

VI Tesimarató de Química

**Jornada de comunicació de joves
investigadors de la Facultat de Química**

Llibre de resums | 2023

Comissió de Dinamització Lingüística
de la Facultat de Química





Organització de la VI Tesimarató

Comissió de Dinamització Lingüística de la Facultat de Química

Membres de la Comissió de Dinamització Lingüística

Dolors Velasco Castrillo

secretària de la Facultat i presidenta de la Comissió

Joan Dosta Parras

representant del professorat de la Secció d'Enginyeria Química

Elisabet Fuguet Jordà

representant del professorat de la Secció de Química Analítica

Jessica Giró Paloma

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

Montserrat Terrazas Martínez

representant del professorat de la Secció de Química Orgànica

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 la Secretaria d'Estudiants i Docència

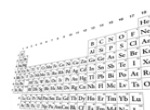
Núria Castells Quintana

representant dels Serveis Lingüístics a la Facultat de Química

Amb la col·laboració dels Serveis Lingüístics de la Universitat de Barcelona

Il·lustració de la portada

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



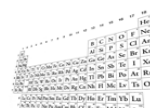


VI Tesimarató de Química

21 de novembre de 2023

Aula Magna Enric Casassas de la Facultat de Química

- 1 Piedad Herrera Ramírez Nous fotosensibilitzadors basats en complexos de polipiridil Ru(II) amb potencial activitat anticancerígena
- 2 Josep Boter Carbonell Hidrogen verd. Font d'energia per a un futur immediat
- 3 Francisco A. Gómez Mudarra Transició sostenible: explorant alternatives als metalls preciosos en catàlisi homogènia
- 4 Sergi Peña Picola Utilització de residus orgànics municipals com a matèria primera per generar bioproductes
- 5 Ariadna Vila Planas Nova eina oligonucleotídica multidiana contra patologies complexes amb múltiples dianes terapèutiques
- 6 Verónica Belén Aguilar Pozo Recuperem el fòsfor
- 7 Carlos Mario Olaya Rincón Els bioplàstics realment són biodegradables?
- 8 Judit Lloreda Rodes Preparació electroquímica de catalitzadors per transformar biogàs en hidrogen





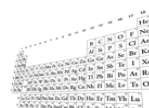
Presentació

El 21 de novembre de 2023 va tenir lloc la sisena jornada de Tesimarató organitzada per la Comissió de Dinamització Lingüística de la Facultat de Química de la Universitat de Barcelona. En aquesta jornada, com en les anteriors, els joves investigadors divulguen la recerca que fan en diferents camps de la química, i ho fan en quatre minuts. L'objectiu és comunicar les metes i els avenços que es plantegen en els seus projectes de tesi doctoral a un públic general: des del més novell en coneixements químics fins al més especialitzat en diferents vessants de la química.

D'aquesta manera, cadascú, independentment dels seus coneixements científics, pot descobrir la recerca que es fa a la Facultat i obtenir també, a partir d'aquestes microconferències, idees noves sobre els temes punters de la recerca actual en els diversos camps en què la química té un paper protagonista: des de l'àrea de nous medicaments i biomedicina fins als nous materials, passant pel desenvolupament de processos per a la protecció del medi ambient i la millora de la sostenibilitat global del planeta.

Es tracta, en definitiva, de saber comunicar i promoure l'interès per la recerca i la ciència, tant en l'àmbit acadèmic i científic com en el si de la nostra societat, i de fer-ne una experiència compartida i interdisciplinària. Des de la universitat, com a lloc per excel·lència per a la generació i l'intercanvi de coneixement, el posem a l'abast de tothom. Amb aquest esperit, publiquem ara les contribucions a la sisena jornada de comunicació de joves investigadors de la Facultat de Química i agraïm la implicació de tothom que ha fet possible la VI Tesimarató de la Facultat de Química.

