

VII Tesimarató de Química

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

Llibre de resums | 2024



Organització de la VII Tesimarató

Comissió de Dinamització Lingüística de la Facultat de Química

Membres de la Comissió de Dinamització Lingüística

Núria Escaja Sánchez

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 Villafuela

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

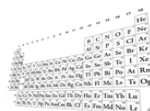
Núria Castells Quintana

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)



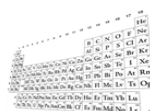


VII Tesimarató de Química

19 de novembre de 2024

Aula Magna Enric Casassas de la Facultat de Química

- | | |
|------------------------------|--|
| ① Mar García Del Amo | Sistemes luminescents supramoleculars per aplicacions a l'infraroig proper (NIR) |
| ② Joel Torres Andrés | Col·loides actius controlats per camps magnètics |
| ③ Pol Vilariño Casaus | Electrosíntesi de catalitzadors per a la transformació de residus forestals |
| ④ Joan Serra Castelló | Relaxació lenta de la magnetització en complexos de coordinació amb $S=1/2$ |
| ⑤ Andrés Rodríguez Gallego | Materials piezoelèctrics en conformació multicapa |
| ⑥ Jiawei Gao | Metodologies asimètriques en reaccions pericíclics catalitzades per níquel |
| ⑦ Sergio Caballero Gutiérrez | Química de coordinació per a sistemes de processament d'informació quàntica |
| ⑧ Josep Pagès Rebull | Autenticació de productes alimentaris mitjançant mètodes cromatogràfics |
| ⑨ Joan Torrent Llovera | Integració de qbits d'espín molecular en sistemes multidimensionals |
| ⑩ Yaiza Martínez Medina | Optimització de rendiments quàntics amb nous fotocatalitzadors |
| ⑪ Jordi Martínez Morató | Coordinació multifuncional i arquitectures supramoleculars per a aplicacions espintròniques |
| ⑫ Nerea Morante del Pino | Condensadors d'alt rendiment energètic basats en materials ferroelèctrics |
| ⑬ Carlos Alberto Vielma Leal | Circularitat de residus: cap a nous sistemes sostenibles |
| ⑭ Marc Vergés Vilarrubia | Estudi i confinament de matèria activa |
| ⑮ Arnau Oliveras Tramunt | Receptors de membrana sintètics per a la transducció de senyal artificial a través de capes lipídiques |
| ⑯ David Vera Rivera | Desenvolupament de microcàpsules amb residus plàstics per contenir PCM |





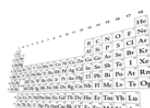
Presentació

El 19 de novembre de 2024 va tenir lloc la setena edició de la Tesimarató de Química, una jornada anual de divulgació científica organitzada per la Comissió de Dinamització Lingüística (CDL) de la Facultat de Química. Aquesta activitat té com a objectiu principal promoure la comunicació científica en català entre els doctorands dels diferents programes de doctorat de la Facultat, impulsant-los a compartir de manera clara i concisa els objectius i avenços de les seves tesis doctorals.

Des de la seva primera edició el 2018, la Tesimarató ha estat un espai en què els doctorands presenten les seves recerques a un públic ampli, no especialitzat, i ho fan d'una manera atractiva, rigorosa i comprensible. Aquest format breu i dinàmic de presentacions, que no supera els quatre minuts, posa a prova la capacitat dels investigadors per comunicar de manera efectiva els elements essencials del seu treball, i converteix la jornada en una oportunitat d'aprenentatge compartit per a tots els assistents.

Amb aquest recull de resums, publiquem les aportacions de la setena edició de la Tesimarató. Aquestes contribucions representen línies de recerca punteres en el camp de la química, amb un gran potencial per generar avenços significatius en diverses àrees, com ara els materials avançats, la seguretat alimentària, la química sostenible o la química verda, entre d'altres. A més, aquest llibre de resums té com a principal objectiu divulgar la recerca que es fa a la Facultat i retornar a la societat els coneixements generats en els programes de doctorat. Aquesta jornada ha de servir, per tant, perquè la divulgació científica i la curiositat col·lectiva continuïn creixent, promovent el coneixement i l'interès per la ciència a tots els nivells.

