien en casi todos los casos (31 de 36,  $R^2 > 0.87$ ), excepto en aquellos en donde la proteasa se mantuvo con una actividad residual mayor al 95%. En general se puede concluir que el tiempo de vida media ( $A/A_0 = 0,5$ ), aumenta cuando se tiene más esquelón en la mezcla de reacción. Con respecto a los valores del parámetro  $f$  del modelo bifásico, el cual indica la fracción de enzima que se inactiva más lentamente, se observa que a mayor concentración de esquelón el valor de este aumenta, por lo que se infiere que una mayor fracción de la proteasa se adsorbe en la superficie del esquelón lo cual evita la rápida inactivación. Se debe tener en cuenta que aun en condición no reactiva existe una porción de la proteasa que se inactiva de manera más rápida, lo cual podría deberse a la presencia de isoformas enzimáticas con distinta resistencia térmica. En conclusión, la estabilidad térmica se modula de manera positiva ante la presencia de sustrato y el modelo bifásico se ajusta correctamente a los datos entregándonos información sobre el posible comportamiento (adsorción) y composición de las proteasas utilizadas (isoformas). Actualmente hemos comenzado a analizar la adsorción, para complementar estos resultados. Con ese estudio se ratifica la importancia de caracterizar la estabilidad térmica en condiciones reactivas con diferentes concentraciones de sustrato.

## **Tecnologías emergentes para la producción de alimentos funcionales: impregnación y calentamiento óhmico en plátano enriquecido con jugo de arándano**

M. Guzmán<sup>1</sup>, S. Seraglio <sup>1</sup>, J. Moreno<sup>1</sup>

<sup>1</sup> *Department of Food Engineering, Universidad del Bío-Bío, P.O. Box 447, Chillán, Chile. PC 3800708. maguzma@egresados.ubiobio.cl*

Los alimentos vegetales listos para el consumo son cada vez más demandados como una estrategia para aumentar la ingesta de compuestos bioactivos con potencial beneficioso para la salud. Este estudio evaluó el potencial de la impregnación al vacío (VI) y de la impregnación al vacío asistida con calentamiento óhmico (VIOH) para enriquecer rodajas de plátano con compuestos fenólicos y mejorar su capacidad antioxidante, utilizando jugo de arándano como fuente de compuestos bioactivos. La VI se realizó a 50 mbar durante 5 min, seguida de 90 min a presión atmosférica a 50 °C. La VIOH se efectuó bajo las mismas condiciones de vacío, seguida de 90 min de calentamiento óhmico con un campo eléctrico de 7.8 V·cm<sup>-1</sup>. Ambos tratamientos aumentaron significativamente ( $p \leq 0.05$ ) el contenido de compuestos fenólicos totales (CFT) en las rodajas de plátano impregnadas frescas, siendo VIOH superior a VI (VIOH: 21.26 mg GAE·100g<sup>-1</sup> PS; VI: 23.17 mg GAE·100g<sup>-1</sup> PS) en comparación con el control fresco (7.57 mg GAE·100 g<sup>-1</sup> PS). También se observó un aumento significativo en compuestos individuales como epicatequina (7.17 ± 0.44 mg ·100 g<sup>-1</sup> PS en VI; 8.02 ± 0.49 mg·100 g<sup>-1</sup> PS en VIOH) y cianidina (10.23 ± 0.54 mg·100 g<sup>-1</sup> PS en VI; 11.38 ± 0.67 mg·100 g<sup>-1</sup> PS en VIOH). La incorporación de antocianinas provocó un oscurecimiento visible de las rodajas de plátano, intensificado tras el secado al aire a 50 °C. Tras el secado, el plátano VI deshidratado mostró la mayor capacidad antioxidante (DPPH: 570.15 ± 11.98 mg TE·100 g<sup>-1</sup> PS), siendo significativamente superior ( $p \leq 0.05$ ) a la muestra de plátano VIOH deshidratada (DPPH: 516.50 ± 7.57 mg TE·100 g<sup>-1</sup> PS) y al control deshidratado (DPPH: 399.41 ± 4.26 mg TE·100 g<sup>-1</sup> PS). Si bien el secado promovió la formación de productos de reacción de Maillard (PRM) y aumentó la actividad antioxidante, degradó parcialmente los compuestos fenólicos. Las rodajas de plátano tratadas con VIOH mostraron un balance más favorable entre la formación de PRM y la retención de compuestos fenólicos en comparación con aquellas tratadas por VI. Los resultados demuestran que VI y VIOH son tecnologías emergentes prometedoras para mejorar las propiedades funcionales del plátano deshidratado. Ambos métodos permitieron obtener un producto enriquecido en fenoles y con mayor potencial antioxidante que el plátano no impregnado. El proceso VIOH parece proporcionar una calidad general superior al optimizar la retención de compuestos bioactivos y las propiedades funcionales, respaldando su aplicación en el diseño de alimentos funcionales.

## Estudio del efecto del pretratamiento sobre las propiedades antimicrobianas de materiales nanocompuestos de alcohol polivinílico (PVOH)/ nanofibrillas de celulosa (CNFs)

V. Rivera<sup>1</sup>, F. Valdebenito<sup>1,2</sup>, C-P Quezada<sup>1</sup>, E Elgueta<sup>1,2</sup>

<sup>1</sup> Universidad Católica de la Santísima Concepción, Departamento de Química Ambiental, Facultad de Ciencias, Concepción, Chile.

<sup>2</sup> Universidad Católica de la Santísima Concepción, Centro de Energía, Concepción, Chile.

[vrivera@gciencias.ucsc.cl](mailto:vrivera@gciencias.ucsc.cl)

Con el tiempo, la generación de residuos agrícolas y la dependencia a los materiales plásticos derivados del petróleo han ido aumentando, lo que nos ha impulsado en la búsqueda de alternativas sostenibles. En este contexto donde la celulosa a partir de hoja de maíz se impone como un recurso renovable para el desarrollo de nanocompuestos con propiedades adicionales y funcionales que contribuyen a la economía circular y a cumplir con la Agenda 2030.

En esta investigación se estudió el efecto de los pretratamientos químicos y enzimáticos sobre las propiedades antimicrobianas de los nanocompositos de alcohol polivinílico (PVOH) y nanofibras de celulosa (CNFs) obtenidas a partir de hojas de maíz. El trabajo incluyó el acondicionamiento de las materias primas, el fraccionamiento de la biomasa de hojas de maíz para la obtención de una pulpa de celulosa y la aplicación de los pretratamientos químico y enzimático de las pulpas de celulosa. Las CNFs se obtuvieron mediante tratamiento mecánico utilizando un homogeneizador de alta presión bajo los 800 bar. Posteriormente, se fabricaron los nanocompositos PVOH/CNFs y películas de CNFs, que fueron evaluados según el estándar JIS Z 2801 frente a *Staphylococcus aureus* (Gram positiva) y *Escherichia coli* (Gram negativa), en triplicado.

Los resultados mostraron que el nanocomposito PVOH/CNFs TEMPO y las películas de nanocelulosa sin pretratamiento fueron efectivas frente a *S. aureus* (Gram positiva) alcanzando el nanocomposito un valor de 2,2 log<sub>10</sub> y las películas de nanocelulosa sin matriz de PVOH mostraron una reducción máxima de 6,7 log<sub>10</sub>. En el caso de *E. coli*, las películas de nanocelulosa sin matriz mostraron una reducción total del crecimiento bacteriano de 5,7 log<sub>10</sub>, mientras que el nanocomposito PVOH/CNFs TEMPO alcanzó valores próximos al umbral exigido (1,6 log<sub>10</sub>). Por lo tanto, si se incrementa el porcentaje de CNFs en el nanocomposito, podría alcanzar el valor requerido para considerarse eficaz.

En conclusión, la incorporación de nanofibras de celulosa a partir de hojas de maíz pretratadas confieren propiedades antimicrobianas al nanocomposito, demostrando su potencial como refuerzo para el desarrollo de materiales compuestos biodegradables y sustentables.