Comissió de Dinamització Lingüística
de la Facultat de Química



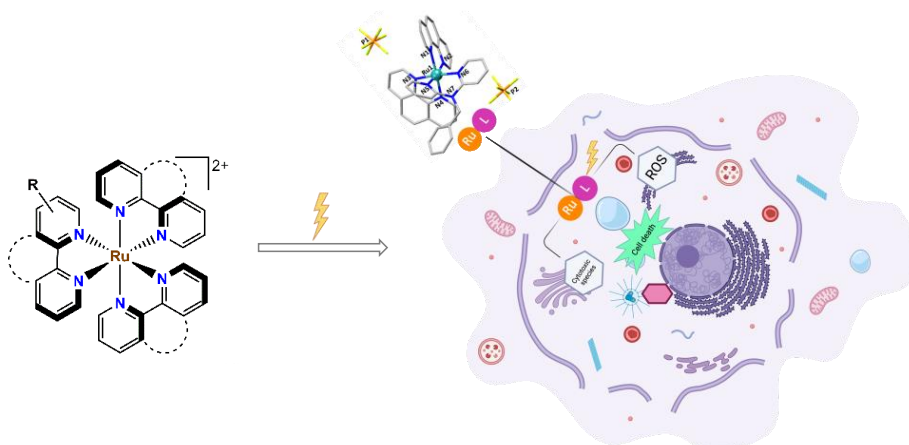
Nous fotosensibilitzadors basats en complexos de polipiridil Ru(II) amb potencial activitat anticancerígena

Piedad Herrera-Ramírez, Patrick Gamez

Departament de Química Inorgànica i Orgànica, Secció de Química Inorgànica

piEDAD.herrerar@ub.edu

Programa de doctorat en Química Orgànica



El càncer és una de les malalties més diagnosticades en l'últim segle a tot el món, amb 9,9 milions de morts el 2020. El desenvolupament d'agents anticancerígens eficients s'ha convertit en una necessitat urgent, i la química bioinorgànica és un camp d'investigació útil per desenvolupar noves estratègies per fer front al càncer. En aquest sentit, les fotoquimioteràpies, com per exemple la teràpia fotodinàmica (PDT) i la quimioteràpia fotoactivada (PACT), són una alternativa a la quimioteràpia clàssica contra el càncer. Es basen en l'activació d'un fotosensibilitzador (PS) mitjançant irradiació local amb llum per reduir els efectes secundaris. La investigació sobre compostos metàl·lics en aquestes teràpies ha demostrat que es poden explotar les propietats úniques dels ions metàl·lics. En aquest context, els compostos de ruteni(II) representen una família molt prometedora de complexos fotoactivables, degut a la capacitat per localitzar la diana terapèutica i la possibilitat de ser compatibles amb entorns hipòxics, com ara els tumors.

S'ha desenvolupat una nova família de complexos amb lligands polipiridil de ruteni(II), aprofitant les propietats anticancerígenes ben establertes dels complexos de metalls de transició i les riques propietats fotofísiques de lligands orgànics particulars. Se'n van obtenir els compostos i se'n va investigar el comportament fotoquímic, la interacció amb el DNA i les propietats fotocitotòxiques associades. Els compostos no eren tòxics en la foscor, però es van convertir en fototòxics quan es van irradiar. Finalment, val la pena esmentar que aquests fotosensibilitzadors són solubles en aigua, altament fotoestables i es poden obtenir a partir de síntesis senzilles.

PARAULES CLAU: fotoquimioteràpia, agent anticancerigen, fotosensibilitzador, complexos de ruteni(II), citotoxicitat

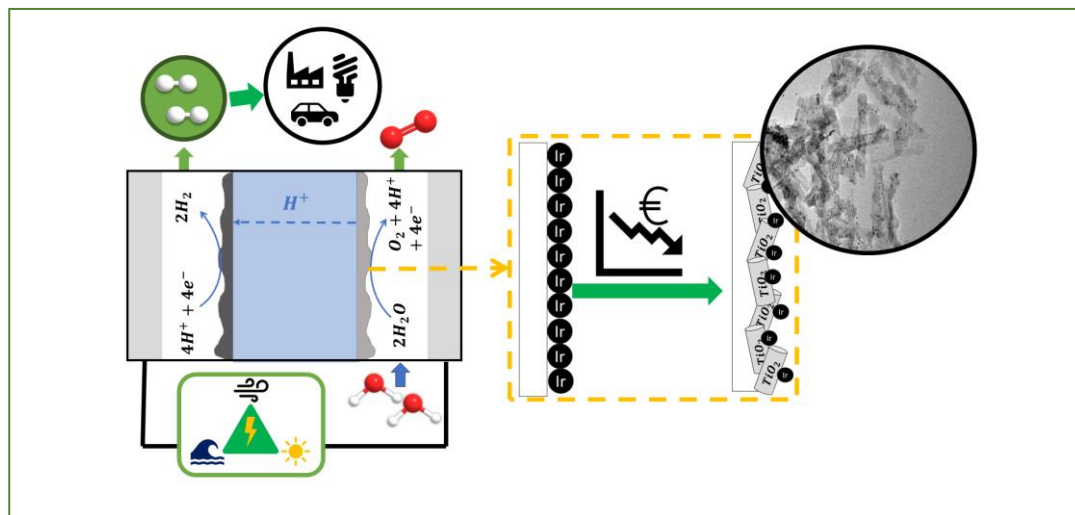
Hidrogen verd. Font d'energia per a un futur immediat

