



UNIVERSITAT DE
BARCELONA

V Tesimarató de Química

Jornada de comunicació de joves investigadors
de la Facultat de Química

Llibre de resums | **2022**

Comissió de Dinamització Lingüística
de la Facultat de Química





Organització de la V Tesimarató

Comissió de Dinamització Lingüística de la Facultat de Química

Membres de la Comissió de Dinamització Lingüística

Dolors Velasco Castrillo

secretària acadèmica de la Facultat i presidenta de la Comissió

Joaquim Crusats Aliguer

representant del professorat de la Secció de Química Orgànica

Joan Dosta Parras

representant del professorat de la Secció d'Enginyeria Química

Joan Formosa Mitjans

representant del professorat de la Secció de Ciència i Enginyeria dels Materials

Elisabet Fuguet Jordà

representant del professorat de la Secció de Química Analítica

Xavier Vendrell Villafruela

representant del professorat de la Secció de Química Inorgànica

Eudald Vilaseca Font

representant del professorat de la Secció de Química Física

Glòria Durany Boixadós

cap de Secretaria

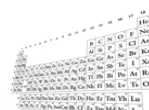
Núria Castells Quintana

representant dels Serveis Lingüístics a la Facultat de Química

Amb la col·laboració dels Serveis Lingüístics de la Universitat de Barcelona i de Maria Òdena Blanch, becària d'assessorament i dinamització dels Serveis Lingüístics (curs 2022-23)

Il·lustració de la portada

Cartell a partir d'una fotografia feta a l'Aula Magna Enric Cassassas de la Facultat de Química (2019)



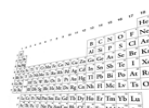


V Tesimarató de Química

22 novembre de 2022

Aula Magna Enric Casassas de la Facultat de Química

- 1 Rubén Cabello Gallego *Aplicació de codis CFD a problemes fonamentals de l'enginyeria química*
- 2 Eduard Balaguer Garcia *Reaccions estereoselectives catalitzades per coure*
- 3 Carla Zambrano Membrives *Mètodes fisicoquímics per despintar para-xocs per a la seva valorització en automoció mitjançant reciclatge*
- 4 Anna Sampietro Pifarré *Malaltia d'Alzheimer: aproximació terapèutica multidiana*
- 5 David Vázquez Parga *Estudi computacional de tendències de catalitzadors metàl·lics per a reaccions clau mediambientals*
- 6 Joaquim Serra Rada *Desenvolupament de matèries primeres per a fabricació additiva a partir de subproductes dins d'un model d'economia circular*
- 7 Dídac Serraïma López *Estudi dels mecanismes d'interacció d'urani i poloni en sòls*
- 8 Josep Maria Ferrer *Evolució de les propietats de canonades de PP-R en servei*
- 9 Gemma Llauredó Capdevila *Síntesi de materials funcionals en espais confinats*
- 10 Pere Llopart Roca *Biocarbó com a eina sostenible per a l'adsorció de microcontaminants en aigües residuals*
- 11 Martí Molera Janer *Producció d'hidrogen solar a partir del glicerol*
- 12 Daniel Dolz Garcia *Metanació del CO₂ en materials MXens*
- 13 Ignasi Fort Grandas *Xarxes metal·loorgàniques per fer sensors de gasos d'efecte hivernacle*





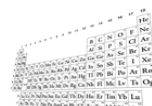
Presentació

El 22 de novembre de 2022 va tenir lloc la cinquena edició de la Tesimarató de Química en el marc de la celebració de Sant Albert, patró de la ciència i dels científics i científiques. És una activitat organitzada i fomentada des de la Comissió de Dinamització Lingüística (CDL) de la Facultat de Química dirigida a joves investigadors de la Facultat, que han de presentar oralment i en català els aspectes més rellevants de la seva tesi doctoral de manera condensada (4 minuts) i que sigui entenedora per a un públic ampli.

Des de la primera edició —el 2018—, 68 joves investigadors i investigadores han passat pel micròfon de la Tesimarató per fer difusió de la seva recerca. Enguany hem tingut l'oportunitat de comptar amb l'opinió i consells d'alguns dels participants en aquella primera edició. En destaquem algunes opinions, en paraules seves, sobre recerca i societat, sobre aspectes concrets de la seva investigació que poden resultar sorprenents per al públic i sobre què representa el fet de comunicar-la en el format de la Tesimarató.

En primer lloc, és essencial aproximar la recerca a tots els àmbits perquè «és fonamental per al desenvolupament i la millora de la nostra societat», com posa de manifest Clara Pérez Ràfols, i «per conscienciar la societat en general de la importància que té», en paraules de Roger Bujaldón Carbó. Com diu Jaume Calvo de la Rosa, «és important que la societat conegui els avenços científics en què s'està treballant i desgraciadament la recerca no omple portades de diaris» malgrat que, com destaca Sergio Huete Hernández, «la recerca està enfocada a resoldre els problemes més desafiants als quals s'enfronta la humanitat». Així doncs, es fa evident l'interès i la conveniència d'organitzar activitats com la Tesimarató, que fomenten la divulgació en català de la recerca que es fa a la Facultat de Química.

Els joves investigadors i investigadores que han fet possible les cinc edicions de la Tesimarató representen tots els àmbits de la recerca de la Facultat i, amb l'expertesa que cadascú té en el seu camp, saben trobar també els aspectes que poden resultar insòlits i curiosos per a qui ho desconeix. Per exemple, Clara Pérez Ràfols destaca «la manera com les llengües electròniques mimetitzen el funcionament del cos humà», fruit de la recerca que desenvolupa en el camp dels sensors per determinar ions metàl·lics; per Roger Bujaldón, «el fet de relacionar molècules orgàniques amb la fabricació de dispositius electrònics» i, per Sergio Huete, «la complexitat i les combinacions de compostos i fases cristal·lines que hi ha en el ciment». Per l'Anna Escobar Romero és «la gran quantitat d'assaigs que es duen a terme i que tenen resultat negatiu fins que aconseguixes el resultat esperat», fet que sovint és desconegut per a la gran majoria del públic.