*Agradecimientos: Este trabajo se realizó en el marco del proyecto FONDEF ID25I10525, financiado por la Agencia Nacional de Investigación y Desarrollo (ANID), Chile.*

## Modelación matemática en estado no estacionario de la liofilización a vacío de manzana a través del método de diferencias finitas

D. Sánchez, L. Segura-Ponce, G. Badillo.

*Departamento de Ingeniería de Alimentos, Universidad del Bío-Bío, Avda. Andrés Bello 720, Chillán, Chile.*

*lsegura@ubiobio.cl*

La liofilización es un proceso de deshidratación que permite preservar compuestos termolábiles que podrían degradarse por métodos de secado convencionales. La modelación matemática resulta una herramienta esencial para predecir el comportamiento del proceso, reduciendo la necesidad de experimentos a escala industrial y por lo tanto los costos y tiempos asociados. El objetivo de este trabajo es desarrollar un modelo matemático que describa el proceso de liofilización en placas delgadas de alimentos. Para esto se desarrollaron dos modelos matemáticos, el primero llamado modelo 1 considera la transferencia de masa tanto en la superficie expuesta de las placas como en la base donde reposa el alimento. El segundo, llamado modelo 2, es similar al anterior, pero despreciando la transferencia de masa por la base. Adicionalmente, ambos modelos consideran un secado primario hasta una humedad residual de aproximadamente un 10% (B.H.) y un secado secundario hasta una humedad residual de un 6% (B.H.). El modelo considera las ecuaciones de transferencia de calor (Ley de Fourier) y masa (Ley de Fick) en estado no estacionario, esta última aplicada al gradiente de presión de vapor para secado primario y aplicada para el gradiente de contenido total de humedad en el secado secundario. Para validar los modelos se desarrollaron experimentos de liofilización en placas de manzana de la variedad *Granny Smith* con un espesor de 0.01 m. Las propiedades termofísicas de las manzanas se consideraron variables con la temperatura y fueron determinadas tanto en forma teórica como experimental. Los coeficientes de transferencia de calor y masa fueron obtenidos a través de literatura. Ambos modelos se resolvieron utilizando el método de diferencias finitas y las ecuaciones fueron discretizadas en esquema implícito y resueltas a través de MATLAB. Los dos modelos pudieron ajustarse bastante bien a los datos experimentales con coeficientes de ajuste ( $r^2$ ) superiores a 0.9 para el secado primario en ambos modelos y superiores a 0.95 para el secado secundario para ambos modelos. La difusividad efectiva para el secado primario osciló entre:  $2.5$  y  $11.8 \times 10^{-4} \text{ m}^2/\text{s}$ , y la difusividad efectiva del secado secundario para ambos modelos osciló entre  $2.7$  y  $11.1 \times 10^{-10} \text{ m}^2/\text{s}$ . Imágenes de los frentes de secado de las placas de manzana mostraron que el secado se realiza por ambas caras (superior e inferior) a pesar de que la cara inferior estuvo en contacto con la superficie de la bandeja. Este enfoque puede ser muy útil para el estudio de la liofilización en diferentes alimentos y condiciones de ambiente del proceso.

## Estrategias para la producción de xilanasa recombinante en *Pichia pastoris*

J. Báez<sup>1,2</sup>, C. González<sup>1,2</sup>, O. Salazar<sup>1,2</sup>, I. Martínez<sup>1,2</sup>

<sup>1</sup> Departamento de Ingeniería Química, Biotecnología y Materiales, Universidad de Chile.

<sup>2</sup> Centro de Biotecnología y Bioingeniería, Universidad de Chile.

Email: javiera.fezm@gmail.com

La levadura *Komagataella phaffii* (antes *Pichia pastoris*) es ampliamente utilizada como sistema de expresión recombinante por su capacidad de crecer a altas densidades en medios simples y metabolizar metanol, permitiendo la inducción mediante el promotor AOX. En este estudio, la cepa KM71 recombinante se empleó para producir la xilanasa GtXyn10A del hongo *Gloeophyllum trabeum*, enzima con interés comercial para la síntesis de xilooligosacáridos, compuestos con capacidad prebiótica.

El proceso de fermentación se desarrolló en cuatro fases: batch (crecimiento inicial), crecimiento (alimentación con glicerol), adaptación (glicerol-metanol) e inducción (metanol). Durante la fase de inducción se evaluó el efecto de la temperatura (20, 25 y 30 °C) sobre la producción de proteína recombinante y su actividad enzimática, determinadas mediante los ensayos colorimétricos de Bradford (proteína total) y DNS (actividad enzimática). La pureza de los sobrenadantes se analizó mediante SDS-PAGE y las concentraciones de sustrato mediante HPLC. Finalmente, se compararon dos modelos de alimentación durante la inducción: lineal y constante.

Los resultados indicaron que, aunque a 20 °C y 25 °C el metanol fue completamente consumido, la expresión de xilanasa fue significativamente mayor a 30 °C, alcanzando incrementos de 2.7 y 2.3 veces en comparación con las otras temperaturas. Sin embargo, a esta condición se observó acumulación de metanol hasta 15 g/L. Al modificar la estrategia de alimentación, la acumulación se redujo a 6 g/L, sin diferencias significativas en la producción de proteína de acuerdo con el t-test ( $p < 0.05$ ).

La inducción a 30 °C permitió la mayor producción de xilanasa. En esta condición, el uso de una ecuación de alimentación constante redujo en un 23% el consumo de metanol sin afectar la producción significativamente. Estos hallazgos ofrecen ventajas operacionales al disminuir tanto los requerimientos de enfriamiento como de sustrato, aspecto relevante para futuros procesos de escalamiento.



## Encapsulation of sunflower oil in Pea Protein Isolate-stabilized gel emulsion beads: effect of formulation pH on *in vitro* oil digestion

S. Díaz-Leiva<sup>1</sup>, J. Cumilaf<sup>2</sup>, M. Rubilar<sup>3</sup>

<sup>1</sup> Ingeniería Civil Química, Facultad de Ingeniería y Ciencias, Universidad de La Frontera, Temuco, Chile

<sup>2</sup> Doctorado en Ciencias de la Ingeniería mención Bioprocesos, Universidad de La Frontera, Temuco, Chile.

<sup>3</sup> Department of Chemical Engineering, Universidad de La Frontera, Temuco, Chile.

s.diaz07@ufromail.cl

**Introduction:** Sunflower Oil (SFO) is rich in polyunsaturated fatty acids, which provide important nutritional benefits, such as cardiovascular protection and anti-inflammatory effects. However, its high susceptibility to oxidation limits its direct use in food products, making encapsulation a promising strategy to improve stability and modulate their release during digestion. Hydrogel-based emulsion gel beads, stabilized with pea protein isolate (PPI), offer an interesting system, as PPI not only stabilizes the lipid phase but also forms a biocompatible system that protects lipids. Although formulation parameters such as alginate concentration and  $\text{CaCl}_2$  levels have been investigated, pH stands out as the least explored critical factor. By influencing the solubility and surface charge of proteins, pH modulates both their interfacial behavior and the gelling capacity of alginate, potentially resulting in weaker or stronger networks that determine the formation of cohesive gels. These pH-dependent effects directly impact the structural integrity of the beads and their ability to retain and protect lipids, positioning pH as the key parameter for the successful development of encapsulation systems. **Objective:** This study evaluated the effect of pH on PPI-stabilized O/W emulsion macrobeads, crosslinked by external gelation, on the lipolysis of sunflower oil. **Methodology:** For each pH condition (3, 5, and 7), Sodium Alginate (SA) (2% w/w) and PPI (2% w/w) solutions were prepared and mixed at a 1:1 ratio to constitute the wall material (WM). SFO was incorporated into this phase at a WM:SFO ratio of 80:20 (w/w) and emulsified by high-speed homogenization (10,000 rpm, 1 min). The pH of the resulting emulsion was adjusted using 1 M NaOH/HCl, followed by external gelation in a  $\text{CaCl}_2$  solution (180 mM) using a syringe with a needle, thus forming the beads. These were characterized in terms of roundness, water content, and oil content. The static *in vitro* digestion (INFOGEST) simulated the oral, gastric, and intestinal phases, and lipolysis was quantified by automatic titration with 0.1 M NaOH. **Results:** The pH of the formulation prior to ionic gelation influenced both the morphology of the beads and the digestibility of the lipids. At a pH of 3, the beads were larger (2.818 mm), less spherical (0.788) and contained less oil (22.72 g/g), but showed faster FFA release, reaching 99.26% digestibility. The beads at pH 5 were smaller, with intermediate sphericity (0.797) and 23.34 g/g of oil, but showed slower FFA release (87.21%), consistent with the formation of dense protein-alginate networks near the protein's isoelectric point. At pH 7, the beads were the most spherical (0.836), had the highest oil loading (24.48 g/g) and showed delayed but sustained release, achieving complete lipolysis. **Conclusion:** Formulation pH affected the structure and lipolysis of sunflower oil in PPI-stabilized O/W emulsion macrobeads crosslinked by external gelation. Beads prepared at pH 3 were less spherical and broke down more rapidly, resulting in higher lipid release, whereas beads at pH 5 and 7 maintained better integrity and exhibited slower, more controlled lipolysis. These findings demonstrate that formulation pH is a key factor in modulating bead stability and the release of encapsulated oil during digestion, highlighting its importance for designing protein-based delivery systems.

## Perfiles lipídicos y extracción de fosfolípidos en *Thraustochytrium* sp. RT2316-16

J. Iturra<sup>1</sup>, P. Paredes<sup>2</sup>, C. Shene<sup>2</sup>,

<sup>1</sup> Programa de Magíster en Ciencias de la Ingeniería mención Biotecnología, Universidad de La Frontera, Francisco Salazar 1145, Temuco, Chile

<sup>2</sup> Universidad de la Frontera, Centro de Biotecnología y Bioseparaciones de Alimentos BIOREN, Departamento de Ingeniería Química, Facultad de Ingeniería y Ciencias, Francisco Salazar 1145, Temuco, Chile.