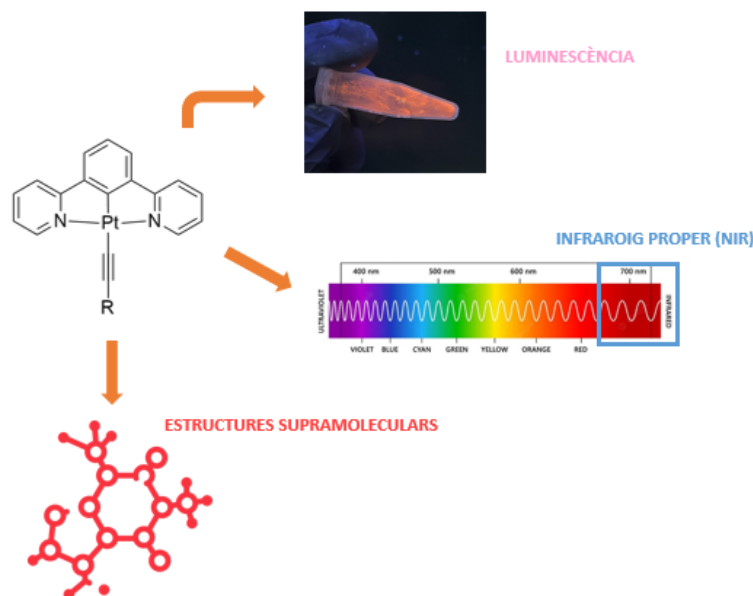
Comissió de Dinamització Lingüística
de la Facultat de Química



Sistemes luminescents supramoleculars per aplicacions a l'infraroig proper (NIR)

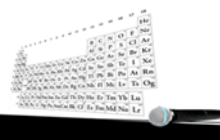
Mar García Del Amo, Andrea Pinto Martínez i Laura Rodríguez Raurell
Departament de Química Inorgànica i Orgànica, Secció de Química Inorgànica

mgarcide162@alumnes.ub.edu
Programa de doctorat en Química Orgànica



La luminescència és un procés en el qual una molècula absorbeix i emet llum com a resposta quan s'hi fa incidir un feix de llum. Aquest fenomen es produeix en una sèrie de materials naturals i artificials, i està associat al moviment d'electrons dins els àtoms o molècules. Per tal de millorar aquesta emissió, es poden fer algunes modificacions internes (dins les molècules) i externes (interaccions entre les molècules). Tot això es veu afavorit gràcies a la química supramolecular, una àrea de recerca d'interès científic creixent que permet modular les propietats dels compostos. També permet dissenyar estructures basades en les interaccions entre molècules que tinguin diferents grups funcionals, com ara el platí, el qual dona lloc a interaccions febles intermoleculars. Aquestes interaccions, anomenades *supramoleculars*, són la base de les propietats resultants. En particular, es coneix que el platí produeix un augment de la luminescència i també pot produir un desplaçament de l'emissió cap a la zona de l'espectre anomenada *infraroig proper* (NIR). Aquest tipus de compostos emissors han guanyat importància en diferents tipus d'aplicacions pràctiques com ara la bioimatge, la teràpia fotodinàmica i les aplicacions tecnològiques. En aquesta tesi doctoral s'estan estudiant diferents compostos de platí per trobar diferents condicions que permetin obtenir un augment de la luminescència, així com un desplaçament de l'emissió cap a la zona de l'infraroig proper (NIR).

PARAULES CLAU: luminescència, química supramolecular, infraroig proper, Pt(II)