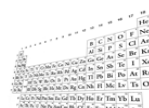




Malgrat que no tots els participants de la Tesimarató obtenen el premi de millor exposició oral, sí que tothom està d'acord que va ser una bona experiència i una oportunitat per donar a conèixer la feina que es fa durant el doctorat, amb la particularitat que, com diu Roger Bujaldón, «condensar-ho tot en quatre minuts et fa plantejar què és realment important». Si haguessin de donar un consell als futurs participants, per a Jaume Calvo seria el de «posar-se a la pell d'un oient no expert»; per a Sergio Huete, «és millor explicar poc i bé i de forma senzilla, divertida, atractiva i interessant» i, com emfatitza l'Anna Escobar, «de la teva feina de la tesi, tu en saps més que ningú, així que relaxa't!»

Finalment, la CDL de la Facultat de Química vol destacar les excel·lents aportacions que s'han fet tant en la jornada d'enguany com en les anteriors. Explicar la feina de molt de temps en molt pocs minuts no deixa de ser un art: el de la comunicació. Divulgar i donar a conèixer la feina que els investigadors i investigadores joves fan durant el seu doctorat és obrir a la societat les portes de la Facultat de Química perquè qui vulgui en pugui formar part.

Comissió de Dinamització Lingüística de la Facultat de Química
Universitat de Barcelona

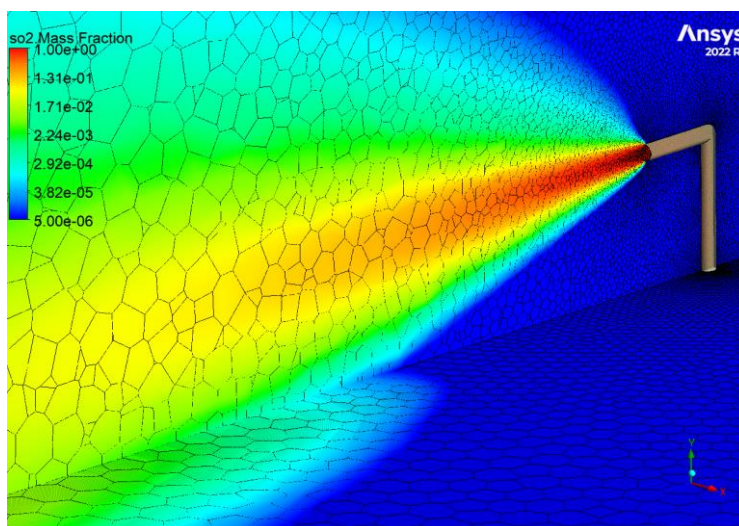


Aplicació de codis CFD a problemes fonamentals de l'enginyeria química

Rubén Cabello Gallego, Alexandra Elena Plesu Popescu i David Curcó Cantarell
Departament d'Enginyeria Química i Química Analítica, Secció d'Enginyeria Química

ruben.cabello@ub.edu

Programa de doctorat en Enginyeria i Ciències Aplicades



El disseny d'operacions i processos en l'àmbit de l'enginyeria química ha estat tradicionalment basat en balanços macroscòpics de matèria, que assumeixen condicions de idealitat dins dels equips o mitjançant correlacions empíriques generades a partir d'un gran volum d'experiments. Per optimitzar les variables geomètriques, químiques i físiques d'un procés, sovint es requereixen molts experiments, tant a escala pilot com a escala industrial, els quals comporten un cost significatiu i molts cops no prometen resultats competitius.

En els últims anys, la utilització de codis de dinàmica de fluids computacional o CFD (*computational fluid dynamics*) ha crescut en moltes indústries, fins al punt que sovint les simulacions substitueixen una gran part de l'experimentació. Aquests codis es basen a resoldre balanços microscòpics de matèria dins dels equips, incloent-hi transferència de moment, calor i espècies. D'aquesta manera, es poden simular la majoria de processos presents en la indústria química. Constantment s'estan desenvolupant noves tècniques i programes més competitius per millorar-ne la fidelitat i la competitivitat. La indústria química sempre necessitarà fer experiments, però la implementació d'aquestes tècniques ajudarà a trobar òptims en les condicions de treball, més fàcilment i de manera més eficient i econòmica.

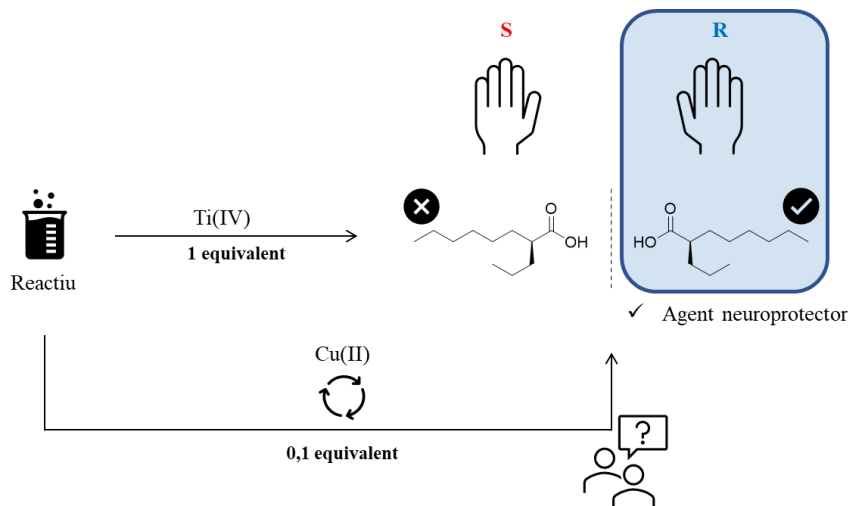
PARAULES CLAU: simulació, fluids, enginyeria química, dispersió de gasos, transmissió de calor

Reaccions estereoselectives catalitzades per coure

Eduard Balaguer Garcia,¹ Pedro Romea García¹ i Fèlix Urpí i Tubella¹
¹ *Departament de Química Inorgànica i Orgànica, Secció de Química Orgànica*

eduard.balaguer@ub.edu

Programa de Doctorat en Química Orgànica



L'activitat farmacològica d'un medicament està relacionada amb la interacció entre petites molècules i estructures biològiques tridimensionals complexes, com per exemple enzims, receptors i àcids nucleics. Aquestes estructures són capaces de reconèixer el fàrmac en una disposició espacial única entre totes les possibilitats. Aquest fet manifesta la rellevància del desenvolupament de reaccions químiques estereoselectives, és a dir, reaccions que permeten obtenir una determinada molècula amb una disposició espacial específica.