[j.iturra04@ufromail.cl](mailto:j.iturra04@ufromail.cl)

El desarrollo de alimentos funcionales exige fuentes innovadoras de fosfolípidos, cuya funcionalidad depende directamente del perfil de ácidos grasos. Los fosfolípidos de soya y huevo, comúnmente utilizados en la industria, se caracterizan por un predominio de ácidos grasos saturados y monoinsaturados en fracciones como fosfatidilcolina (PC), fosfatidiletanolamina (PE) y fosfatidilinositol (PI), lo que limita su aporte de ácidos grasos poliinsaturados de cadena larga (AGPI-CL) y, en consecuencia, sus beneficios nutraceuticos. *Thraustochytrium* sp. RT2316-16 es un protista marino que produce triglicéridos que contienen AGPI-CL, especialmente ácido docosahexaenoico (DHA). Este ácido graso podría también distribuirse en distintos fosfolípidos. El DHA en fosfolípidos posee un mayor valor nutricional, mejor capacidad antioxidante y propiedades funcionales superiores para su aplicación en matrices alimentarias, además de la ventaja de producirse de manera sostenible en biorreactores.

Los lípidos totales en la biomasa de *Thraustochytrium* sp. RT2316-16 fueron extraídos con solventes orgánicos (método de Folch y hexano). Fracciones de lípidos neutros, glicolípidos y fosfolípidos, fueron separadas usando columnas de sílica. La pureza de la fracción de fosfolípidos se evaluó por cromatografía en capa fina y el contenido de fósforo mediante ensayo colorimétrico.

Los resultados mostraron que la fracción de fosfolípidos en los lípidos totales extraídos usando el método de Folch contiene un 6,4 % p/p de eicosapentaenoico y 24,1 % p/p de DHA. El contenido de fósforo en la fracción de fosfolípidos fue mayor en los lípidos extraídos con el método de Folch ( $31,4 \pm 1,2$  mg P/g lípidos totales) mientras que en la misma fracción de los lípidos totales extraídos con hexano el contenido fue de  $20,3 \pm 1,6$  mg P/g de lípidos totales. A nivel de fracciones lipídicas, los fosfolípidos representaron un  $12,6 \pm 0,5$  % de los lípidos totales extraídos con el método de Folch, mientras que en los lípidos extraídos con hexano esta fracción fue  $6,9 \pm 0,8$  %. Estos valores confirman una mayor recuperación de fosfolípidos desde la biomasa microbiana al usar el método de Folch.

*Thraustochytrium* sp. RT2316-16 es una fuente prometedora de fosfolípidos ricos en DHA y EPA que no se encuentran naturalmente en semillas oleaginosas. Los resultados contribuyen a definir las condiciones para la recuperación de estos lípidos que podrían ser usados en aplicaciones en alimentos funcionales y nutraceuticos.

## Hidrólisis enzimática de hemicelulosa de paja de trigo para la producción de xilooligosacáridos con efecto prebiótico

Catalina Rojas, Isabella Miranda, Javiera Báez, Irene Martínez, Oriana Salazar

*Departamento de Ingeniería Química, Biotecnología y Materiales, Universidad de Chile y Centro de Biotecnología y Bioingeniería (CeBiB), Universidad de Chile.  
email: catalina.rojas.fe@ug.uchile.cl*

La biomasa lignocelulósica (BLC) es el residuo orgánico más abundante a nivel mundial. El 20% de la BLC es hemicelulosa, la que a su vez está compuesta en un 70% de xilano. La degradación parcial de xilano produce xilooligosacáridos (XOS), un producto con efecto prebiótico sobre humanos y otros animales. Dada la abundancia de paja de trigo en Chile, su uso como sustrato para la producción de XOS constituye una opción muy interesante de explorar y una gran oportunidad para el aprovechamiento de estos residuos.

Una de las formas de obtener los XOS es mediante hidrólisis enzimática con endoxilasas que rompen enlaces  $\beta$  - 1,4 xilosídicos. Se ha descrito, además, que el uso de enzimas auxiliares, que retiran residuos laterales presentes en el xilano, puede mejorar la hidrólisis por endoxilasas, además de mejorar la actividad prebiótica de los XOS. En esa línea, el objetivo de este trabajo fue, en primer lugar, identificar condiciones de hidrólisis por la endoxilasa termoestable GtXyn10A, que maximicen el rendimiento de la producción de XOS desde xilano de paja de trigo. Por otro lado, se persiguió evaluar condiciones para eliminar ramificaciones de arabinosa presentes en el xilano de paja de trigo.

La endoxilasa GtXyn10A se produjo en forma recombinante en *Pichia pastoris*. La enzima se concentró desde el medio de cultivo y se utilizó directamente. En las reacciones de hidrólisis de hemicelulosa se evaluó la relación carga enzima-sustrato, tiempo de reacción, temperatura y pH. Los XOS producidos se cuantificaron mediante cromatografía en HPLC y se purificaron mediante ultrafiltración y nanofiltración. Para estudiar las condiciones que permitan obtener XOS libres de ramificaciones, los XOS obtenidos por hidrólisis con endoxilasa se combinaron con arabinofuranosidasa de *Aspergillus niger* y se estudiaron condiciones de carga enzimática y tiempo de reacción.

Bajo las mejores condiciones de hidrólisis se logró producir 480 mg XOS/g hemicelulosa, de los cuales un 50% corresponde a xilobiosa, un 35% a xilotriosa y un 15% a la suma de xilotetraosa, xilopentaosa y xilohexaosa. La adición de arabinofuranosidasa a la reacción de hidrólisis logró eliminar el 85% de las ramificaciones de arabinosa. En la etapa de purificación se logró recuperar más del 95% de los XOS producidos, eliminando carbohidratos de alto peso molecular y lignina contaminantes. En conclusión, se identificaron condiciones para maximizar la producción de XOS desde paja de trigo y para favorecer la producción de estos libres de ramificaciones de arabinosa. Los procesos de purificación generaron una mezcla de XOS con alto rendimiento y pureza, los que se espera evaluar a futuro respecto a su potencial prebiótico, tanto *in vitro* como *in vivo*.

### Agradecimientos

Se agradece el financiamiento a ANID a través del proyecto Fondef IDeA I+D N° AID24I10247 y al Centro de Biotecnología y Bioingeniería (CeBiB) PIA FB0001.

## Ensamble del genoma y reconstrucción de un modelo metabólico a escala genómica de *Rhodococcus opacus* DSM 43205, una bacteria oleaginosa y oxidante de hidrógeno.

Paz Torres-Praderio<sup>1</sup>, Blanca Araya<sup>1</sup>, Alberto Vergara-Fernandez<sup>1</sup>, Felipe Scott<sup>1</sup>

<sup>1</sup> Green Technologies Research Group, Facultad de Ingeniería y Ciencias Aplicadas, Universidad de los Andes.

[cptorres@miuandes.cl](mailto:cptorres@miuandes.cl)

Los triglicéridos (TAGs), utilizados, por ejemplo, como biocombustibles, son moléculas de gran interés industrial. Su producción actual, a partir de fuentes vegetales/animales, tiene impactos significativos al medio ambiente. La fermentación microbiana con azúcares es una alternativa, aunque su sostenibilidad depende del origen de esos azúcares. *Rhodococcus opacus* DSM 43205 es la única bacteria oleaginosa quimiolitotrofa conocida capaz de fijar CO<sub>2</sub> mediante Calvin-Benson-Bassham (CBB) y oxidar H<sub>2</sub>. Además de metabolizar otros sustratos como metanol y ácidos carboxílicos de cadena corta. Dado su potencial para producir TAGs desde fuentes de carbono de origen renovable, es fundamental entender su metabolismo oleaginoso y su versatilidad metabólica. En este trabajo se presenta el primer ensamblaje del genoma y un modelo metabólico a escala genómica (GEM) de *R. opacus* DSM 43205. El genoma se secuenció utilizando la tecnología PacBio HiFi y se ensambló con HiFiASM y Flye. La anotación se realizó utilizando los *pipelines* PGAP y RASTk, y el genoma anotado por PGAP se analizó con Pathway Tools. Con esta herramienta se construyó el *draft* del modelo metabólico. El cual se curó manualmente con MetaCyc, KEGG y LipidMaps. Además, el GEM se calibró utilizando datos experimentales de quimiostatos simples con ácido acético bajo condiciones de crecimiento balanceado. El genoma ensamblado presentó una estructura multipartita con una longitud total de 9,11 Mbp, compuesta por un cromosoma circular único y varios plásmidos. Las longitudes de los plásmidos principales (pHG201, pHG202 y pHG203) concuerdan con los valores experimentales reportados por Kalkus et al. (1990, DOI: 10.1099/00221287-136-6-1145), así como con la longitud de los fragmentos de restricción de pHG201. En pHG201 se identificaron los genes responsables de la quimiolitotrofia. El GEM calibrado se validó con la herramienta MEMOTE y obtuvo un puntaje total del 87 %, comparable al de otros modelos de alta calidad reportados. Además, se validó con los rendimientos de TAGs observados en condiciones heterotróficas (acetato) y autotróficas (CO<sub>2</sub>/H<sub>2</sub>) obteniéndose una diferencia absoluta de 0,002 y 0,080 gg<sup>-1</sup> respectivamente, entre los valores experimentales y los modelados.