Col·loides actius controlats per camps magnètics

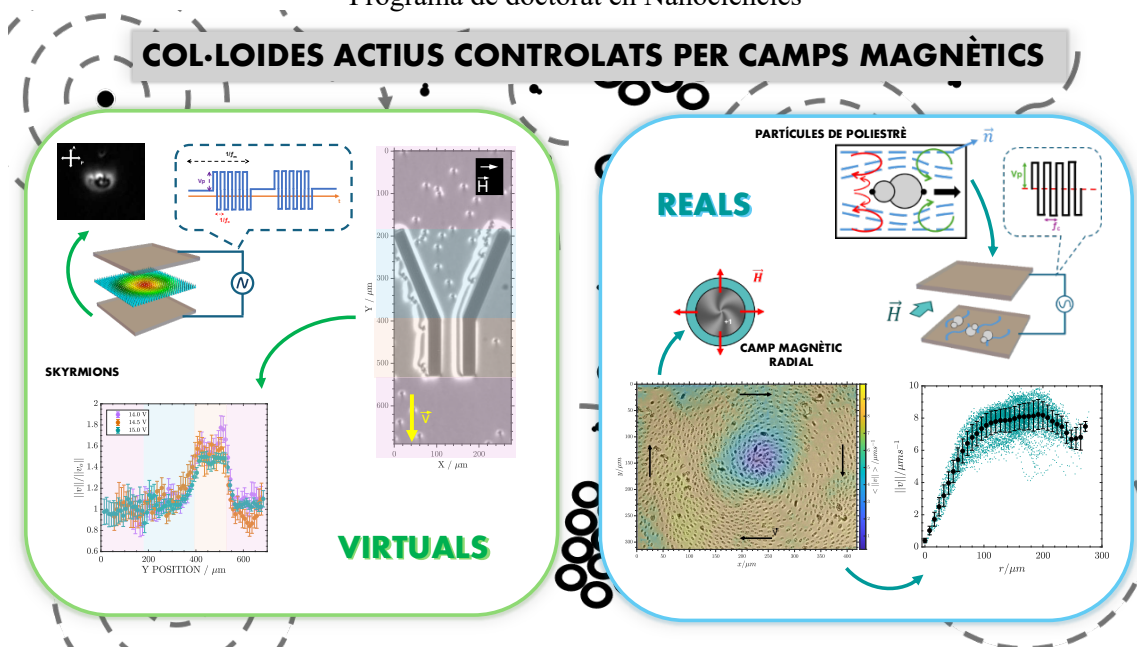
Joel Torres Andrés i Jordi Ignés Mullol

Departament de Ciència de Materials i Química Física, Secció de Química Física
i Institut de Nanociència i Nanotecnologia de la Universitat de Barcelona

joel.torres@ub.edu

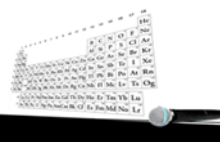
Programa de doctorat en Nanociències

COL·LOIDES ACTIUS CONTROLATS PER CAMPS MAGNÈTICS



Els cristalls líquids són materials que poden presentar una metafase entre l'estat sòlid i el líquid. És un estat descrit com a fluid ordenat o anisotròpic, en què trobem un material que flueix, però que preserva algun tipus d'ordre en la seva estructura. En el fascinant món d'aquests fluids complexos, l'estudi del desplaçament de partícules col·loïdals disperses que hi ha en aquests fluids permet explorar nous mecanismes de propulsió i nous comportaments que van més enllà de fenòmens clàssics com, per exemple, l'electroforesi. A la meua tesi s'estudia, en un primer bloc, el moviment de partícules sòlides de poliestirè sota l'aplicació d'un camp elèctric al sistema. Es mouen a causa de les pertorbacions que fan a l'estructura ordenada del líquid. Específicament la meua tesi es basa a trobar mètodes simples per controlar-ne el desplaçament, tant de manera individual com col·lectiva, a través de l'ús de diferents tipologies de camp magnètic. També, anant un pas més enllà, s'hi explora el camp de les quasipartícules, entenent-les com a pertorbacions que apareixen dins de cristalls líquids quirals, les quals tenen un comportament similar a com si fossin sòlides, a causa de la seva metaestabilitat. Aquestes partícules, anomenades *baby skyrmions*, es poden propulsar a través de l'aplicació d'un camp elèctric modulad. La meua tesi, doncs, pretén demostrar el control de la direccionalitat del seu moviment a través de l'ús de camps magnètics, i trobar, gràcies a la seva natura «virtual», aplicacions basades en el transport de micropartícules dins de dispositius de microfluídica.

PARAULES CLAU: cristalls líquids, sistemes col·loïdals, matèria activa, quasipartícules, skyrmions



Electrosíntesi de catalitzadors per a la transformació de residus forestals

Pol Vilariño Casaus, Albert Serrà i Ramos, i Elvira Gómez Valentín
Departament de Ciència de Materials i Química Física, Secció de Química Física
i Institut de Nanociència i Nanotecnologia de la Universitat de Barcelona

pol.vilacasaus@gmail.com

Programa de doctorat en Electroquímica. Ciència i Tecnologia



Aquesta tesi doctoral es dedica al desenvolupament de materials innovadors per a la producció de gamma-valerolactona (GVL) a partir de biomassa lignocel·lulòsica, tot aprofitant l'energia solar. La GVL té un gran interès com a biocombustible i dissolvent verd, a més de tenir diverses aplicacions industrials sostenibles.

El tractament de la biomassa amb àcid genera àcid levulínic i isopropanol. Mitjançant reaccions redox entre aquests dos compostos, es pot obtenir el producte desitjat: la gamma-valerolactona. L'objectiu central de la investigació és desenvolupar catalitzadors heterogenis eficients que impulsin aquesta reacció utilitzant diverses fonts d'energia, com ara la llum solar, la calor i el magnetisme.

La fabricació dels catalitzadors es basa en l'electrosíntesi i es duu a terme dipositant metalls com ara el níquel, el coure, el ruteni i els seus respectius aliatges sobre nanotubs de carboni, la qual cosa potencia la conversió de l'àcid levulínic en GVL. Aquests catalitzadors també es poden crear amb tècniques avançades com l'*electroless*, un mètode sense necessitat d'energia elèctrica.