Anteriorment en el nostre grup de recerca s'han desenvolupat reaccions estereoselectives de formació d'enllaços carboni-carboni, que han permès aconseguir molècules amb activitat biològica desitjada, com ara l'àcid arúndic i la umuravumbolida. Per dur a terme aquestes reaccions, és necessària l'addició de quantitats considerables de titani(IV).

L'objectiu actual de la meua tesi és desenvolupar una metodologia que permeti dur a terme aquestes reaccions estereoselectives, però, en lloc d'emprar grans quantitats de titani(IV), s'ha fet afegint-hi petites quantitats d'un metall que es regeneri en el transcurs de la reacció (catalitzador), de manera que s'adapti més al concepte desitjat de la química verda. Després d'un ampli estudi amb diferents metalls, dissolvents, temperatures i altres condicions de reacció, s'han assolit resultats positius en el cas del coure(II).

PARAULES CLAU: catàlisi, estereoselectivitat, fàrmacs

Mètodes fisicoquímics per despintar para-xocs per a la seva valorització en automoció mitjançant reciclatge

Carla Zambrano Membrives,^{1,2} Pablo Tamarit Romero,² Ana Inés Fernández Renná¹

i Camila Barreneche Güerisoli¹

¹ *Departament de Ciència dels Materials i Química Física, Secció de Ciència de Materials*

² *CITSALP, SL*

czambrano@ub.edu

Programa de doctorat en Enginyeria i Ciències Aplicades



La utilització de materials polimèrics en el sector de l'automoció ha crescut considerablement al llarg dels anys a causa dels avantatges que presenten davant d'altres materials, com l'acer. Alguns dels beneficis que ofereixen són la baixa densitat, el baix preu i la reducció dels temps de muntatge. El sector de l'automoció suposa el 10 % de la demanda europea de convertidors plàstics, ja siguin termoplàstics, termoestables o elastòmers. Els polímers que ocupen més del 50 % de la demanda són el polipropilè, el polietilè i els poliuretans, utilitzats majoritàriament en la fabricació de para-xocs, dipòsits o aïllament de cables. A conseqüència de l'increment del seu ús, també ha augmentat la quantitat de residus plàstics del sector. El reciclatge és imprescindible per solucionar el problema que suposa l'acumulació de residus, i arribar a una economia circular reutilitzant els residus com a recursos, mitjançant processos de transformació. No obstant, existeixen diferents problemes que en dificulten el reciclatge i, per tant, l'obtenció de material reciclat de bona qualitat. Un dels més habituals és la presència de pintura a la superfície de les peces injectades com els para-xocs, necessària per al disseny i la funcionalitat del producte durant el seu temps de vida. Aquesta pintura modifica les propietats mecàniques del material triturat i extrusionat, i provoca l'aparició d'impureses de colors en les peces injectades, cosa que dona com a resultat un material reciclat de baixa qualitat. Aquest projecte de doctorat industrial analitza i avalua la viabilitat tècnica de mètodes químics i físics per eliminar aquesta impuresa i, així, valoritzar el material reciclat.

PARAULES CLAU: polímers, reciclatge, sostenibilitat, automoció, pintura

Malaltia d'Alzheimer: aproximació terapèutica multidiana

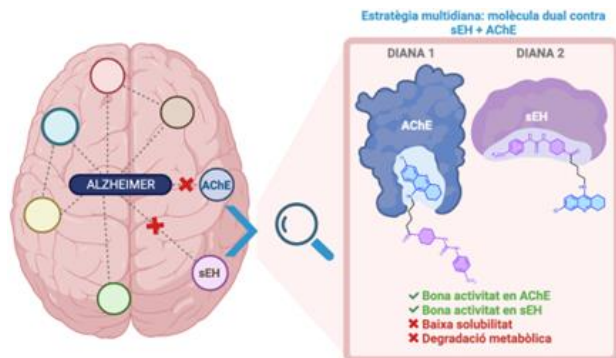
Anna Sampietro Pifarre,¹ Diego Muñoz-Torrero¹ i Carles Galdeano^{1,2}

¹ *Departament de Farmacologia, Toxicologia i Química Terapèutica, Unitat de Química Farmacèutica*

² *Departament de Farmàcia i Tecnologia Farmacèutica, i Físicoquímica, Secció de Físicoquímica*

annasampietro@ub.edu

Programa de doctorat en Química Orgànica



La malaltia d'Alzheimer és un problema de salut pública: afecta més de 800.000 persones a Espanya. Com que té un origen multifactorial i, per tant, no depèn d'un únic factor al qual ens puguem dirigir, les teràpies actuals no aconseguen frenar la malaltia. Una idea per fer-li front ha estat el disseny dels fàrmacs multidiana, que es diferencien dels convencionals perquè poden interaccionar amb més d'una proteïna alhora. Així, podem actuar sobre més d'una causa a la vegada amb l'objectiu d'aturar-ne la progressió.

En el meu grup d'investigació s'ha desenvolupat la primera molècula capaç d'interaccionar alhora amb una combinació inèdita de dues dianes implicades en la malaltia: la hidrolasa d'epòxids soluble (sEH) i l'acetilcolinesterasa (AChE). La primera diana està implicada en els processos inflamatoris de la malaltia. Inhibint-la, obtenim una acció antiinflamatòria. L'acetilcolinesterasa degrada l'acetilcolina, necessària perquè les neurones estableixin les connexions entre elles i, per tant, inhibint-la aconseguim un millor funcionament neuronal.

Aquesta molècula ha demostrat una bona activitat en les dues dianes a nivell experimental, però no compleix les característiques necessàries per convertir-se en fàrmac. Per això, l'objectiu de la meua tesi és desenvolupar nous compostos que mantinguin l'activitat esmentada, però que alhora en millorin dues característiques principals: la solubilitat aquosa, per tal que la molècula es pugui distribuir a través del cos, i l'estabilitat, ja que les molècules anteriors tendeixen a ser destruïdes ràpidament en el nostre organisme. D'aquesta manera podríem optimitzar una molècula prometedora per a aquesta malaltia, per tal que es pugui convertir en un futur fàrmac.