La biosíntesis de TAGs es un proceso anabólico con una alta demanda de NADPH, debido principalmente a la síntesis de ácidos grasos. Por lo que, se utilizó el modelo construido para evaluar diferentes manipulaciones genéticas y condiciones operacionales que permitieran aumentar el rendimiento de TAGs sobre la fuente de carbono. Se expresó *in silico* una formato deshidrogenasa dependiente de NADP<sup>+</sup> (FDH) y se simuló el co-consumo de formato con acetato, lo que aumentó 2,8 veces el rendimiento de TAGs en acetato (gg<sup>-1</sup>) respecto del control con solo acetato. Por otra parte, se evaluó el co-consumo de acetato e hidrógeno, ya que la fijación del CO<sub>2</sub> a través de CBB presenta una demanda energética elevada. Esto permitió que el rendimiento de TAGs sobre acetato (gg<sup>-1</sup>) aumentará en 2,5 veces. Además, se expresó *in silico* la vía de la ribulosa monofosfato (RuMP), con lo cual el modelo predijo un aumento de 4,25 veces en el rendimiento de TAGs sobre metanol en comparación con la ruta de asimilación anotada.

Este trabajo reporta el primer ensamblaje del genoma y un GEM de *R. opacus* DSM 43205; el ensamblaje concuerda con datos experimentales reportados en literatura. El GEM se validó con rendimientos experimentales de TAGs en los sustratos evaluados y permitió identificar estrategias para aumentar el poder reductor y redirigir el carbono hacia la lipogénesis. En particular, la expresión de una FDH junto al co-consumo de acetato incrementó el rendimiento de TAGs en 2,8 veces respecto de la cepa nativa, mientras que la expresión *in silico* de la vía RuMP aumentó el rendimiento en 4,25 veces en metanol. Estos hallazgos destacan el potencial de *R. opacus* DSM 43205 como un chasis microbiano robusto para la producción sostenible de TAGs a partir de sustratos renovables.

## Cinética de catálisis enzimática: micropartículas de hueso de salmón como sustrato insoluble

P. González<sup>1</sup>, S. Almonacid<sup>1</sup>, P. Valencia<sup>2</sup> <sup>1</sup>Universidad  
Técnica Federico Santa María

<sup>2</sup>Pontificia Universidad Católica de Valparaíso  
piagonzameza@gmail.com

El salmón es uno de los principales peces de acuicultura en Chile, y los esqueletes son un importante subproducto del proceso de fileteado de los mismos. La fracción ósea del esqueleto, además de colágeno, posee un alto contenido de calcio, mineral deficitario en la dieta contemporánea. El hueso puede ser transformado en un ingrediente funcional mediante la aplicación secuencial de micro-molienda ( $d_{50}=10[\mu\text{m}]$ ) e hidrólisis enzimática (Alcalase 2.5L), favoreciendo así la solubilización de  $\text{Ca}^{+2}$  y la formación de péptidos. Los modelos que generalmente son utilizados para describir la cinética de catálisis son Michaelis-Menten (MM) y reverse-Michaelis-Menten (rMM), válidos para los casos en que  $E_0 \ll S_0 + K_m$  (1) y  $S_0 \ll E_0 + K_m$  (2), respectivamente. Dado que para sustratos sólidos la concentración molar  $S_0$  o de sitios accesibles en superficie (sitios de ataque) suele ser desconocida, no es trivial decidir cuál de estas condiciones es la indicada, y por consiguiente cuál debería ser el modelo a utilizar. Otro modelo que ha sido propuesto es el de conservación de sustrato (CS) que sería válido para ambas condiciones, (1) y (2). Independiente del modelo que se utilice, todos ellos implican una rápida formación del complejo ES, seguido de un prolongado período en que  $d(ES)/dt \approx 0$ , conocida esta como la condición de *Quasi steady state* (QSS). La utilización y validación experimental de estos modelos requieren entonces de dos elementos fundamentales:

➔ Para aplicar cualquiera de estos modelos es necesario garantizar que la velocidad inicial de reacción sea medida cuando se haya alcanzado QSS. Esto en catálisis de sistemas homogéneos es prácticamente instantáneo ( $t=0$ ), pero no necesariamente cierto cuando el sustrato es un sólido con una geometría y estructura compleja.

➔ Como el sustrato sólido es normalmente aplicado en términos de concentración másica ( $\text{g L}^{-1}$ ), es necesario introducir un parámetro que estime la relación entre la concentración molar disponible de los sitios de ataque y la carga másica del sustrato,  $\Gamma[\text{mol}_{\text{sustrato}}\text{g}^{-1}_{\text{sustrato}}]$ , requiriéndose entonces la estimación de tres parámetros cinéticos:  $k_2$  (constante de velocidad catalítica, tasa máxima de conversión del complejo ES a producto, por enzima),  $K_m$  (constante de Michaelis, indicador de afinidad enzima-sustrato),  $\Gamma$  (parámetro de accesibilidad, moles de sitios de ataque por unidad de masa de sustrato).

El objetivo del presente estudio fue determinar el tiempo de reacción al cual se alcanza QSS y obtener los parámetros cinéticos del modelo de CS. Se realizaron experimentos de curvas de progreso en todo el rango de  $E_0$  y  $S_0$ . En el caso de sustrato sólido es posible separar, por centrifugación, la fase líquida del sólido y medir en ésta la concentración de enzima libre en el tiempo y por consiguiente ES, además de  $k_2$ .

Los resultados indicaron que, en promedio, tras 178s de iniciada la reacción, se alcanza QSS y un valor de  $k_2=7.13\pm 2.86[\text{s}^{-1}]$ . Se ajustó rMM para obtener  $k_2\Gamma$  y  $K_m$  y también el modelo de CS, ambos a las velocidades iniciales en QSS ( $v_{ss}$ ). Finalmente, se obtuvo  $K_m^{\text{rMM}}=5.43\pm 1.18[\mu\text{M}]$ ;  $\Gamma^{\text{rMM}}=0.130\pm 0.006[\mu\text{mol/g}]$ , y  $K_m^{\text{CS}}=1.64\pm 1.03[\mu\text{M}]$ ;  $\Gamma^{\text{CS}}=0.130\pm 0.006[\mu\text{mol/g}]$ .

De este estudio se resuelve, que los parámetros del modelo CS pueden ser estimados exitosamente mediante el ajuste de datos experimentales al modelo rMM y la estimación de  $k_2$  mediante la determinación de ES en QSS. Se propone evaluar el cambio del parámetro  $\Gamma$  en función del tamaño medio de partícula de hueso de salmón.



## ULTRASOUND IMPROVES PROBIOTIC FERMENTATION AND BIOACTIVE POTENTIAL OF ALMOND BEVERAGES

T. Beldarrain-Iznaga<sup>1</sup>, J.M. Bastías-Montes<sup>2</sup>, J. Avila<sup>1</sup>, K. Tortoló-Cabañas

<sup>1</sup>*Department of Animal Science, Faculty of Veterinary Sciences, Universidad de Concepción, Av. Vicente Mendez 595, Chillán, Chile*

<sup>2</sup>*Food Engineering Department, Faculty of Health and Food Science, Universidad del Bío-Bío, Av. Andrés Bello 720, Chillán, Chile*  
*tbeldarrain@udec.cl*

The growing demand for plant-based products has increased interest in incorporating probiotics into non-dairy matrices. However, the survival and functionality of probiotics such as *Lactobacillus casei* in these carriers are often limited by nutritional restrictions and the absence of fermentation. Moderate ultrasound (US) pre-treatment has emerged as a promising strategy to enhance probiotic survival and functionality. Nevertheless, the impact of ultrasound on probiotic metabolism depends strongly on process parameters and the stage of application. From an industrial perspective, adding probiotics before US could be advantageous, as it reduces the risk of post-contamination; however, the survival and functionality of the cultures must be carefully evaluated.

This study aimed to assess the effect of moderate ultrasound pre-treatment on the technological properties (pH, color, microstructure, and separation index), probiotic survival, and sensory characteristics of a fermented almond beverage. Ultrasound parameters included power (40–80 W/mL) and time (2–6 min) with 3 s pulses at 20 kHz. Treated cultures were evaluated for tolerance to gastrointestinal conditions. In addition, membrane permeability, growth rate, self-aggregation capacity, co-aggregation with *Escherichia coli*, and biofilm formation were determined. The treated variant with the highest stress tolerance was selected for beverage production.