Josep Boter Carbonell, Teresa Andreu Arbella, Pere Lluís Cabot Julià,
Maria Sarret Pons

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

j.boter@ub.edu

Programa de doctorat en Electroquímica. Ciència i Tecnologia



L'hidrogen és un vector energètic destinat a ser el combustible del futur. Actualment, la major part de H_2 es produeix a partir del gas natural, de manera que es genera una gran quantitat de CO_2 . Mitjançant l'electròlisi de l'aigua es pot obtenir H_2 pur, però l'aplicació d'un corrent elèctric encareix el producte. Si s'utilitzen fonts de corrent elèctric d'energia renovable, no hi ha emissions de CO_2 i així s'obté el que s'anomena *hidrogen verd*.

En el transcurs dels anys s'han desenvolupat diferents dispositius; l'electròlisi alcalina és la més avançada. Degut a la seva simplicitat, compacitat i absència de líquids corrosius o altres additius, l'electrolitzador d'aigua més atractiu actualment és el de membrana de bescanvi protònic (PEMWE), en què el reactiu és només aigua. El problema principal que presenta és la necessitat de metalls preciosos (Pt, al càtode, i Ir o Ru, a l'ànode), cars i escassos, com a catalitzadors. Cal fer un esforç per reduir costos dels dispositius, per exemple disminuint el consum d'energia elèctrica i la quantitat de materials necessaris.

Aquest treball tracta de l'oxidació de l'aigua per produir O_2 , reacció limitant de l'electròlisi (que requereix un major sobrepotencial, origen del consum energètic). L'objectiu principal és reduir-ne el cost econòmic, tot disminuint la quantitat de Ir amb la síntesi de nanopartícules disperses sobre suports de baix preu, porosos, conductors i estables, però mantenint-ne o incrementant-ne l'activitat catalítica. Els materials de suport seran nanotubs de TiO_2 dopats amb heteroàtoms com el nitrogen per reduir la seva resistència elèctrica.

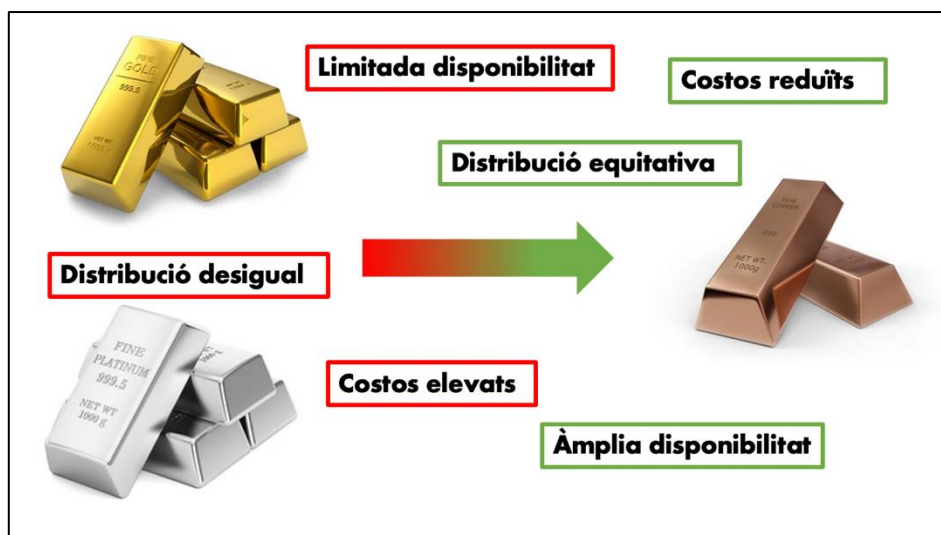
PARAULES CLAU: electroquímica, electrolitzador PEM, hidrogen verd, catàlisi, nanomaterials