PARAULES CLAU: Alzheimer, multidiana, sEH, AChE, propietats farmacològiques

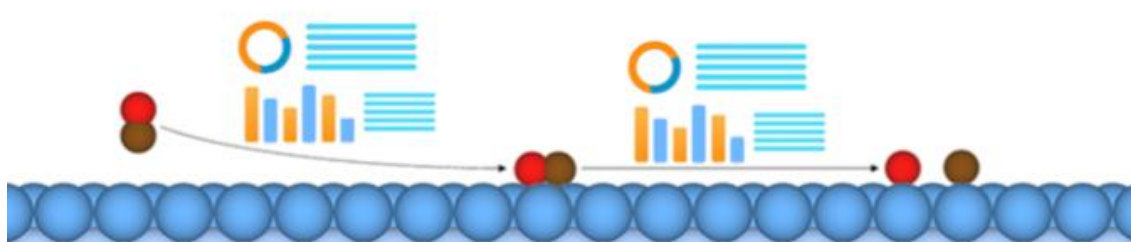
Estudi computacional de tendències de catalitzadors metàl·lics per a reaccions clau mediambientals

David Vázquez Parga,¹ Ángel Morales García¹ i Francesc Viñes Solana¹

¹ *Departament de Ciència de Materials i Química Física, Secció de Química Física*

dvazqupa15@alumnes.ub.edu

Programa de doctorat en Química Teòrica i Computacional



L'ús de metalls de transició com a catalitzadors està estès a la indústria. El seu estudi i desenvolupament sempre ha estat limitat per les tècniques experimentals a l'hora d'obtenir informació atòmica de reactius i productes sobre les superfícies. Amb les noves eines que aporta la química computacional, podem estudiar de manera més precisa i àmplia com actuen sobre una superfície metàl·lica, per determinar si és o no un bon catalitzador. Ampliant la quantitat de superfícies analitzades es poden trobar quines propietats són clau, ja que afecten l'activitat d'una superfície, per dissenyar un catalitzador òptim per a cada reacció. Aquest projecte vol estudiar diferents reaccions d'interès industrial, on es poden destacar la dissociació de CO i CO₂, presents en diversos processos industrials, però que tenen un gran impacte ambiental com a residus. Nous catalitzadors ajudarien a eliminar i reutilitzar aquests productes de manera eficient i a dirigir la producció cap a una economia circular.

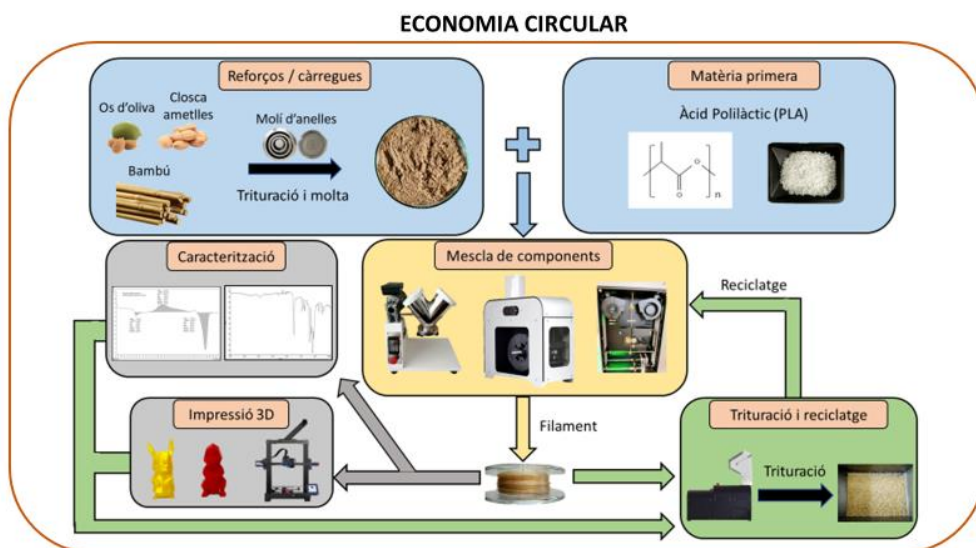
PARAULES CLAU: metalls de transició, catalitzador, tendència, dissociació

Desenvolupament de matèries primeres per a la fabricació additiva a partir de subproductes dins d'un model d'economia circular

Joaquim Serra Rada,¹ Elena Xuriguera Martín¹ i Mònica Martínez López¹
¹Departament de Ciència de Materials i Química Física, Secció de Ciència de Materials

joaquimserra@ub.edu

Programa de doctorat en Enginyeria i Ciències Aplicades



Actualment, tant la fabricació additiva (FA) com la conscienciació mediambiental són temes de gran interès per a la societat. La fabricació additiva per impressió 3D s'ha postulat com una alternativa a la fabricació tradicional, ja que la FA permet la creació ràpida de prototips i el redisseny de les peces. Aquest fet redueix el temps de fabricació, el cost —tant del material com de l'equipament— i la generació de residus. El gran desavantatge és que les peces obtingudes a partir d'aquesta tècnica tenen unes propietats mecàniques pitjors que les obtingudes mitjançant la fabricació tradicional. Tot i això, aquesta mancança es pot resoldre a partir de la utilització de materials compostos, afegint reforços a la matèria primera, els quals, en forma de partícules o de fibres, poden ser d'origen natural o sintètic, ceràmics, metàl·lics o plàstics. Hi ha diferents tècniques dintre de la FA, una de les quals es basa en l'extrusió de material, en què es va dipositant material capa a capa. La fabricació per filament fos (FFF) n'és la principal.

La meua tesi doctoral se centra a utilitzar la tècnica de FFF amb un material compost d'àcid polilàctic (PLA) reforçat amb subproductes d'origen natural, com ara el bambú, les closques d'ametlles i els ossos d'oliva. No només s'avaluarà el comportament mecànic dels productes obtinguts, sinó que també s'elaborarà una anàlisi mediambiental dels processos de síntesi i s'intentarà proposar un model d'economia circular centrat en les propietats obtingudes dels materials estudiats.