Aquest projecte suposa un avenç cap a l'obtenció de productes químics sostenibles a partir de fonts renovables, de manera que contribueix a la transició cap a una economia més verda i cap a la reducció de l'impacte ambiental de la indústria.

PARAULES CLAU: electrosíntesi, *electroless*, biocombustible, gamma-valerolactona, catàlisi

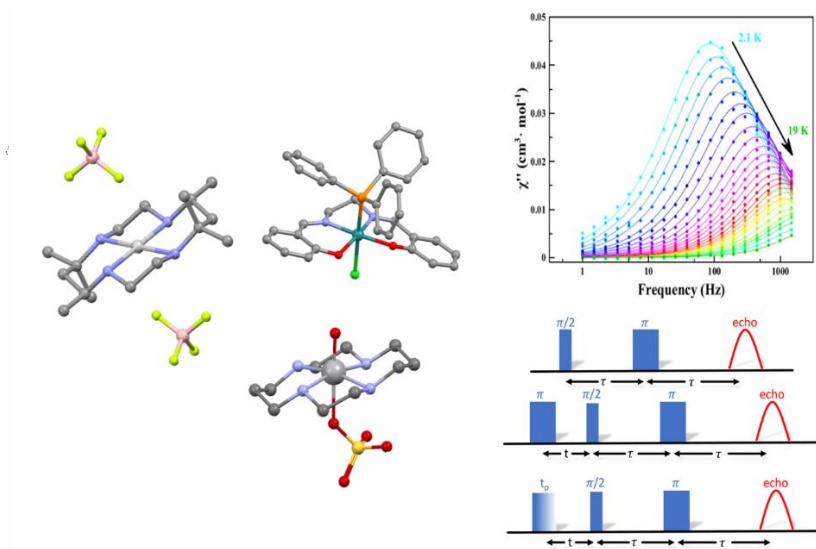
Relaxació lenta de la magnetització en complexos de coordinació amb $S = 1/2$

Joan Serra, Júlia Mayans i Albert Escuer

*Departament de Química Inorgànica i Orgànica, Secció de Química Inorgànica
i Institut de Nanociència i Nanotecnologia de la Universitat de Barcelona*

jserracast@ub.edu

Programa de doctorat en Nanociències



Durant les darreres dècades, les molècules magnètiques han estat proposades per a un ampli ventall d'aplicacions com, per exemple, l'emmagatzematge d'informació en discos durs, la computació quàntica i l'espintrònica. Concretament, en el camp de la computació quàntica, s'està estudiant el rendiment que podrien tenir els complexos de coordinació que presenten una relaxació lenta de la magnetització com a bits quàntics, aprofitant diferents fenòmens com ara la superposició d'estats energètics i l'entrellaçament quàntic. Els paràmetres més rellevants a l'hora de caracteritzar els complexos de coordinació per al seu ús potencial com a bits quàntics són: el temps de relaxació espín-xarxa (T_1), que defineix el temps que tarda un espín excitat a tornar al seu estat fonamental, i el temps de coherència (T_2), que defineix el temps durant el qual dos estats estan superposats. Concretament, T_1 marca el límit superior de T_2 ; per tant, una estratègia per poder incrementar el temps de superposició dels estats seria optimitzar T_1 . En aquesta línia, els complexos de coordinació aporten una alta versatilitat, ja que una selecció apropiada de lligands i cations de metalls dels blocs d o f permet, d'una banda, augmentar els temps de relaxació T_1 i T_2 i, de l'altra, l'acoblament amb altres bits quàntics, cosa que n'afavoreix l'escalabilitat. Darrerament, s'ha aprofundit en l'estudi de les propietats magnètiques dels complexos de coordinació amb $S = 1/2$ que presentin una relaxació lenta de la magnetització, perquè ofereixen un control precís de les propietats electròniques i magnètiques del sistema i són capaços de formar estats purs gràcies a la seva naturalesa estructural.