Transició sostenible: explorant alternatives als metalls preciosos en catàlisi homogènia

Francisco A. Gómez-Mudarra, Gabriel Aullón, Jesús Jover
 Departament de Química Inorgànica i Orgànica, Secció de Química Inorgànica
 i Institut de Química Teòrica i Computacional

f.gomez@ub.edu

Programa de doctorat en Química Teòrica i Modelització Computacional



En l'actualitat, la gran majoria dels processos químics essencials per a la producció industrial de productes bàsics es basa en gran part en la catàlisi, un procés en què els metalls tenen un paper crucial. Metalls com el ruteni, el rodi, el pal·ladi i el platí, coneguts com a *metalls preciosos*, han tingut un paper destacat en el desenvolupament de la catàlisi homogènia. No obstant això, la seva utilització presenta desafiaments significatius, com ara una disponibilitat limitada i distribució desigual en el planeta, la qual cosa dona lloc a costos elevats i n'amença la disponibilitat futura. A més a més, la seva toxicitat afecta directa i indirectament la salut i el medi ambient.

Una solució prometedora consisteix a migrar cap a metalls de la primera sèrie, com ara el coure i el níquel, que ofereixen avantatges econòmics i mediambientals. Malgrat el seu potencial, aquesta transició troba obstacles, especialment en el control de reaccions catalítiques i l'estabilitat del catalitzador. Tot i així, investigacions recents estan explorant la substitució de metalls preciosos per alternatives menys oneroses i perjudicials, amb resultats encoratjadors.

PARAULES CLAU: catàlisi homogènia, reactivitat computacional, formació d'enllaços C—C, química organometàl·lica

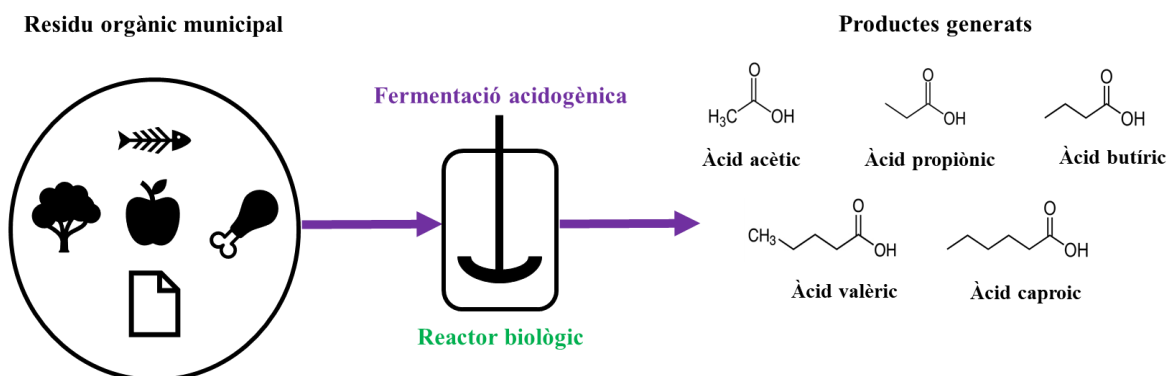
Utilització de residus orgànics municipals com a matèria primera per generar bioproductes

Sergi Peña Picola, Sergi Astals Garcia, Joan Dosta Parras

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

spenapicola@ub.edu

Programa de doctorat en Enginyeria i Ciències Aplicades



A les ciutats es genera una gran quantitat de residus orgànics que poden esdevenir una matèria primera per a diferents processos. Davant del paradigma actual d'economia circular, cal concebre els residus com a recursos i fer la transició d'instal·lacions de tractament de residus cap a biorefineries. La tesi doctoral se centra en el tractament de la fracció orgànica de residus municipals en fermentadors sota condicions anaeròbiques, on es desenvolupa un cultiu microbià mixt a partir dels mateixos microorganismes presents en aquests residus. La finalitat és generar productes d'interès, com ara àcids grassos volàtils (AGV), que són molècules de 2 a 6 carbonis amb un grup carboxil ($-\text{COOH}$) i amb una demanda creixent al mercat, que se satisfà majoritàriament mitjançant processos petroquímics, malgrat que té un fort impacte mediambiental.