PARAULES CLAU: fabricació additiva, bioplàstic, economia circular, anàlisi de cicle de vida, ACV

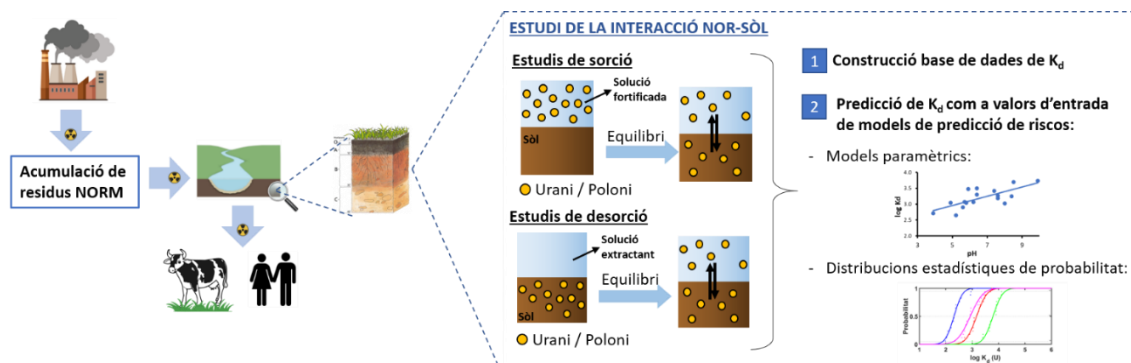
Estudi dels mecanismes d'interacció d'urani i poloni en sòls

Dídac Serraïma López,¹ Anna Rigol Parera¹ i Miquel Vidal Espinar¹

¹ Departament d'Enginyeria Química i Química Analítica, Secció de Química Analítica

didac.serraïma@ub.edu

Programa de doctorat en Química Analítica i Medi Ambient



Els materials radioactius d'origen natural (NORM) es defineixen com a materials que contenen radionúclids d'origen natural (NOR) com l'urani o el poloni, entre d'altres. L'acumulació de residus NORM, que provenen d'activitats industrials, pot comportar la contaminació de sòls i la possible lixiviació de NOR, i representa una amenaça, tant per als ecosistemes com per a la salut humana. De fet, en absència de successos nuclears accidentals, els NOR són responsables de gran part de la dosi radioactiva que rebem els humans.

Per aquest motiu és de gran interès l'estudi de la interacció i els mecanismes pels quals els NOR queden retinguts als sòls o esdevenen mòbils, així com esclarir quines propietats del sòl tenen un pes més elevat a l'hora de predir aquesta interacció sòl-NOR. Amb aquest objectiu, en aquest projecte de tesi doctoral es duran a terme estudis de sorció i de desorció, en què s'estudiarà la interacció de l'urani i el poloni amb diferents sòls de propietats contrastades i amb mostres reals de NORM. Per mitjà d'aquests experiments, es determinaran els coeficients de distribució sòlid-líquid (K_d), un paràmetre clau a l'hora d'explicar l'afinitat entre el sòl i el radionúclid. Finalment, es procedirà a la construcció de models matemàtics i distribucions estadístiques de probabilitat a partir de les dades experimentals i de la literatura, que permetin derivar valors de K_d acurats i dur a terme un assessorament sobre el risc associat a la gestió d'emplaçaments contaminats o potencialment afectats per NORM.

PARAULES CLAU: urani, poloni, NORM, sorció, model de predicció

Evolució de les propietats de canonades de PR-R en servei

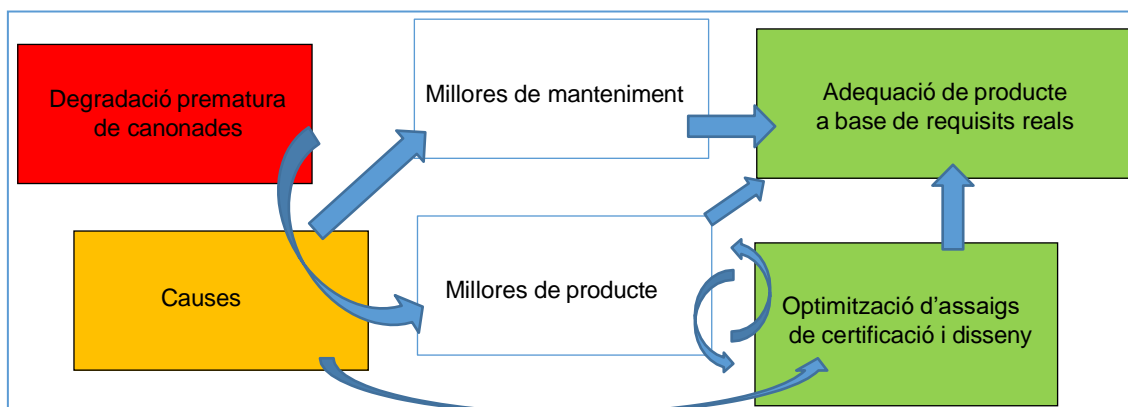
**Josep Maria Ferrer Bruach,¹ Ana Inés Fernández Renna,²
Camila Barreneche Güerisoli² i Laura Sánchez Ruiz¹**

¹ *Departament Tècnic, Italsan*

² *Centre de Disseny i Optimització de Processos i Materials (DIOPMA), Departament de Ciència de Materials i Química Física, Secció de Ciència de Materials*

jmferrer@italsan.com

Programa de doctorat en Enginyeria i Ciències Aplicades



Les canonades són uns components vitals dins de les instal·lacions d'edificis del sector terciari, com són hotels i hospitals. En aquest projecte ens centrem en el comportament termomecànic de l'última proposta de l'empresa Italsan per fer front a les necessitats més exigents que el mercat sol presentar. Actualment, els requisits normatius aporten a l'usuari final propostes que permeten objectivar les capacitats de les diferents propostes. Tot i així, hem trobat la necessitat de millorar l'oferta d'assaigs per aportar resultats més propers a la realitat i que permetin certificar una propietat molt important que no es té en compte: la resistència química o, com en el sector es coneix: la resistència a la degradació termooxidativa. Aquest factor és determinant en instal·lacions d'aigua calenta, que en molts casos tenen una vida útil molt inferior a l'esperada. Per aconseguir els nostres objectius, hem dissenyat i construït una planta pilot totalment monitoritzada per reproduir les mateixes condicions, tant físiques com químiques, que el producte es troba en un cas real. Entre altres aspectes, el disseny ens ha permès extreure a diferents temps mostres de canonada sense haver-nos de preocupar de parar la instal·lació, que és una de les necessitats inicials.