PARAULES CLAU: coordinació, magnetisme, computació, bit quàntic

Materials piezoelèctrics en conformació multicapa

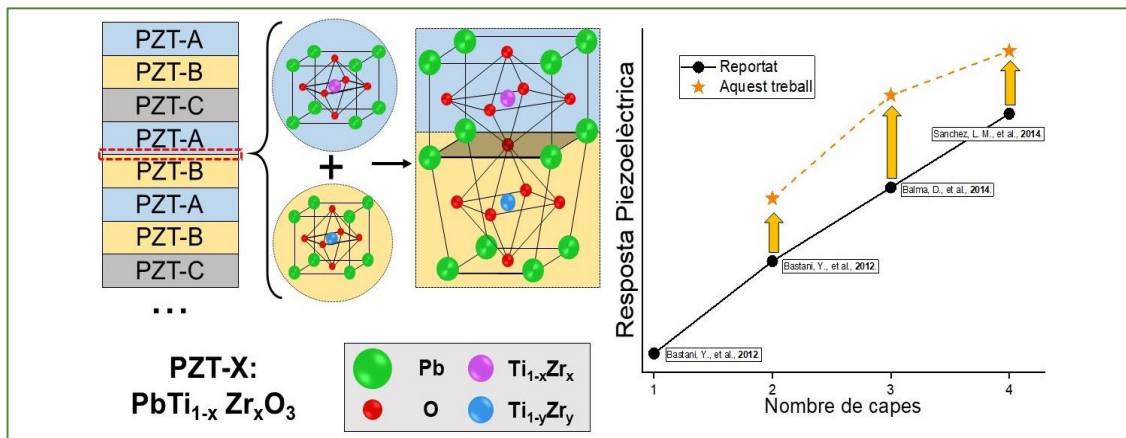
Andrés Rodríguez Gallego,¹ Xavier Vendrell Villafruela¹ i José Eduardo García García²

¹Departament de Química Inorgànica i Orgànica, Secció de Química Inorgànica

²Departament de Física (Universitat Politècnica de Catalunya)

andres.rodriguez@ub.edu

Programa de doctorat en Nanociències

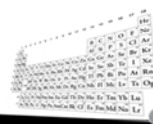


El titanat zirconat de plom ($\text{PbTi}_{1-x}\text{Zr}_x\text{O}_3$, PZT) és el material ferroelèctric més utilitzat a la indústria per les seves excel·lents propietats piezoelèctriques, mecàniques i elèctriques, i és especialment útil en aplicacions com ara sensors, actuadors i transductors. Les seves propietats elèctriques es poden modificar a través del dopatge amb diversos elements químics.

El rendiment dels materials ferroelèctrics es pot optimitzar quan es disposen en una conformació multicapa. D'aquesta manera, s'incorporen tensions residuals a la interfície que poden incrementar les propietats elèctriques i funcionals del material. Tot i l'àmplia recerca sobre l'ús de multicapes, aquesta se centra principalment en materials en forma de pel·lícules primes i hi manca informació sobre materials multicapa en forma massissa o *bulk*, cosa que ofereix oportunitats per aprofundir en l'estudi i per desenvolupar nous materials, en conformació multicapa, amb millores significatives en les propietats i aplicacions.

Aquesta tesi té com a objectiu millorar les propietats piezoelèctriques del PZT comercial mitjançant la conformació multicapa. Per tal d'augmentar la capacitat d'emmagatzematge d'energia, reforçar la resistència mecànica i incrementar l'eficiència piezoelèctrica del material, es prepararan materials basats en PZT en conformació multicapa emprant composicions diferents. També s'avaluarà l'efecte del gruix de les diferents capes i els mecanismes que contribueixen o dificulten la millora de les propietats electromecàniques en les interfícies. Es pretén obrir noves possibilitats en el desenvolupament de dispositius més eficients i duradors.

PARAULES CLAU: materials, multicapa, piezoelèctrics, PZT



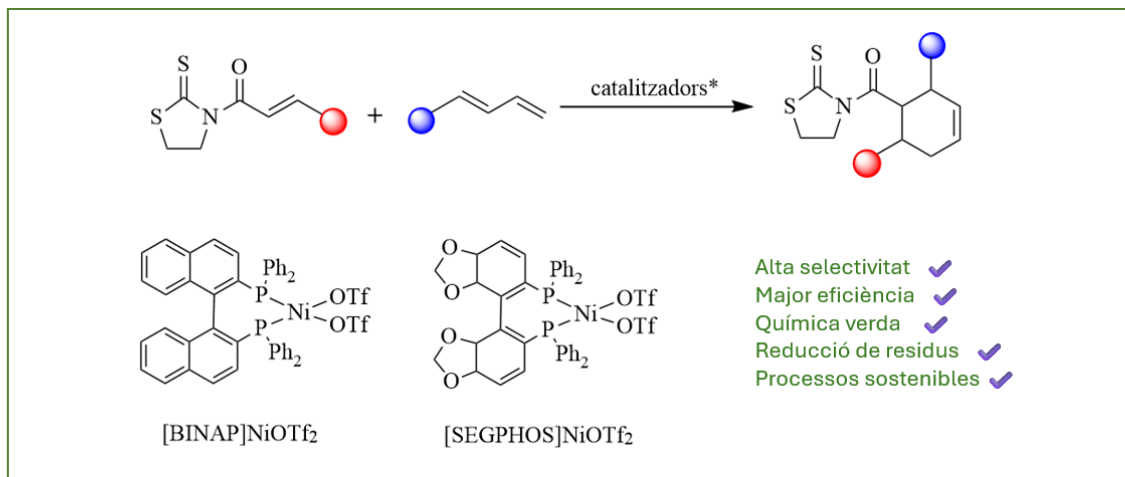
Metodologies asimètriques en reaccions pericícliques catalitzades per níquel