La recerca té per objectiu avaluar la producció continuada d'àcids grassos volàtils a partir d'un corrent residual d'una instal·lació de tractament de residus orgànics municipals de l'Àrea Metropolitana de Barcelona. A més, s'estudia l'efecte de diferents paràmetres del procés, com ara la temperatura de treball, la taxa de càrrega orgànica i el temps de residència del residu al fermentador, entre d'altres. Igualment, s'analitzen les poblacions microbianes que es desenvolupen en el procés de fermentació i la seva evolució. Per tant, la tesi doctoral pretén caracteritzar i millorar la generació d'àcids grassos volàtils a partir de residus orgànics amb una descripció detallada del procés. Els resultats obtinguts fins ara mostren que, tot i la variabilitat dels residus orgànics municipals, s'assoleixen rendiments de producció d'àcids grassos volàtils elevats i estables.

PARAULES CLAU: àcids grassos volàtils, economia circular, fermentació, microbiologia, residus orgànics municipals

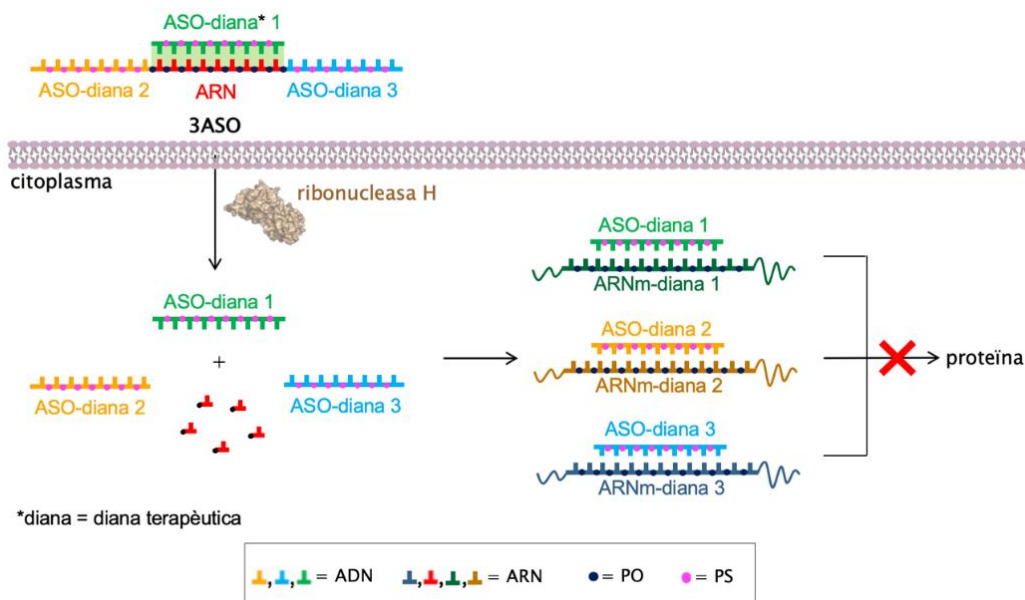
Nova eina oligonucleotídica multidiana contra patologies complexes amb múltiples dianes terapèutiques

Ariadna Vila Planas, Montserrat Terrazas Martínez

Departament de Química Inorgànica i Orgànica, Secció de Química Orgànica

arivila@ub.edu

Programa de doctorat en Química Orgànica



Avui en dia les teràpies combinades tenen un elevat interès farmacològic, degut al seu paper fonamental en la lluita contra patologies complexes en què intervenen múltiples vies de senyalització, com ara el càncer i processos de resistència farmacològica associats al tractament. L'estratègia terapèutica més emprada per afrontar aquestes patologies consisteix en l'administració de combinacions de fàrmacs de molècula senzilla dirigits a «atacar» cadascuna de les vies de senyalització implicades en la malaltia. Malauradament, les combinacions de fàrmacs actuals presenten alguns problemes, com ara efectes de toxicitat, que en limiten l'ús clínic. Per fer front a aquests obstacles, hem dissenyat una nova eina oligonucleotídica multidiana (3ASO) que pot ser dissociada per l'enzim intracel·lular ribonucleasa H (present en totes les cèl·lules) una vegada entra a la cèl·lula i alliberar simultàniament tres fàrmacs oligonucleotídics de tipus antisentit (en anglès, ASO). Cadascun d'ells és complementari a l'ARN missatger d'una de les proteïnes (dianes terapèutiques) implicades en les múltiples vies de senyalització del procés tumoral. Aquesta tecnologia ens ha permès inhibir simultàniament l'expressió de tres proteïnes responsables de la proliferació tumoral en càncer de mama HER2 positiu (HER2, Hsp27 i Akt) i obtenir bons nivells d'activitat antiproliferativa en cèl·lules tumorals, així com valors de toxicitat nuls en cèl·lules no tumorals. A més, amb aquest estudi hem descobert un nou mecanisme d'acció de l'enzim ribonucleasa H que no havia estat estudiat fins ara.