PARAULES CLAU: canonades, degradació, *Legionella*, aigua calenta sanitària

Síntesi de materials funcionals en espais confinats

Gemma Llauradó Capdevila,¹ Roc Matheu² i Josep Puigmartí-Luis^{1,3}

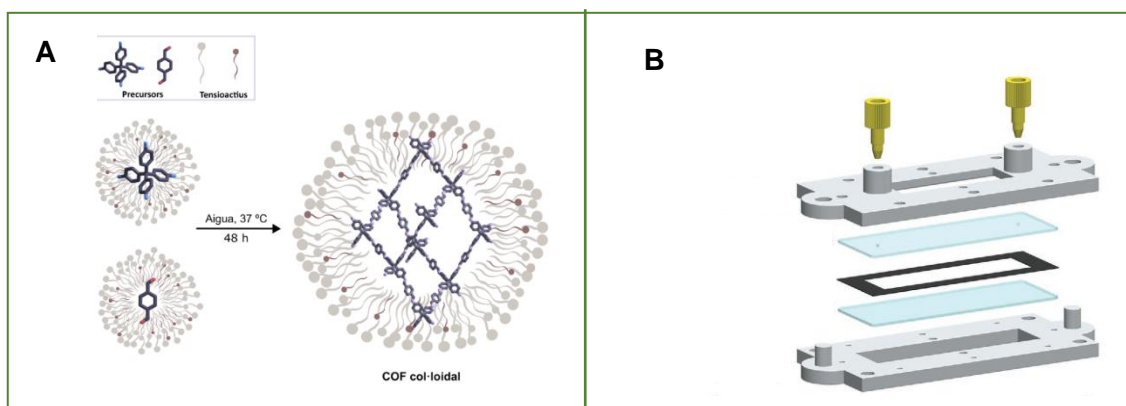
¹Departament de Ciència de Materials i Química Física, Secció de Química Física

²Departament de Química Inorgànica i Orgànica, Secció de Química Inorgànica

³Institució Catalana de Recerca i Estudis Avançats (ICREA)

gemma.llaurado@ub.edu

Programa de doctorat en Nanociències



Els marcs orgànics covalents (COFs) i els marcs orgànics metàl·lics (MOFs) són dues classes de materials emergents, els quals es caracteritzen per ser cristal·lins i porosos. Aquests tipus de materials estan formats a partir de molècules orgàniques (en el cas dels COFs), i d'àtoms metàl·lics (o clústers metàl·lics) i lligands orgànics (en el cas dels MOFs), que actuen com a blocs de construcció. Aquestes unitats es repeteixen al llarg del material, i formen estructures bidimensionals o tridimensionals amb propietats molt atractives en diversos camps d'aplicació. Tanmateix, els mètodes sintètics convencionals comporten processos de formació poc controlats a escala nanomètrica, que contribueixen negativament a les seves propietats. Per aquest motiu, es requereixen processos de síntesi innovadors que permetin el desenvolupament controlat del material. A tall d'exemple, un dels mètodes proposats es basa en la formació d'espais confinats mitjançant la generació de micelles en el medi de reacció (fig. A). D'aquesta manera, la reacció té lloc a l'interior de les cavitats de les micelles, que actuen com a nanocompartiments o nanoreactors. Altrament, l'ús de tecnologies microfluídiques es considera una eina clau per a la formació controlada d'aquests materials. Concretament, els dispositius microfluídics emprats disposen d'una cambra de reacció on se simulen condicions de microgravetat, que tenen grans beneficis en els processos de cristallització (fig. B). En definitiva, ambdós mètodes seran emprats en la formació controlada de COFs i MOFs amb aplicacions en l'àmbit energètic.

PARAULES CLAU: espais de reacció confinats, tecnologies microfluídiques, COFs, MOFs

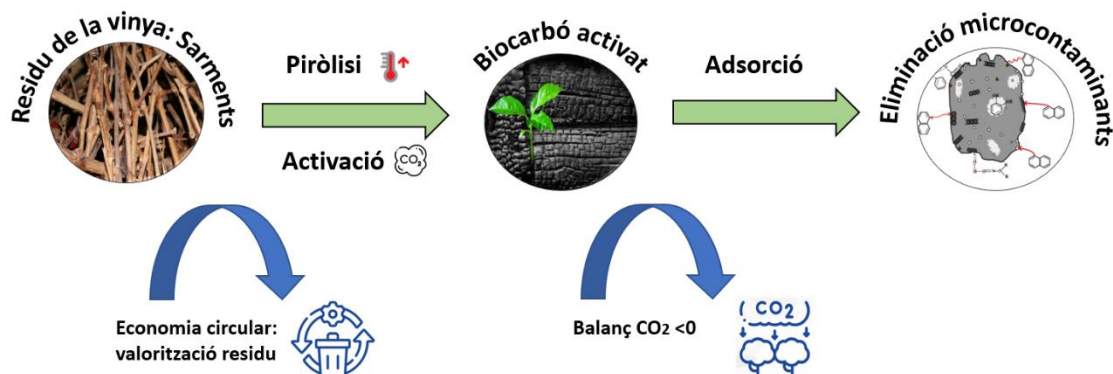
Biocarbó com a eina sostenible per a l'adsorció de microcontaminants en aigües residuals

Pere Llopart Roca,¹ Carme Sans Mazón¹ i Bernardí Bayarri Ferrer¹

¹ *Departament d'Enginyeria Química i Química Analítica, Secció d'Enginyeria Química*

pere.llopart@ub.edu

Programa de doctorat en Enginyeria i Ciències Aplicades



La disponibilitat i la seguretat de l'aigua són dos dels principals reptes als quals ens enfrontem com a societat, primer de tot per l'augment de la seva demanda i, en segon lloc, per la contaminació de molts dels recursos hídrics. Reutilitzar aigua tractada es considera un subministrament fiable alternatiu, però hi calen tractaments adequats per eliminar compostos químics potencialment tòxics i persistents, com els microcontaminants, ja que molts són capaços de passar inalterats pels tractaments biològics convencionals i acabar al medi ambient. Alguns tractaments avançats de l'aigua, com l'adsorció mitjançant biocarbó, han demostrat eficàcia per minimitzar els compostos tòxics presents en aigües residuals municipals. Aquest biocarbó, que representa el material sòlid ric en carboni obtingut durant la piròlisi de la biomassa, es pot obtenir sotmetent diferents fonts de biomassa a altes temperatures (300-1000 °C) en una atmosfera en absència o presència limitada d'oxigen. Posteriorment, mitjançant processos físics o químics, aquest material es pot activar i optimitzar per obtenir un biocarbó activat amb una elevada porositat, àrea superficial i presència de grups funcionals que optimitzin l'adsorció dels microcontaminants que es volen eliminar.