Jiawei Gao, Pedro Romea i Fèlix Urpí

Departament de Química Inorgànica i Orgànica, Secció de Química Orgànica

jgaogaog12@alumnes.ub.edu

Programa de doctorat en Química Orgànica



La quiralitat fa referència a la capacitat d'algunes molècules d'existir en dues formes que són imatges especulars l'una de l'altra, com ara les mans. Aquesta propietat és fonamental en farmacologia, perquè els enantiòmers poden tenir efectes molt diferents en l'organisme. Un exemple conegut és l'ibuprofèn, en què un dels enantiòmers té activitat analgèsica mentre que l'altre és inactiu. Per això el control de la quiralitat en la producció de fàrmacs és crucial.

La meua recerca se centra en metodologies per a reaccions pericícliques catalitzades per complexos de níquel, com ara les cicloadicions. Aquests catalitzadors faciliten la síntesi de molècules quirals amb activitat biològica, i en milloren la selectivitat i sostenibilitat. Així, es poden obtenir enantiòmers específics amb menys residus i menor consum energètic, i es pot oferir una alternativa més ecològica. Aquesta recerca proporciona eines d'alta precisió per a la síntesi de compostos d'interès en la indústria química i biomèdica, amb potencial per contribuir al desenvolupament de nous fàrmacs i altres productes innovadors en el camp científic.

PARAULES CLAU: asimetria, reaccions pericícliques, catàlisi, níquel, sostenibilitat

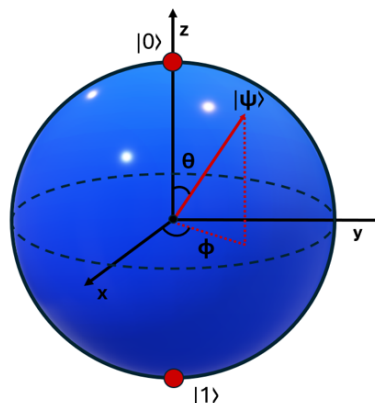
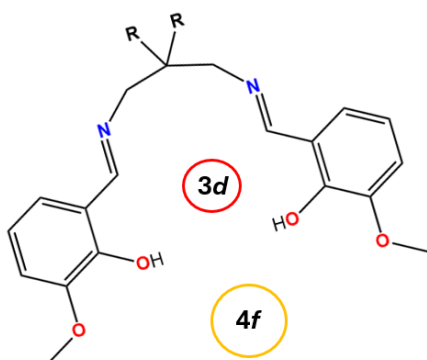
Química de coordinació per a sistemes de processament d'informació quàntica

Sergio Caballero Gutiérrez, Júlia Mayans Ayats i Albert Escuer Fité
Departament de Química Inorgànica i Orgànica, Secció de Química Inorgànica

scaballerogutierrez@ub.edu

Programa de doctorat en Nanociències

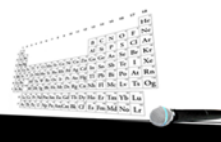
22 Ti Titanium 47.867	23 V Vanadium 50.942	24 Cr Chromium 51.996	25 Mn Manganese 54.938	26 Fe Iron 55.845	27 Co Cobalt 58.933	28 Ni Nickel 58.693	29 Cu Copper 63.546	30 Zn Zinc 65.38
---------------------------------------	--------------------------------------	---------------------------------------	--	-----------------------------------	-------------------------------------	-------------------------------------	-------------------------------------	----------------------------------



57 La Lanthanum 138.91	58 Ce Cerium 140.12	59 Pr Praseodymium 140.91	60 Nd Neodymium 144.24	61 Pm Promethium (145)	62 Sm Samarium 150.36	63 Eu Europium 151.96	64 Gd Gadolinium 157.25	65 Tb Terbium 158.93	66 Dy Dysprosium 162.50	67 Ho Holmium 164.93	68 Er Erbium 167.26	69 Tm Thulium 168.93	70 Yb Ytterbium 173.05	71 Lu Lutetium 174.97
--	-------------------------------------	---	--	--	---------------------------------------	---------------------------------------	---	--------------------------------------	---	--------------------------------------	-------------------------------------	--------------------------------------	--	---------------------------------------