PARAULES CLAU: oligonucleòtids, inhibició, càncer, resistència farmacològica, multidiana

Recuperem el fòsfor

Verónica Belén Aguilar Pozo,^{1,2} Josep Maria Chimenos Ribera,¹ Sergi Astals Garcia²

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

² Departament d'Enginyeria Química i Química Analítica, Secció d'Enginyeria Química

veronicaguilar@ub.edu

Programa de doctorat en Enginyeria i Ciències Aplicades

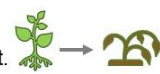
Recuperem el FÒSFOR

Extracció del fòsfor (P)



El P és un recurs **limitat** i **irreemplaçable**

- El P s'esgotarà al cap de **100 anys**.
- **95 %** del P produït s'utilitza com a fertilitzant.



Recuperació del P



Estacions depuradores d'aigües residuals



Mitjançant → La precipitació d'**estruvita** ($\text{MgNH}_4\text{PO}_4 \cdot 6\text{H}_2\text{O}$)

Pot arribar a **satisfer** → **15-20 %** de la demanda mundial

Estudis sobre el procés:

- És factible
- Reutilització d'estruvita com a fertilitzant
- Té limitacions: **cost dels reactius**
↳ Font de **Mg** i reactiu bàsic

Proposta

Subproducte de MgO industrial



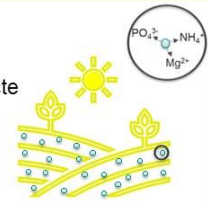
- 50-65 % de MgO
- Reactiu bàsic
- 10 vegades més barat

Resultats

- ✓ 89-97 % de P
- ✓ 75-85 % d'estruvita
- ✓ **Recuperació** de nutrients
- ✓ **Valorització** d'un subproducte



Economia circular



El fòsfor és un nutrient essencial per a les persones i les plantes. L'extracció de fòsfor augmenta a mesura que la població mundial també ho fa. Estudis de prospecció geològica mostren que es podria esgotar en uns cent anys. Una possible solució per pal·liar aquest dèficit és la recuperació de fòsfor en forma d'estruvita en estacions depuradores d'aigües residuals (EDAR). La recuperació en les EDAR podria satisfer un 15-20 % de la demanda mundial, ja que l'estruvita pot ser utilitzada posteriorment com a fertilitzant. Actualment, ja hi ha plantes de recuperació d'estruvita, però el procés està limitat pel cost dels reactius que s'hi han d'afegir (magnesi i un reactiu bàsic per augmentar el pH). Aquesta tesi proposa estudiar la valorització d'un subproducte de MgO industrial amb un contingut de MgO del 50-65 %. Aquest subproducte pot ser emprat com a font de magnesi i reactiu bàsic alhora, i el seu ús podria fer abaratir costos, recuperar nutrients i valoritzar un subproducte, tot això dins de l'àmbit de l'economia circular.

PARAULES CLAU: economia circular, estruvita, recuperació de nutrients, subproducte de MgO industrial

Els bioplàstics realment són biodegradables?