Four formulations were prepared: UNT (untreated, unfermented almond beverage), FERM (fermented with probiotic, no US), U-FERM (inoculated with probiotic, then submitted to ultrasound and fermented), and U-AFTER (almond beverage submitted to ultrasound, then inoculated with probiotic and fermented). All fermented formulations (except UNT) were incubated at 37 °C until reaching pH 4.6. Beverages were then aseptically bottled and stored at 7 °C for 28 days. The beverages were analyzed during storage for probiotic survival, physicochemical properties (pH, color, microstructure, separation index, consistency, and stability), and sensory profile. In addition, the fermented beverages were subjected to *in vitro* gastrointestinal digestion to evaluate both probiotic survival and product stability.

Ultrasound treatments (20 kHz, 40–60 W, 2–4 min, pulsed mode) increased viability by up to 2.14 log CFU/mL and enhanced membrane permeability by 16–36.25%. Compared with untreated cells, ultrasound-treated strains showed significantly higher survival ( $p \leq 0.05$ ) during simulated gastrointestinal digestion ( $7.2 \pm 1.6\%$  to  $11.7 \pm 3.6\%$ ). Functional traits, including growth index ( $14.9 \pm 1.6\%$  to  $32.4 \pm 2.1\%$ ), self-aggregation, co-aggregation with *E. coli*, and biofilm formation, were also significantly enhanced. Among the formulations, U-FERM demonstrated several advantages: fermentation time was reduced by 13.64%, probiotic survival was higher during storage and after *in vitro* gastrointestinal digestion, and consistency and stability were improved, resulting in a superior sensory profile. Overall, these results indicate that applying US after probiotic inoculation (U-FERM) may represent a suitable alternative to pasteurization in the processing of fermented beverages, providing shorter fermentation times and enhanced technological, sensory, and biological properties.



## Optimización de la producción de biomasa de bacterias extremófilas provenientes de relaves mineros mediante biorreactores

Jorge Torres<sup>1</sup>, Mauricio Latorre<sup>1, 2, 3</sup>

<sup>1</sup>Laboratorio de Bioingeniería, Instituto de Ciencias de la Ingeniería, Universidad de O'Higgins, Rancagua, <sup>2</sup> Centro de biología de sistemas para el estudio de comunidades extremófilas de relaves mineros (SYSTEMIX), Universidad de O'Higgins, Libertador Bernardo O'Higgins 611, Rancagua, Chile. <sup>3</sup> Laboratorio de Bioinformática y Expresión Génica, INTA, Universidad de Chile, El Líbano 5524, Macul, Santiago, Chile.

*Jorge.torres@postgrado.uoh.cl*

El relave Cauquenes, ubicado en la Región de O'Higgins, constituye uno de los 19 relaves mineros de la zona y se caracteriza por sus condiciones extremas de acidez y altas concentraciones de metales pesados. Recientemente, hemos generado una colección de 146 aislados bacterianos con potencial biotecnológico, aplicables en biolixiviación de tierras raras (REE) y promoción del crecimiento vegetal (PGP). Las cepas G34 y G23 mostraron los mayores rendimientos en biolixiviación y PGP, respectivamente, proyectando su utilización a escala industrial.

En este contexto, el presente trabajo evaluó el crecimiento en biorreactores de estas cepas, estudiando el impacto de diferentes concentraciones de glucosa (0, 1, 5, 10, 50 y 100 g L<sup>-1</sup>) en condiciones batch y fed-batch. La tasa de crecimiento específica resultó óptima a 5 g L<sup>-1</sup> de glucosa. El aislado G23 presentó tolerancia a altas concentraciones de glucosa ( $K_i = 199,25$  g L<sup>-1</sup>), aunque con menor rendimiento en biomasa ( $Y_{x/s} = 0,390$  g g<sup>-1</sup>). En contraste, G34 presentó una elevada afinidad al sustrato ( $K_s = 0,23$  g L<sup>-1</sup>) y mayor rendimiento en biomasa ( $Y_{x/s} = 0,675$  g g<sup>-1</sup>), pero limitaciones por inhibición a altas concentraciones de glucosa ( $K_i = 36,24$  g L<sup>-1</sup>).

Durante la fase fed-batch, ambos aislados redujeron significativamente su tasa de crecimiento, sugiriendo una desviación metabólica hacia la producción de otros compuestos. Para abordar esta hipótesis, se realizó la identificación de metabolitos secundarios mediante minería genómica de genomas completos utilizando antiSMASH 8.0 (versión local, modo relajado). El análisis se complementó con herramientas para comparación estructural y anotación funcional, incluyendo ClusterBlast, KnownClusterBlast, SubClusterBlast y MIBiG, así como módulos especializados para detección de sitios activos (ActiveSiteFinder), dominios proteicos (Pfam, TIGRFam), elementos regulatorios (TFBS) y contexto genómico (NCBI). Adicionalmente, para el análisis filogenético y clasificación de clústeres biosintéticos, se emplearon BiG-SCAPE y CORASON, permitiendo la agrupación y comparación de BGCs según similitud estructural y conservación génica, junto con predicción in silico de vías metabólicas para la generación de modelos metabólicos a escala genómica (GEMs).

Los resultados revelaron un repertorio diverso de clústeres biosintéticos (BGCs), incluyendo regiones asociadas a sideróforos tipo vibrioferrin, *non-ribosomal peptide synthetases* (NRPS), betalactonas y arylpolyenos. Esta capacidad biosintética, junto con su tolerancia fisiológica a variaciones de carbono, refuerza el potencial de G23 y G34 como candidatos para aplicaciones biotecnológicas en procesos de biorremediación, biofertilización y biolixiviación, particularmente en escenarios de alta carga metálica y condiciones extremas como los relaves mineros.

Financiamiento: ANILLO ANID ACT210004; CMM ACE210010; MICRG ICN2021\_044; Fondo Basal FB210005; FONDECYT 1230194; BASAL UOH-BioSav.

## Producción de enzimas fúngicas a partir de residuos de piña (*Ananas Comosus*) y maracuyá (*Passiflora Edulis*): valorización de subproductos agroindustriales

Mauren Osorio<sup>1,2</sup>, Luis Oviedo<sup>2</sup>, Licet Durango<sup>3</sup>

<sup>1</sup> Programa de Doctorado en Biotecnología, Pontificia Universidad Católica de Valparaíso / Universidad Técnica Federico Santa María.

<sup>2</sup> Programa de Química y Biología, Laboratorio de Biotecnología (GRUBIODEQ), Universidad de Córdoba – Colombia.

<sup>3</sup> Programa de ingeniería de alimentos, Laboratorio de bioprocesos, Universidad de Cordoba – Colombia.

[maureenceciliaosoriodiaz@gmail.com](mailto:maureenceciliaosoriodiaz@gmail.com)

Este estudio evaluó la actividad pectinolítica de las enzimas producidas por el aislado *Aspergillus niger* M6P21, utilizando residuos de piña, albedo de maracuyá y una combinación de ambos como fuentes de carbono, con pectina comercial como control. El aislado M6P21 fue obtenido de un cultivo de piña en el distrito Sarandelo de Lorica, Córdoba, Colombia. La producción enzimática se evaluó en cuatro tratamientos: albedo de piña, albedo de maracuyá, su mezcla y pectina comercial. La actividad enzimática se monitoreó durante tres días por método DNS, y los resultados se expresaron como concentración de azúcares reductores. Los hallazgos demostraron una actividad enzimática notable: 0,2816 g/L para el albedo de piña, 0,2740 g/L para el albedo de maracuyá, 0,3923 g/L para la mezcla de sustratos y 0,3046 g/L para la pectina comercial. El análisis estadístico mediante ANOVA arrojó un valor – *p* de 0,9383, lo que indica que no hubo diferencias significativas entre los tratamientos.

Los residuos combinados de piña y maracuyá son sustratos que tienen propiedades de fuente de carbono por medio de la degradación fúngica para la producción de enzimas, utilizando condiciones de fermentación sumergida dándole un valor agregado a estos residuos. El cultivo de piña / maracuyá fue el mejor para la producción de enzimas pectinolíticas, dependiendo de un aislado fúngico M6P21, del medio de cultivo y de las condiciones de agitación. Estos resultados resaltan el potencial del aislado M6P21 para la producción de enzimas fúngicas a partir de subproductos agroindustriales, ofreciendo un enfoque biotecnológico sostenible para la valorización de residuos frutales en las industrias de alimentos y biotecnológica.

## Aplicación de calentamiento óhmico sobre bagazo de cerveza para aumentar la accesibilidad de sus compuestos bioactivos.

Boris Arancibia<sup>1</sup>, Lidiana Velázquez<sup>1</sup>, María José Vargas<sup>1</sup>, Francisca Rojas<sup>1</sup>, Lida Fuentes<sup>1</sup>, Cristian Ramírez<sup>2-1</sup> y Carmen Soto-Maldonado<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Centro Regional de Estudios en Alimentos Saludables, Av. Universidad 330, Placilla, Sector Curauma, Valparaíso 2340000, Chile.

