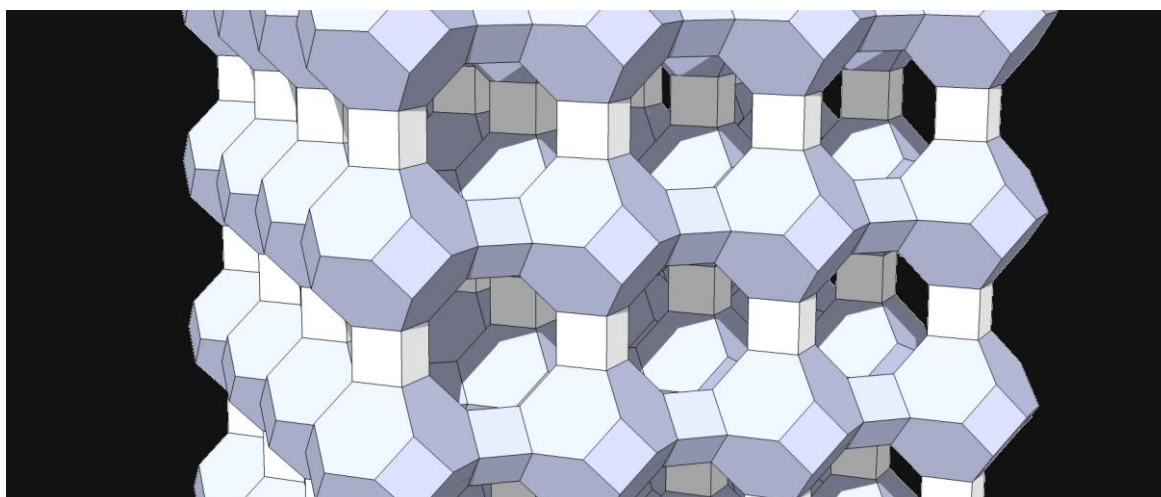


Valencia, martes 30 de septiembre de 2025

Una nueva metodología computacional mejora las propiedades y reduce los costes en la producción de zeolitas

- El Instituto de Tecnología Química (CSIC-UPV) ha validado el nuevo método, desarrollado por el Massachusetts Institute of Technology (MIT), que analiza moléculas orgánicas con inteligencia artificial para optimizar el diseño de estos ‘filtros inteligentes’
- El trabajo, publicado en ‘Nature Computational Science’, ha logrado obtener nuevos catalizadores para mitigar la emisión de gases contaminantes de la industria del automóvil



Estructura molecular de una zeolita. / Wikimedia Commons

Un grupo de investigación del Instituto de Tecnología Química (ITQ), centro mixto del Consejo Superior de Investigaciones Científicas (CSIC) y la Universitat Politècnica de València (UPV), ha validado una innovadora metodología computacional llamada ZeoBind, desarrollada en el Massachusetts Institute of Technology (MIT, EE.UU.). Este sistema está basado en el aprendizaje automático mediante inteligencia artificial, y permite la exploración exhaustiva de moléculas orgánicas para dirigir la formación de zeolitas, minerales con estructura porosa que actúan como *filtros inteligentes* con multitud de utilidades. El objetivo es mejorar las propiedades de las zeolitas y reducir sus costes de

producción. La investigación ha sido publicada en la prestigiosa revista [*Nature Computational Science*](#).

Las zeolitas son materiales cristalinos compuestos principalmente por silicio y aluminio que destacan por su estructura, con microporos que permiten la entrada de moléculas en su interior. Se trata de un material que puede dar lugar a distintas reacciones químicas en función de la composición y tipología de sus poros, por lo que es muy utilizado como catalizador (para aumentar la velocidad de una reacción química) o como adsorbente industrial. La forma y tamaño de los poros de la zeolita se suelen fijar durante su síntesis o fabricación artificial mediante el uso de moléculas orgánicas específicas, que actúan como *moldes* que transfieren su forma a los poros de la estructura zeolítica para conseguir unas propiedades determinadas.

Sin embargo, la selección de las moléculas orgánicas específicas para una determinada zeolita es compleja y, tradicionalmente, se ha basado en metodologías costosas de prueba-error, que requieren mucho tiempo de optimización. Para conseguir una mejor selección de estas moléculas orgánicas específicas, el grupo dirigido por **Rafael Gómez-Bombarelli** en el Departamento de Ciencia e Ingeniería de Materiales del MIT ha desarrollado ZeoBind, una novedosa metodología computacional que permite una exploración exhaustiva de hasta 2,3 millones de moléculas orgánicas.

“Con esta gran cantidad de datos de acceso en abierto se podrá acelerar el diseño de las moléculas orgánicas para la síntesis de catalizadores zeolíticos”, indica Gómez-Bombarelli, coinvestigador principal del trabajo.

La investigación desarrollada por el ITQ en València ha conseguido validar ZeoBind con la síntesis de dos zeolitas con composiciones químicas novedosas, permitiendo mejoras tanto en su proceso de preparación como en la estabilidad. Para ello, y con la ayuda de la inteligencia artificial, se han seleccionado las moléculas orgánicas idóneas para dirigir la formación eficiente de las zeolitas deseadas, considerando no sólo las moléculas orgánicas que se habían descrito hasta la fecha en la literatura científica, sino también generando millones de hipotéticas moléculas orgánicas.

“Con esta investigación hemos demostrado que ZeoBind amplía el diseño de moléculas orgánicas hasta en varios órdenes de magnitud, millones frente a cientos, en comparación a las investigaciones previas, hecho que permite un cribado exhaustivo de moléculas orgánicas dirigido de manera específica hacia la preparación de materiales zeolíticos”, asegura **Manuel Moliner**, científico del CSIC en el ITQ y coinvestigador principal del trabajo.

Con esta nueva metodología, el personal investigador del ITQ (UPV-CSIC) ha sido capaz de desarrollar nuevos catalizadores zeolíticos para la eliminación selectiva de óxidos de nitrógeno (NOx), con interés para la industria del automóvil, con el fin de mitigar y controlar la emisión de gases tóxicos a la atmósfera tras los procesos de combustión.

Esta investigación se ha desarrollado también en colaboración con personal investigador de la Universidad de California en Los Ángeles (UCLA) y de la Universidad Caltech, ambas en Estados Unidos. Por parte del ITQ (UPV-CSIC), esta investigación se enmarca dentro de

la tesis doctoral de Marcela Semanate, en la que también han participado Estefanía Bello, Cecilia Paris, Isabel Millet y Manuel Moliner.

Xie, M., Schwalbe-Koda, D., Semanate-Esquivel, Y.M. et al. ***A comprehensive mapping of zeolite–template chemical space***. *Nat Comput Sci* 5, 661–674 (2025). <https://doi.org/10.1038/s43588-025-00842-5>

CSIC Comunicación – Comunidad Valenciana

comunicacion@csic.es