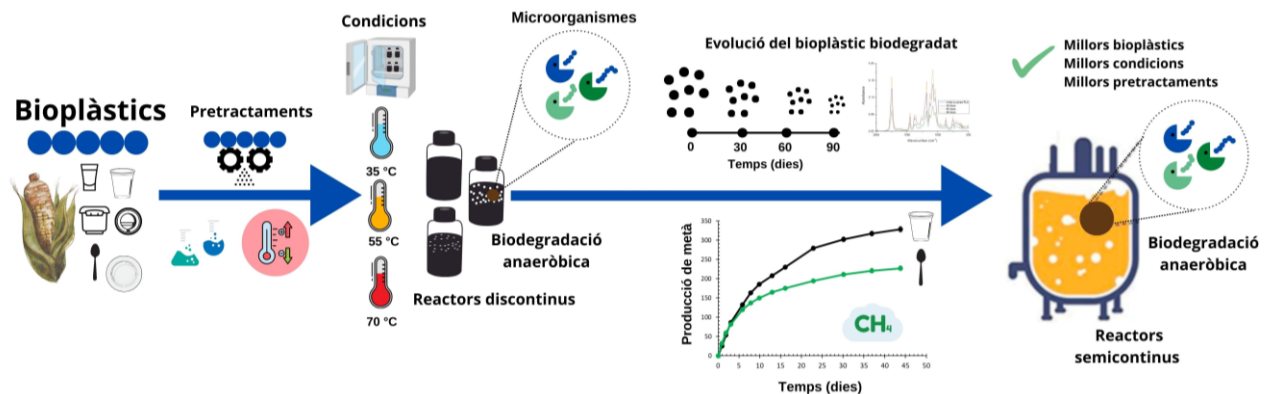
Carlos Mario Olaya Rincón,^{1,2} Mònica Martínez López,² Sergi Astals Garcia¹

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

²Departament de Ciència de Materials i Química Física, Secció de Ciència i Enginyeria de Materials

molaya@ub.edu

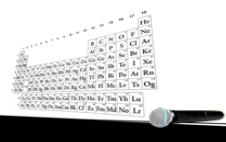
Programa de doctorat en Enginyeria i Ciències Aplicades



La preocupació creixent per la contaminació per plàstics i l'impacte d'aquests materials en el medi ambient ha fomentat l'interès pels plàstics biodegradables (*bioplàstics*). En comparació amb els plàstics convencionals, els bioplàstics ofereixen alternatives de gestió al final de la seva vida útil com ara la digestió anaeròbica (DA), en absència d'oxigen, i el compostatge, en presència d'oxigen. En aquest context, els sistemes de DA emergeixen com una perspectiva prometedora en la biodegradació de bioplàstics, alhora que s'obté energia renovable en forma de metà. Malauradament, hi ha una percepció equivocada dels bioplàstics entre la població, amb la creença errònia que, quan arriben al medi ambient, es degraden per si mateixos i són inofensius per al medi i la fauna. Aquesta percepció pot influir negativament en la consciència ambiental, ja que el prefix *bio-* pot indicar bé que la matèria primera és d'origen biològic o bé que el seu final de vida útil pot ser la degradació biològica. Si ens centrem en el final de vida, el fet que un polímer sigui biodegradable significa que es pot degradar mitjançant microorganismes, però no per tots ni en qualsevol condició.

En aquesta tesi es pretén avaluar la biodegradabilitat anaeròbica de diversos bioplàstics i la seva conversió a metà. Mitjançant l'ús del disseny experimental, es duran a terme experiments discontinus de digestió anaeròbica amb els principals polímers biodegradables, com ara el PLA (àcid polilàctic) i el PHA (polihidroxialcanoat), així com mesclades comercials disponibles en el mercat actual. Aquests experiments es faran en condicions mesofíliques (35 °C), termofíliques (55 °C) i hipertermofíliques (70 °C). A més, s'analitzarà l'efecte de possibles pretractaments (mecànics, tèrmics i termoquímics) en el rendiment de la biodegradació. Igualment s'analitzaran els canvis en l'estructura dels bioplàstics i les seves propietats tèrmiques durant el procés de digestió anaeròbica. Finalment, s'avaluaran les millors condicions, l'estabilitat i el comportament de la biodegradació dels bioplàstics en un sistema semicontinu mitjançant bioreactors de laboratori.

PARAULES CLAU: plàstics, biodegradable, bioplàstics, biodegradabilitat, digestió anaeròbica