La computació quàntica és un dels temes més candents de la literatura científica del segle XXI. Els sistemes que poden tenir dos estats energètics diferenciats poden actuar com a bits quàntics (qbits). La superposició d'aquests dos estats ens permet tenir múltiples estats simultàniament, de manera que amplia la capacitat de computació del sistema. El tractament de la informació quàntica i el seu emmagatzematge constitueixen un dels grans reptes que tenim al davant. Els sistemes basats en molècules individuals són candidats a ser utilitzats com a qbits, ja que tenen temps de coherència llargs i estats d'espín controlables i adreçables. L'objectiu de la tesi és dissenyar i sintetitzar sistemes químics basats en complexos de coordinació amb metalls que posseeixin espín nuclear i/o espín electrònic, ja que la seva interacció pot ser modificada mitjançant pertorbacions externes (camps magnètics, radiofreqüències i radiació de microones). A més, ens podem beneficiar del fet que els espins nuclears es troben més aïllats de l'entorn que els espins electrònics i, per això, els seus temps de coherència són majors. Per a la síntesi d'aquests sistemes es fan servir lligands orgànics que permeten coordinar diferents metalls (de transició i/o lantànids), que posseeixen (o no) espín nuclear, per al seu estudi posterior mitjançant tècniques espectroscòpiques, com ara la ressonància magnètica nuclear o la ressonància d'espín electrònic.

PARAULES CLAU: computació quàntica, qbit, espín, química de coordinació, ressonància



Autenticació de productes alimentaris mitjançant mètodes cromatogràfics

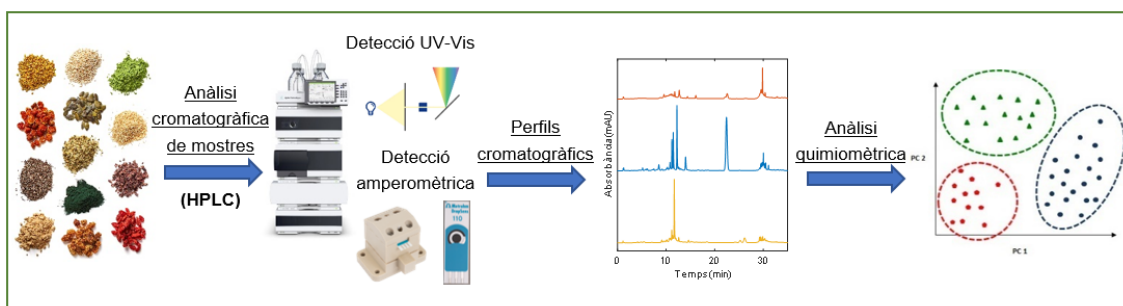
Josep Pagès Rebull,¹ Clara Pérez Ràfols^{1,2} i Núria Serrano Plana^{1,2}

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

²Institut de Recerca de l'Aigua (IdRA)

josep.pages@ub.edu

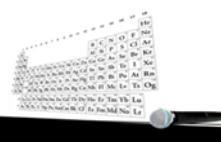
Programa de doctorat de Química Analítica i Medi Ambient



El frau alimentari consisteix en la manipulació deliberada dels productes alimentaris, tot incomplint les normatives vigents i augmentant el benefici econòmic en detriment de la qualitat dels productes. Aquestes pràctiques fraudulentengloben, entre d'altres, la dilució, la substitució o l'etiquetatge erroni. L'augment de la demanda de productes alimentaris derivat del creixement demogràfic, juntament amb un increment de la preocupació dels consumidors per la qualitat d'aquests productes, han obert la porta a frauds alimentaris i adulteracions que són cada vegada més difícils de detectar i que presenten un risc alimentari per a la població. Per aquest motiu calen més controls rigorosos que garanteixin la integritat i l'autenticitat dels diferents productes alimentaris. Una manera d'estudiar les adulteracions alimentàries és a partir de l'anàlisi de compostos rellevants i característics de cada aliment. S'utilitzen estratègies d'anàlisi dirigida, que es basen en l'estudi de biomarcadors característics del producte a analitzar, i d'anàlisi no dirigida, que se centren a registrar perfils instrumentals o empremtes dactilars, sense conèixer prèviament la composició de l'aliment.

