

Development of a new astaxanthin accumulation process using non-autotrophic cultures

Resumen

La Astaxantina (ATX) es un pigmento rojo perteneciente al grupo de los carotenoides, está presente en diversas cadenas tróficas marinas y posee aplicaciones en las industrias acuícolas, avícola y también en salud humana. Es un potente antioxidante, previene enfermedades oculares y reduce el riesgo de enfermedades cardiovasculares. Todas estas aplicaciones han hecho de la ATX un mercado que está en constante crecimiento. Actualmente el 95% de la ATX proviene de origen sintético, sin embargo, la forma natural posee mayor bioactividad y sólo ésta está permitida para consumo humano. Se hace necesario, por lo tanto, contar con buenas fuentes de ATX natural.

Actualmente la fuente más promisoría es *Haematococcus pluvialis*, microalga verde cuyo ciclo de vida se divide en una fase de crecimiento verde, donde la célula es móvil y activa reproductivamente; y una fase de roja que surge de la falta de nutrientes y otros factores ambientales, esta fase se caracteriza por la formación de quistes inmóviles y la acumulación de ATX.

Actualmente las industrias utilizan un sistema de autotrófico de dos etapas en sistemas tipo *raceways* que poseen bajos rendimientos, dependencia del clima, altos riesgos de contaminación y un excesivo consumo de agua dulce. El presente trabajo propone estudiar las alternativas mixotróficas y heterotróficas en fotobiorreactores y fermentadores convencionales ya que demuestran mayor control sobre las condiciones de cultivo y productividades más altas.

Se utilizará una cepa poliploide desarrollada por el grupo de investigación ya que ha demostrado una mayor acumulación de ATX y se evaluarán distintos factores estresores para aumentar la productividad como son temperatura, irradiancia, UV, ROS y fuentes de carbono. Finalmente, las condiciones optimizadas serán evaluadas en procesos de producción alternativos, considerando sistemas tipo batch y continuos, en una o varias etapas; en vías de desarrollar un proceso factible de ser escalado.

Angelo Alonzo Beratto Ramos
Prof: Juan José Gallardo Rodríguez

Aproximación teórica a la hidrogenación de CO_x sobre catalizadores Ni-Co

Resumen

Los compuestos CO y CO₂ son abundantemente producidos en el transporte, la industria y a nivel doméstico, reconociéndoseles como importantes contaminantes del medioambiente y de algunos procesos industriales. Mediante catalizadores y condiciones adecuadas, estas moléculas pueden formar gran variedad de productos de valor agregado como ceras, gasolina y metano. Ahora, como desde la escala molecular puede afectarse el desempeño de catalizadores mediante (por ejemplo) desactivaciones, interacciones con soportes y competencia por sitios, es necesaria la comprensión fundamental de las interacciones entre especies en reacción para el apropiado diseño y optimización de catalizadores.

En este trabajo se emprende el estudio teórico de la reacción de metanación de especies CO_x sobre Ni, Co (catalizadores reconocidos) y su aleación NiCo, partiendo por la adsorción de CO y activación del enlace fuerte C-O, una de las principales barreras energéticas en la reacción.

Se recurre a la teoría del funcional de densidad (DFT) en modelos periódicos, implementada en el software VASP, para la determinación de estructuras electrónicas, energías y geometrías de modelos de sólidos y superficies activas para catálisis. Se han utilizado el funcional PBE junto a pseudopotenciales PAW para la simulación de sólidos Ni(fcc), Co(hcp) su aleación equimolar ordenada NiCo(fcc) y algunas de sus superficies representativas: Ni[100], Ni[111], Co[0001], NiCo[100] y NiCo[111]. Se establecieron apropiados métodos y parámetros para la convergencia numérica y determinaron parámetros de celda de los metales puros y la aleación en buen acuerdo con resultados experimentales y teóricos de otros autores.

Las energías superficiales obtenidas sugieren la formación preferencial de superficies de mayor coordinación (e.g. [111] vs. [100]) de acuerdo a construcciones de Wulff. La carga superficial negativa correspondiente a los metales puros ha sido identificada y contrastada a la heterogénea distribución electrónica en la superficie de la aleación y su dependencia de la coordinación superficial.

Modelos de superficies adsorbidas en un límite de baja cobertura ($\theta_x < 0.15$) se utilizaron para comparar la estabilidad de la adsorción entre superficies y determinar los sitios de adsorción preferidos de cada caso. Bajo un enfoque de descriptores de actividad catalítica se ha vinculado la energía media de la banda d (E_d) en los modelos de superficies limpias con la energía de adsorción de CO. Se utilizan la donación de carga electrónica al adsorbato y estiramiento del enlace C-O como parámetros de activación, ambos con significativa coincidencia entre sitios de adsorción y superficies, aunque no se han podido relacionar directamente con E_d como descriptor.

Sebastian Godoy Gutiérrez
Profes.: Romel Jiménez, Alejandro Karelovic, CarboCat, UdeC