En el present estudi es busca, doncs, avaluar diversos residus com a font de biomassa per a la producció de biocarbó. Els sarments de la vinya representen el primer residu seleccionat. Mitjançant l'ús del disseny experimental, es determinaran quines són les variables que tenen més pes en la seva producció i quines són les condicions d'operació que produeixen el material amb les millors característiques com a material adsorbent de determinats microcontaminants objectiu.

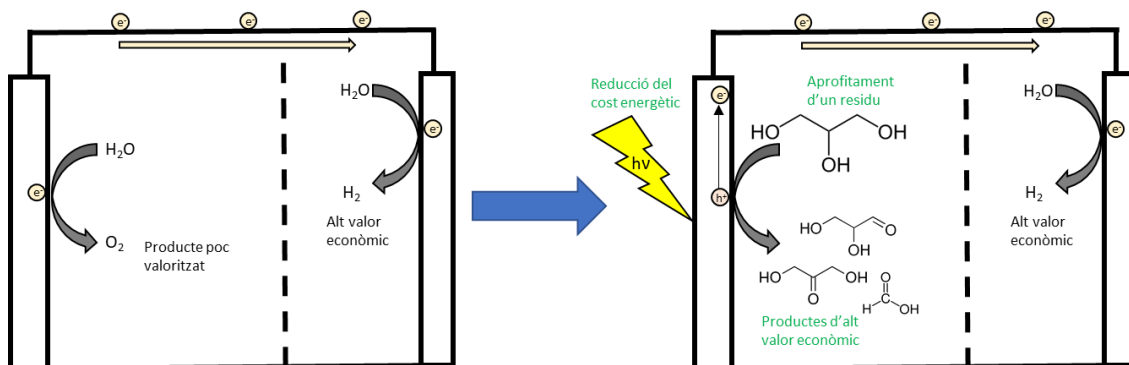
PARAULES CLAU: biocarbó, adsorció, microcontaminants, sarments, piròlisi

Producció d'hidrogen solar a partir del glicerol

Martí Molera Janer,¹ Teresa Andreu Arbella¹ i Cristian Fàbrega Gallego²
¹Departament de Ciència de Materials i Química Física, Secció de Química Física
²Departament d'Enginyeria Electrònica i Biomèdica

mmolera@ub.edu

Programa de doctorat en Electroquímica. Ciència i Tecnologia



La producció d'hidrogen és un procés clau com a nou vector energètic del futur. Malauradament, gran part de la seva producció actual és a partir de la reformació del gas natural o la gasificació del carbó, els quals tenen un elevat impacte ambiental. Per aquest motiu, hi ha un gran interès en el desplegament de les tecnologies de producció d'hidrogen verd, obtingut per vies renovables i no contaminants, principalment per l'electròlisi de l'aigua. Tanmateix, aquest és un procés amb un alt cost energètic, fet que en redueix la viabilitat econòmica. Això és degut principalment a les limitacions cinètiques de la reacció d'evolució d'oxigen, de manera que l'objectiu principal d'aquesta tesi és proposar una estratègia per reduir els costos de producció d'hidrogen.

D'una banda, s'empraran materials semiconductors per tal que el procés aprofiti directament l'energia solar. S'estudiaran les propietats fotoelectroquímiques d'aquests materials i s'optimitzarà la síntesi d'elèctrodes que combinin més d'un material en una estructura tàndem, per tal de captar eficientment la radiació solar.

D'altra banda, se substituirà la reacció d'oxidació de l'aigua per la d'oxidació del glicerol, que és més fàcilment oxidable, cosa que en reduirà el cost energètic. S'estudiaran els mecanismes que intervenen en l'oxidació parcial del glicerol i la seva competitivitat amb l'oxidació de l'aigua. Així, no només es pot obtenir un hidrogen verd més econòmic, sinó que es desenvoluparà un procés d'economia circular aprofitant un dels residus de la indústria del biodièsel, i es valoritzarà per oxidació selectiva cap a productes d'alt valor afegit.

PARAULES CLAU: hidrogen verd, llum solar, semiconductors, valorització, glicerol

Metanació del CO₂ en materials MXens

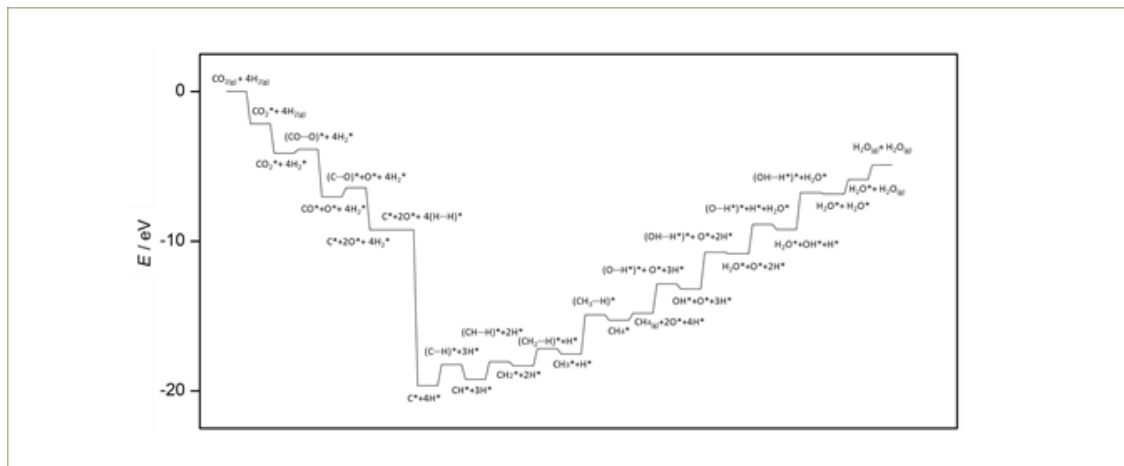
Daniel Dolz García,^{1,2} Ángel Morales-García^{1,2} i Francesc Viñes Solana^{1,2}

¹ Departament de Ciència de Materials i Química Física, Secció de Química Física

² Institut de Química Teòrica i Computacional de la Universitat de Barcelona (IQTCUB)

ddolzgar7@alumnes.ub.edu

Programa de doctorat en Química Teòrica i Modelització Computacional



Els materials MXens han aparegut recentment com a possibles catalitzadors per a diverses reaccions clau, degut a la seva alta capacitat d'adsorbir CO₂, entre les quals la metanació. L'estudi consisteix en una anàlisi multiescala dels aspectes cinètics mitjançant les barreres de dissociació de les molècules involucrades en la reacció, així com la selecció de diverses superfícies MXens on la reacció sigui possible per fer una anàlisi cinètica tipus Montecarlo (en anglès, *kinetic Monte Carlo* o kMC). Com a punt d'inici, trobem que la dissociació del CO₂ en totes les superfícies és un procés exergònic, i en un primer test, en la superfície Ta₂N seleccionada per fer una primera prova del kMC, el perfil d'energia i d'energia de Gibbs denota que la reacció global és exergònica. En aquesta primera superfície, però, no s'ha aconseguit arribar a formar H₂O i CH₄ mitjançant les simulacions kMC, a causa en gran part de les grans barreres energètiques que s'han de superar per formar CH₃ i OH.