Preparació electroquímica de catalitzadors per transformar biogàs en hidrogen

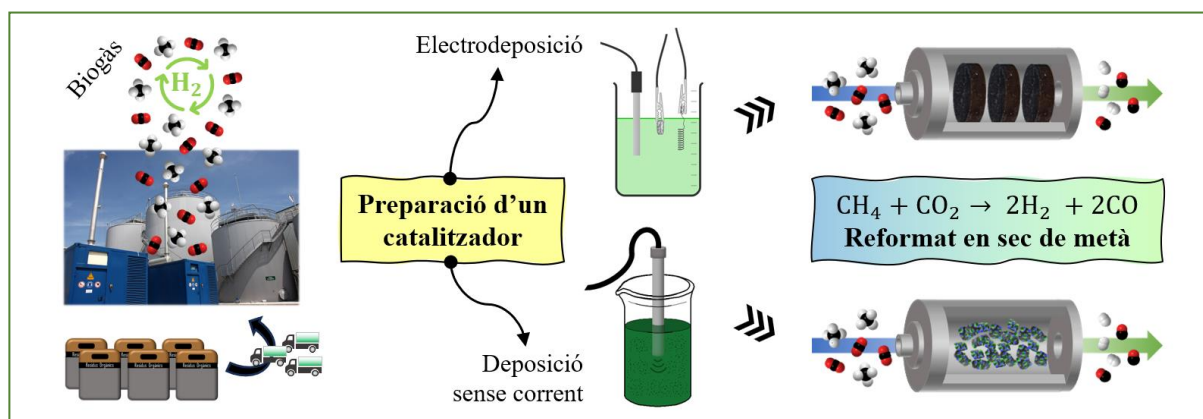
Judit Lloreda Rodes,^{1,2} Vanessa Abad Cuñado,² Elvira Gómez Valentín,¹
Albert Serrà i Ramos¹

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

² Consorci per a la Gestió dels Residus del Vallès Oriental

juditlloreda@ub.edu

Programa de doctorat en Electroquímica. Ciència i Tecnologia



L'obtenció de biogàs (mescla de metà i diòxid de carboni), per digestió anaeròbica de residus domèstics orgànics, és un clar exemple de com aprofitar allò que com a societat descartem. Si continuem el procés d'economia circular, transformant-lo de manera sostenible en hidrogen, la valorització augmenta. L'hidrogen és un gas clau per a la descarbonització de l'energia, però la seva producció en l'àmbit industrial no sempre resulta senzilla. Les baixes eficiències i les altes temperatures necessàries, com en el reformat en sec de metà (RSM), en són els obstacles principals. Per això resulta imprescindible l'ús d'un catalitzador. L'objectiu d'aquesta tesi és la preparació electroquímica de nous materials, de base níquel, que puguin actuar com a catalitzadors de la reacció RSM per produir hidrogen. L'electroquímica ha de facilitar el posterior escalat en l'àmbit industrial d'aquest procés. La síntesi s'aborda per dues vies: electrodeposició sobre substrats d'acer inoxidable, i deposició sense corrent (*electroless*) sobre partícules micro- i nanomètriques magnètiques, amb l'objectiu de maximitzar l'àrea superficial del catalitzador. L'eficiència, la conversió i la selectivitat dels materials preparats es testaran per a la reacció RSM. Com que els substrats sobre els quals es disposa electroquímicament són de caràcter magnètic, en etapes posteriors es planteja substituir el subministrament tèrmic d'energia per un d'origen magnètic, utilitzant un equip d'inducció magnètica que es preveu que permetrà assolir altes temperatures amb consums energètics baixos.

PARAULES CLAU: hidrogen sostenible, preparació electroquímica, catalitzador, biogàs, reformat en sec de metà

Índex de paraules clau

àcids grassos volàtils	8
agent anticancerigen	5
biodegradable	11
biodegradabilitat	11
biogàs	12
bioplàstics	11
càncer	9
catàlisi	6
catàlisi homogènia	7
catalitzador	12
citotoxicitat	5
complexos de ruteni(II)	5
digestió anaeròbica	11
economia circular	8, 10
electrolitzador PEM	6
electroquímica	6
estruvita	10
fermentació	8
formació d'enllaços C—C	7
fotoquimioteràpia	5
fotosensibilitzador	5
hidrogen sostenible	12
hidrogen verd	6
inhibició	9
microbiologia	8
multidiana	9
nanomaterials	6
oligonucleòtids	9
plàstics	11
preparació electroquímica	12
química organometàl·lica	7
reactivitat computacional	7
recuperació de nutrients	10
reformat en sec de metà	12
residus orgànics municipals	8
resistència farmacològica	9
subproducte de MgO industrial	10



UNIVERSITAT DE
BARCELONA

VI Tesimarató de Química

Jornada de comunicació de joves investigadors de la Facultat de Química
(21 de novembre de 2023)

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

Data d'edició: març de 2024



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