<sup>2</sup>Departamento de Ingeniería Química y Ambiental, Universidad Técnica Federico Santa María, Avenida España 1680, Valparaíso 23690123, Chile.

*barancibia@creas.cl*

La industria cervecera chilena se ha expandido considerablemente en los últimos años, y con ello se han incrementado sus descartes, siendo su principal residuo sólido el bagazo de cerveza (BC), que representa el 85% de todos los desechos generados. El BC está compuesto mayoritariamente por fibra y proteínas, y presenta compuestos como polifenoles antioxidantes. Los polifenoles y otras moléculas bioactivas resultan difíciles de aprovechar, ya que se encuentran conformando polímeros complejos y estables, enlazados a la matriz vegetal. Una alternativa para mejorar la accesibilidad de estos compuestos, es aplicar procesos térmicos, que pueden mejorar las propiedades de absorción de agua del material, la solubilidad y la extracción de compuestos bioactivos presentes. Entre estos métodos, el calentamiento óhmico es una alternativa poco estudiada, pero que se reconoce por ser un proceso eficiente, que permite preservar la funcionalidad y calidad de los compuestos bioactivos. El objetivo de este trabajo fue evaluar el calentamiento óhmico sobre la estructura del BC y la disponibilidad de moléculas antioxidantes claves (ácido ferúlico). Se determinó el contenido de polifenoles totales (método de Folin-Ciocalteu), ácido ferúlico (HPLC-DAD), arabinoxilanos (método de pentosas por orcinol) y capacidad antioxidante (ORAC) de muestras a las que se les aplicó calentamiento óhmico, bajo condiciones seleccionadas previamente mediante un diseño experimental Box-Behnken, y se compararon con un control sin voltaje (0 V/cm), y un control con NaCl 0.01% v/v, utilizado para aumentar la conductividad del sistema. El análisis de superficie de respuesta mostró que para un proceso con 80 min - campo eléctrico 12,5 V/cm y razón sólido/líquido 1/40 se destaca el contenido de ácido ferúlico de  $101,9 \pm 6,6$  mg/100 g, valor que aumenta un 67,8% cuando el proceso se realiza a 40 min - campo eléctrico 12,5 V/cm y razón sólido/líquido 1/20 (condiciones óptimas establecidas mediante el diseño Box-Behnken). Bajo esas mismas condiciones se determinaron:  $7669,1 \pm 544,0$  mg EQ. Xilosa/100g b.s. de arabinoxilanos,  $88956,0 \pm 2208,6$   $\mu$ mol ET/100g de capacidad antioxidante, y  $15288,7 \pm 863,0$  mg AGE/100g de polifenoles totales. Cuando se agregó NaCl, bajo las condiciones óptimas (40 min, 12,5 V/cm, razón sólido/líquido 1/20), estos valores disminuyeron, especialmente para el contenido de ácido ferúlico observándose un valor de  $105,8 \pm 4,0$  mg/100g. La microscopía electrónica de barrido con haz de iones focalizado (FESEM) reveló cambios morfológicos parciales en las fibras estructurales del bagazo, que sugieren la liberación de compuestos bioactivos. Los resultados evidenciaron un cambio significativo de 50,4% mg/100g en el contenido de ácido ferúlico frente a la condición sin conductividad del sistema (0 V/cm), sugiriendo que el bagazo pretratado por calentamiento óhmico podría ser reutilizado como ingrediente funcional en la industria alimentaria sostenible.

*Agradecimientos: Proyecto ANID Regional R23F0004*

## Optimización del proceso de extracción de hemicelulosa a partir de paja de trigo para la producción de xilooligosacáridos

Isabella Miranda<sup>1</sup>, Catalina Rojas<sup>2</sup>, Irene Martínez<sup>2</sup>, Oriana Salazar<sup>2</sup>

<sup>1</sup>*Departamento de Ingeniería Química, Biotecnología y Materiales, Universidad de Chile.*

<sup>2</sup>*Centro de Biotecnología y Bioingeniería (CeBiB), Universidad de Chile.*

*email: imiranda.ser8@gmail.com*

El interés en el uso de prebióticos para combatir patógenos que afectan la salud animal y humana ha ido en alza los últimos años. En particular se destaca el uso de xilooligosacáridos (XOS), prebióticos derivados del xilano presente en las hemicelulosas de las biomasas denominadas lignocelulósicas, como la paja de trigo. El proceso de extracción de hemicelulosa pura y digerible a partir de estas biomasas es complejo. Además, en Chile no existen trabajos relacionados con la implementación y optimización de este proceso utilizando paja de trigo como materia prima. El objetivo principal de esta tesis es implementar y optimizar el proceso de extracción de hemicelulosa desde paja de trigo.

Para ello se estudian y optimizan las condiciones de operación de las etapas más relevantes del proceso: el tratamiento alcalino-térmico y la precipitación etanólica. Primero se realiza un diseño experimental para estudiar el efecto de variables claves en ambas etapas: concentración de hidróxido de sodio, tiempo y temperatura de incubación para el tratamiento alcalino-térmico; tiempo de precipitación, tipo y cantidad de etanol para la precipitación etanólica. Con los datos experimentales se crean modelos matemáticos que relacionan el rendimiento de extracción con las variables estudiadas. Los modelos se optimizan y las condiciones óptimas predichas se validan experimentalmente. Por último, se evalúa la digestibilidad enzimática de las hemicelulosas obtenidas con el proceso optimizado evaluando la producción de XOS totales.

Los principales resultados muestran que las condiciones óptimas para el tratamiento alcalino-térmico corresponden a un 10%p/p de hidróxido de sodio y 60 min de incubación a 120°C. En cuanto a la etapa de precipitación etanólica, lo óptimo es utilizar 1,5 volúmenes de etanol absoluto durante 24 h. Bajo estas condiciones el rendimiento de extracción de hemicelulosa aumentó al doble con respecto al proceso no optimizado, recuperando más de la mitad de la hemicelulosa que hay inicialmente en la paja. Además, esta hemicelulosa generada es digerible y capaz de producir 61 [mg XOS/g hemicelulosa]. En conclusión, se logró optimizar el proceso aumentando considerablemente el rendimiento de extracción de hemicelulosa, siendo posible continuar con el siguiente paso correspondiente a la producción de XOS para evaluar su potencial prebiótico con pruebas *in vitro* y posteriormente *in vivo*.

## **Bioaccesibilidad in vitro de compuestos bioactivos de snack extruido usando descartes agroalimentarios**

F. Rojas-Hidalgo, L. Fuentes-Viveros, M. Vargas-Straube, B. Arancibia-  
Antichivichi, C. Soto-Maldonado

*Centro Regional de Estudios en Alimentos Saludables, Valparaíso, Chile*

*francisca.rojas@creas.cl*

La industria vitivinícola genera grandes volúmenes de orujo de uva y/o bagazo de uva como subproducto agroindustrial. Este es rico en fibra insoluble y polifenoles, que son desechados, a pesar de su alto potencial funcional y nutricional. Esta situación presenta una oportunidad estratégica para desarrollar alimentos innovadores y sostenibles que contribuyan a la valorización de subproductos agroindustriales y a una dieta más saludable, teniendo en cuenta que un bajo consumo de fibra dietética y compuestos bioactivos como los polifenoles promueve diversos problemas de salud pública tales como diabetes tipo 2, obesidad y patologías cardiovasculares.

Este estudio se enfocó en establecer el efecto de la extrusión como tecnología para el desarrollo alimentario sobre la liberación controlada de compuestos polifenólicos desde un modelo alimentario en base a harina de avena y harina de bagazo de uva (HBU). Para este efecto se comparó la presencia de compuestos fenólicos totales (CFT) determinados por el método de Folin-Ciocalteu, capacidad antioxidante mediante la determinación de Radicales de Oxígeno (ORAC) y cuantificación de antocianinas (ANT) determinadas por diferencia de pH, tanto de las materias primas como del alimento extruido, postevaluación simulada de un modelo gastrointestinal (digestión estomacal) *in vitro*.

Tras la digestión gástrica, la muestra extruida (MEx) mantuvo un 86% de la capacidad antioxidante (5.854,43 u/mol ET/100g) respecto a la mezcla de harina de avena y HUB, no extruida (M), lo que demuestra que el proceso alimentario conserva gran parte del potencial bioactivo. Las antocianinas se redujeron en sólo un 48% a pesar de su termolabilidad; mientras que se observó un incremento del 22% en fenoles totales liberados en la digestión estomacal, con un aumento desde 428,24 mg GAE/100g muestra hasta 521,93 mg GAE/100g muestra, sugiriendo que la extrusión favorece la liberación de compuestos fenólicos que pudieran estar ligados a la matriz. En conjunto, los resultados muestran que la extrusión no solo incrementa la liberación de compuestos fenólicos, sino que también preserva una alta proporción de la capacidad antioxidante, lo que la posiciona como una estrategia tecnológica prometedora para valorizar descartes agroalimentarios en el desarrollo de alimentos funcionales utilizando HBU y cocción por extrusión como tecnología alimentaria. De esta manera, este tipo de tecnología, hacia la creación de productos innovadores, saludables y sostenibles, siendo imperioso el desarrollo de estudios complementarios que permitan maximizar la liberación de compuestos fenólicos estables y, al mismo tiempo, minimizar la degradación de moléculas sensibles, asegurando así productos con mayor valor nutricional y funcional.