PARAULES CLAU: catàlisi heterogènia, MXens, CO₂, càlculs DFT, mètode de Montecarlo cinètic

Xarxes metal·loorgàniques per fer sensors de gasos d'efecte hivernacle

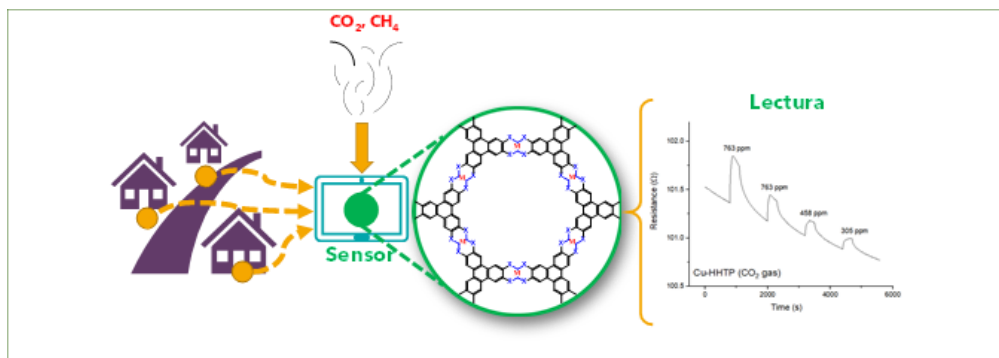
Ignasi Fort Grandas,^{1,2} Albert Romano Rodríguez^{1,2} i Anton Vidal Ferran²

¹ Departament d'Enginyeria Electrònica i Biomèdica

² Departament de Química Inorgànica i Orgànica, Secció de Química Inorgànica

ignfortgra_9@ub.edu

Programa de doctorat en Nanociències



Una de les conseqüències del desenvolupament industrial és l'augment d'emissions de diferents tipus de gasos a l'atmosfera, alguns dels quals són els causants de l'anomenat *efecte hivernacle*. Entre ells, el diòxid de carboni (CO_2) i el metà (CH_4) són de gran importància i es consideren les majors amenaces actualment al planeta. A dia d'avui, els sistemes de seguiment mediambiental emprats per les agències de control nacionals ja són capaços de llegir els nivells d'aquests gasos d'interès. Tanmateix, aquests sistemes són complexos, cars i de gran volum, per la qual cosa només estan instal·lats en llocs específics i fixos. Per tant, l'objectiu del nostre treball és desenvolupar dispositius petits i econòmics energèticament que detectin els nivells de CO_2 i CH_4 i permetin extreure'n models de canvi climàtic més elaborats. Per fer-los, hem basat els dispositius en un tipus de material semiconductor que rep el nom de *xarxa metal·loorgànica*, les propietats electròniques de la qual es veuen afectades en funció del gas al qual s'exposi. Així, s'obté una lectura dels nivells del gas d'interès.

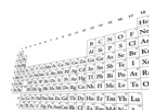
Les xarxes metal·loorgàniques són estructures periòdiques formades per nodes metàl·lics enllaçats indefinidament entre si per lligands orgànics, fins a arribar a formar una xarxa. Aquestes estructures presenten una gran superfície específica i una gran porositat, que les fa ser excel·lents candidates per interactuar amb gasos. Concretament, ens hem centrat en la família dels derivats del trifenílè, ja que és una família de xarxes metal·loorgàniques coneguda per les seves grans propietats elèctriques, de manera que es pot llegir el canvi de conductivitat que presenta el material en ser exposat al CO_2 o CH_4 . Mitjançant la coordinació d'un lligand derivat del trifenílè i un metall de transició (Co, Ni, Cu o Zn), obtenim una xarxa metal·loorgànica en forma de nanopartícules, caracteritzable i apta per a l'estudi del seu potencial com a sensor de gas d'efecte hivernacle.

PARAULES CLAU: xarxes metal·loorgàniques, nanopartícules, gasos d'efecte hivernacle, sensors



Índex de paraules clau

AChE	9	llum solar	16
ACV	11	metalls de transició	10
adsorció	15	mètode de Montecarlo cinètic	17
aigua calenta sanitària	13	microcontaminants	15
Alzheimer	9	model de predicció	12
anàlisi de cicle de vida	11	MOFs	14
automoció	8	multidiana	9
biocarbó	15	MXens	17
bioplàstic	11	nanopartícules	18
càlculs DFT	17	NOR	12
canonades	13	pintura	8
catàlisi	7	piròlisi	15
catàlisi heterogènia	17	polímers	8
catalitzador	10	poloni	12
CO ₂	17	propietats farmacològiques	9
COFs	14	reciclatge	8
degradació	13	sarments	15
dispersió de gasos	6	sEH	9
dissociació	10	semiconductors	16
economia circular	11	sensors	18
enginyeria química	6	simulació	6
espais de reacció confinats	14	sorció	12
estereoselectivitat	7	sostenibilitat	8
fabricació additiva	11	tecnologies microfluídiques	14
fàrmacs	7	tendència	10
fluids	6	transmissió de calor	6
gasos d'efecte hivernacle	18	urani	12
glicerol	16	valorització	16
hidrogen verd	16	xarxes metal·loorgàniques	18
<i>Legionella</i>	13		





UNIVERSITAT DE
BARCELONA

V Tesimarató de Química

Jornada de comunicació de joves investigadors de la Facultat de Química
(22 de novembre de 2022)

Organització de la Tesimarató i edició del llibre de resums:
Comissió de Dinamització Lingüística de la Facultat de Química

Data d'edició: febrer de 2023



Aquesta obra està subjecta a una llicència de Creative Commons
Reconeixement-NoComercial-SenseObraDerivada.