Agradecimientos: Proyecto ANID Regional R23F0004



## **Efecto de la sobreexpresión de genes codificantes de la epimerasa AlgE2 y de su sistema de transporte EexDEF en la proporción G/M del alginato producido por *Azotobacter vinelandii* ATCC 9046**

E. Hernández<sup>1,5</sup>, R. Corbinaud<sup>1,2,5</sup>, M. Moreno<sup>3</sup>, D. Segura<sup>3</sup>, A. Díaz-Barrera<sup>4</sup>, D. Pérez- Pantoja<sup>1,5</sup>

<sup>1</sup>*Instituto Universitario de Investigación y Desarrollo Tecnológico (IDT), Universidad Tecnológica Metropolitana (UTEM), Santiago, Chile*

<sup>2</sup>*Doctorado en Ingeniería de Sistemas Complejos, Universidad Adolfo Ibáñez, Santiago, Chile*

<sup>3</sup>*Instituto de Biotecnología, Departamento de Microbiología Molecular, Universidad Nacional Autónoma de México, Cuernavaca, México.*

<sup>4</sup>*Escuela de Ingeniería Bioquímica, Pontificia Universidad Católica de Valparaíso, Valparaíso, Chile.*

<sup>5</sup>*Center of Applied Ecology and Sustainability (CAPES), Santiago, Chile*

*e-mail: e.hernandez@utem.cl*

El alginato es un biopolímero conformado por residuos de ácido manurónico (M) y su epímero, el ácido gulurónico (G). Los residuos G pueden interactuar con metales catiónicos divalentes para formar hidrogeles, lo que permite su uso como material de soporte en aplicaciones biomédicas. Un incremento de residuos G en la cadena polimérica aumenta la rigidez del hidrogel, lo que resulta ventajoso para determinadas aplicaciones. La bacteria *Azotobacter vinelandii* es capaz de sintetizar alginato, y posee enzimas que catalizan la epimerización de M a G, incluyendo siete isoenzimas (AlgE1-E7). Entre ellas, AlgE2 es una de las que genera una mayor proporción de bloques G. En este trabajo se evaluó el efecto de la sobreexpresión del gen *algE2* en conjunto con los del sistema de secreción *eexDEF* sobre la razón G/M del alginato sintetizado. Para ello, se clonó el clúster génico *eexDEF* en el vector de expresión heteróloga pSEVA648, el cual se introdujo en una cepa recombinante de *A. vinelandii* ATCC 9046 que portaba el vector pSEVA258 incluyendo el gen *algE2*. De esta manera, se evaluó la sobreexpresión simultánea de los genes *algE2* y *eexDEF* en la cepa denominada 258E2/648DEF. En paralelo, se construyó una cepa de ATCC 9046 portando el vector pSEVA258 con *algE2* y el vector pSEVA648 vacío, denominada 258E2/648, a fin de evaluar únicamente el efecto de sobreexpresión de AlgE2. Ambas cepas se cultivaron en matraces con 50mL con medio Burk-Sacarosa, y se recolectaron muestras a las 12, 18, 24, 36 y 48 horas. Se determinó la cantidad de biomasa y alginato a lo largo del tiempo mediante gravimetría. Además, los alginatos producidos por ambas cepas fueron analizados mediante Resonancia Magnética Nuclear de Protones (H-RMN) para calcular la razón G/M. Los principales resultados muestran que, no existe diferencia aparente en la concentración de alginato producido ni de biomasa entre la cepa control 258E2/648 y la cepa objetivo 258E2/648DEF. Por otra parte, respecto a la razón G/M, a las 18 horas se observó un incremento moderado (~33%) en la cepa 258E2/648DEF, en comparación con la cepa 258E2/648 de control. En contraste, a las 48 horas se evidencia un aumento cercano al 97% respecto a la cepa control, alcanzando un valor G/M cercano a

7. Estos resultados evidencian la utilidad de manipular la expresión de los genes claves en la producción del alginato en *A. vinelandii* para modificar las características químicas del biopolímero obtenido.

Agradecimientos: Este trabajo fue financiado por los proyectos FONDECYT 1240415 y 1231075, ANID-PIA BASAL AFB240003 y FORTALECIMIENTO A LOS PROGRAMAS DOCTORADO 2022 ANID FPD 86220037.



## Extracción de Agarosa a partir de *Gracilaria chilensis* mediante el uso de Líquidos Iónicos derivados de colina

M. Pérez<sup>1</sup>, M.E Lienqueo<sup>1</sup>, D. Saucedo<sup>1</sup>, N. Guajardo<sup>2</sup>

<sup>1</sup>Centro de Biotecnología y Bioingeniería (CeBiB), Departamento de Ingeniería Química, Biotecnología y Materiales, Universidad de Chile, Beauchef 851, Santiago, Chile.

<sup>2</sup>Departamento de Ingeniería Química y Biotecnología, Pontificia Universidad Católica de Chile.

\*Email: mapc\_1999@hotmail.com.

La industria de los biopolímeros de origen natural ha experimentado un notable crecimiento, impulsado por su amplia gama de aplicaciones industriales y una creciente conciencia medioambiental. En este contexto, el procesamiento de la biomasa, fuente fundamental de estos biopolímeros, adquiere una relevancia clave.

En Chile destaca principalmente la industria algal, en particular la centrada en macroalgas para la obtención de productos como el alginato o el agar-agar, agentes espesantes de alto valor. Además de los productos principales, existe la posibilidad de obtención de otros subproductos como lípidos, proteínas, entre otros, lo cual se enmarca en el contexto de la biorrefinería de algas.

Un ejemplo significativo de la industria algal en Chile es el cultivo y procesamiento del alga *Gracilaria chilensis*, también conocida como “pelillo”, de la cual se extrae el agar-agar, un polisacárido compuesto de agarpectina y agarosa, usando como agente gelificante en la industria de alimentos y biotecnológica.

Este trabajo se enfoca en el desarrollo de una metodología innovadora para la obtención de agarosa a partir de *Gracilaria chilensis* ('pelillo'). La agarosa es el principal agente gelificante del agar-agar y posee un valor comercial considerablemente superior al del agar-agar tradicional, cuya materia prima principal suele ser el alga *Gelidium*.

La metodología propuesta se basa en la extracción utilizando Líquidos Iónicos (ILs), específicamente derivados de colina combinados con ácidos orgánicos de diversas longitudes de cadena (acético, octanoico, decanoico y cítrico). Estos ILs han sido seleccionados por su probada selectividad hacia la agarosa, según reportes bibliográficos, y por sus propiedades más amigables con el medio ambiente, ofreciendo una alternativa más sostenible a los métodos de extracción convencionales.

Tras la síntesis de los Líquidos Iónicos (ILs) y el desarrollo metodológico para la obtención de agarosa, las muestras resultantes fueron caracterizadas exhaustivamente mediante diversas técnicas moleculares, reológicas y de idoneidad para electroforesis.

Los resultados más relevantes incluyen rendimientos de extracción que oscilaron entre 5% y 24% en promedio; el mayor se obtuvo con citrato de colina y el menor con decanoato de colina. Se realizaron análisis de espectro infrarrojo mediante FTIR, y se determinaron fuerzas de gel entre 737 y 265 [g/cm<sup>2</sup>], siendo la más alta con acetato de colina y la más baja con citrato. El contenido de sulfatos en masa varió entre 0.55% y 0.35%, y se observó una aceptable idoneidad para aplicaciones electroforéticas. Estos valores fueron comparados con los de la agarosa comercial derivada de *Gelidium*, cabe destacar que los mejores resultados de caracterización, indicativos de una agarosa de mayor calidad, se obtuvieron con decanoato de colina, el IL de mayor tamaño molecular empleado.

Finalmente, se establece una relación directa entre la calidad de la agarosa extraída y la longitud de la cadena de los ácidos utilizados en la síntesis de los ILs. Los productos obtenidos demuestran ser comparables con algunos productos comerciales, lo que sugiere una potencial oportunidad de negocio.

**Agradecimientos:** Centro de Biotecnología y Bioingeniería (CeBiB) AFB240001

## Caracterización de nanocompuestos basados en PLA/PBAT/DK2 para la fabricación de andamios impresos en 3D procesados con CO<sub>2</sub> denso y su potencial uso en ingeniería de tejidos óseos.

E. Zurob<sup>1</sup>, C. Aguirre<sup>1</sup>, J. Romero<sup>1\*</sup>, D. Ibarra<sup>1</sup>, S. Faba<sup>1</sup>,  
A. Torres<sup>2,3</sup>, F. Rodríguez-Mercado<sup>2,3</sup>.

<sup>1</sup>Laboratory of Membrane Separation Processes (LabProSeM), Department of Chemical Engineering and Bioprocesses, Engineering Faculty, University of Santiago de Chile (USACH), Av. Libertador Bernardo O'Higgins 3363, Santiago, Chile.

<sup>2</sup>Packaging Innovation Center (LABEN-CHILE), Department of Food Science and Technology, Faculty of Technology, University of Santiago de Chile (USACH), Av. Víctor Jara 3769, Santiago, Chile.

<sup>3</sup>Center for the Development of Nanoscience and Nanotechnology (CEDENNA), University of Santiago de Chile (USACH), Av. Libertador Bernardo O'Higgins 3363, Santiago, Chile.  
[elsie.zurob@usach.cl](mailto:elsie.zurob@usach.cl)

La creciente demanda de sustitutos óseos ha sido impulsada por la mayor incidencia de enfermedades relacionadas con el hueso, el envejecimiento de la población y la necesidad de soluciones que vayan más allá del simple soporte estructural, ofreciendo capacidad de carga, bioactividad y biodegradación controlada. Estos requerimientos en evolución ponen de manifiesto las limitaciones de los injertos tradicionales y los implantes metálicos. En respuesta, los andamios poliméricos han surgido como estructuras personalizables y bioactivas para la ingeniería de tejidos óseos. Este estudio explora el desarrollo de andamios nanocompuestos a partir de una mezcla de poli(butileno adipato-co-tereftalato)/poli(ácido láctico) (PBAT/PLA, 84:4) reforzada con DK2, una nanoarcilla basada en montmorillonita. Los andamios fueron fabricados mediante extrusión por fusión e impresión 3D, y posteriormente funcionalizados mediante espumado con CO<sub>2</sub> denso, lo que permitió obtener porosidad primaria y secundaria. Todas las muestras fueron caracterizadas química, física y estructuralmente mediante espectroscopía infrarroja por transformada de Fourier (FTIR), análisis termogravimétrico (TGA), calorimetría diferencial de barrido (DSC), microscopía electrónica de barrido (SEM) y ensayos mecánicos (impacto y tracción). Los resultados demuestran la incorporación exitosa de DK2 en la mezcla polimérica. Los análisis térmicos mostraron dos etapas de degradación, con máximos a ~333 °C (PLA) y ~404 °C (PBAT), y un aumento del residuo del 25% al 27% tras incorporar DK2. Las muestras con nanoarcilla presentaron mayor estabilidad térmica, manteniendo propiedades de cristalización similares. La presencia de DK2 también mejoró la resistencia al impacto (de 39.1 a 45.8 kJ/m<sup>2</sup>) e incrementó el módulo de Young (de 97.8 a 121.3 N/mm<sup>2</sup>), indicando que este nanorrelleno aumenta la rigidez del material. Respecto al tratamiento con CO<sub>2</sub> denso, los andamios no espumados presentaron únicamente porosidad primaria, mientras que los espumados exhibieron tanto porosidad primaria como secundaria, una característica que imita la arquitectura del hueso trabecular, lo que sugiere el potencial de este material nanocompuesto para aplicaciones en ingeniería de tejidos óseos.

## GALERÍA IMÁGENES



**XXII**  
Congreso  
Chileno de  
Ingeniería  
Química



## GALERÍA IMÁGENES

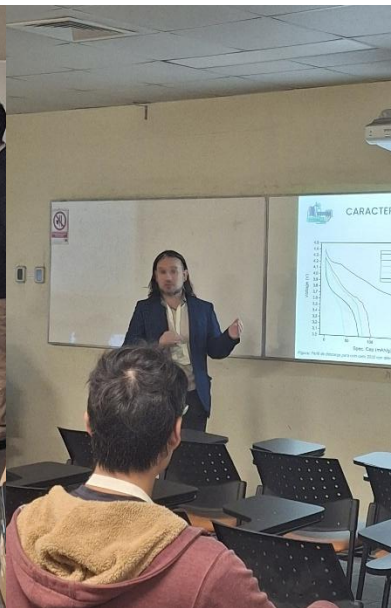


## GALERÍA IMÁGENES





## GALERÍA IMÁGENES





## GALERÍA IMÁGENES



## GALERÍA IMÁGENES



**XXII**  
Congreso  
Chileno de  
Ingeniería  
Química



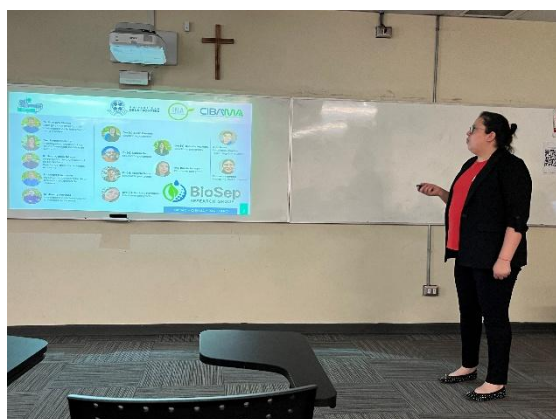
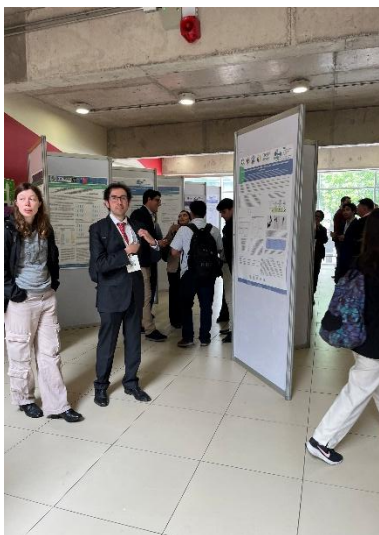
## GALERÍA IMÁGENES



XXII  
Congreso  
Chileno de  
Ingeniería  
Química



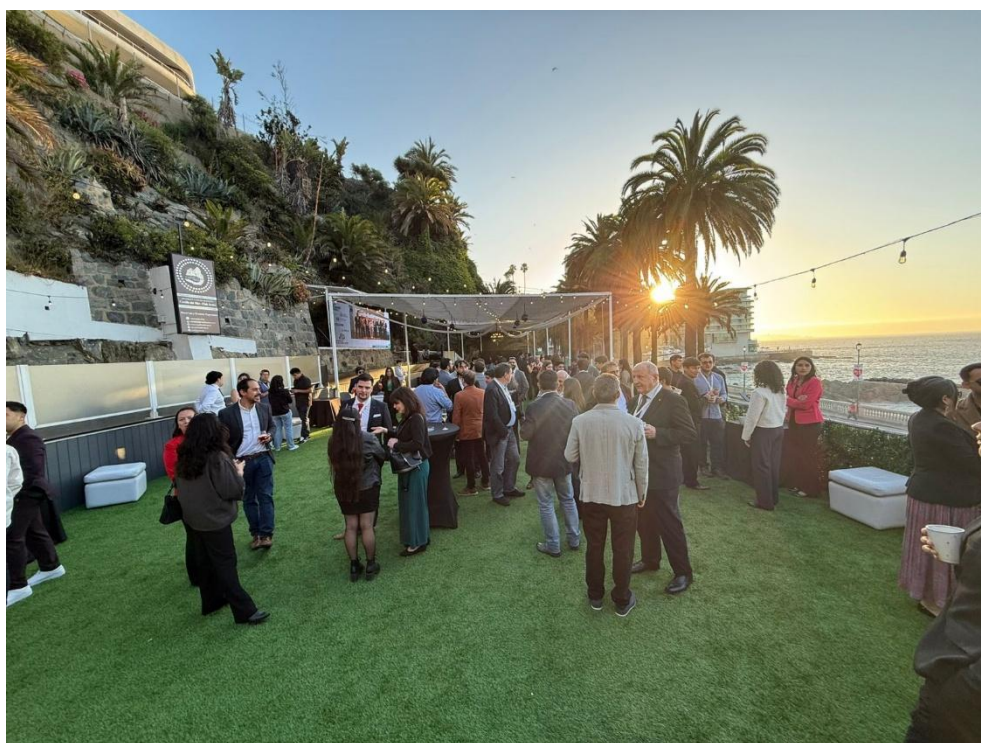
## GALERÍA IMÁGENES



**XXII**  
Congreso  
Chileno de  
Ingeniería  
Química



## GALERÍA IMÁGENES





## FOTOGRAFÍA OFICIAL







PONTIFICIA  
UNIVERSIDAD  
CATÓLICA DE  
VALPARAÍSO

ESCUELA DE  
INGENIERÍA QUÍMICA



PONTIFICIA  
UNIVERSIDAD  
CATÓLICA DE  
VALPARAÍSO



COLEGIO  
DE INGENIEROS  
DE CHILE A.G.