Així, en aquesta tesi es pretén desenvolupar diferents mètodes d'autenticació d'aliments emprant estratègies dirigides i no dirigides mitjançant cromatografia de líquids acoblada a detecció UV/VIS (HPLC-UV) o detecció amperomètrica (HPLC-ED). Els perfils cromatogràfics o les concentracions dels compostos rellevants es tractaran per diferents mètodes quimiomètrics per classificar o quantificar les mostres analitzades. Entre els principals mètodes de classificació trobem l'anàlisi de components principals (PCA) i l'anàlisi discriminant per mínims quadrats parcials (PLS-DA), mentre que la quantificació de paràmetres rellevants es duu a terme per regressió per mínims quadrats parcials (PLS).

PARAULES CLAU: frau alimentari, autenticació, productes alimentaris, cromatografia de líquids, quimiometria



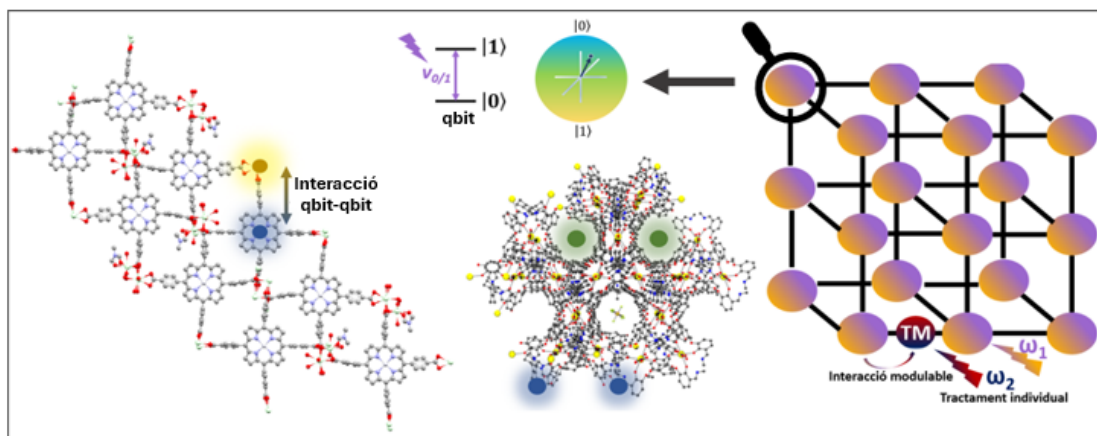
Integració de qbits d'espín molecular en sistemes multidimensionals

Joan Torrent Llovera i Júlia Mayans Ayats

Departament de Química Inorgànica i Orgànica, Secció de Química Orgànica

jtorrentl10@alumnes.ub.edu

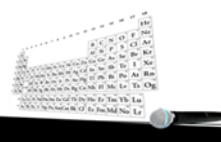
Programa de doctorat en Nanociències



La primera revolució quàntica va derivar en tecnologies com ara el semiconductor, el làser o la ressonància magnètica nuclear. Totes elles han estat una peça integral del progrés tecnològic en els darrers anys. Actualment, ens trobem immersos en la segona revolució quàntica, fonamentada en el concepte del qbit, que està impulsant noves tecnologies com ara la detecció quàntica o la computació quàntica. Un qbit és qualsevol sistema amb dos estats, 1 i 0 en analogia al bit clàssic, que poden estar en superposició arbitrària i controlable. Conjuntament amb l'entrellaçament quàntic, la superposició deriva en increments exponencials de les capacitats de detecció i de processament d'informació. Entre les moltes realitzacions físiques d'un qbit, la tesi se centra en l'espín molecular.

Sota un embolcall orgànic apropiat, un catió paramagnètic pot presentar les propietats requerides per comportar-se com a qbit. Cal destacar avantatges d'aquests compostos de coordinació com ara els seus temps de coherència quàntica competitius, la seva versatilitat sintètica, i la fàcil modulació de les interaccions entre qbits. La darrera és la base de les portes lògiques que conformen el processament d'informació. Aquest projecte tracta d'aconseguir la integració de cations, preferentment metalls de la primera sèrie de transició i lantànids, en xarxes multidimensionals, com ara polímers de coordinació o xarxes metal·loorgàniques. D'aquesta manera s'aconsegueix un control espacial de la posició d'aquests cations, que comporta un control de les seves interaccions qbit-qbit. La caracterització del comportament qbit es duu a terme mitjançant la ressonància paramagnètica electrònica (EPR) polsada. Aquests compostos multidimensionals es troben en conjunció amb aplicacions com l'electrònica molecular, la captura i detecció de gasos, o la catàlisi.

PARAULES CLAU: computació quàntica, qbit, complex de coordinació, xarxa multidimensional



Optimització de rendiments quàntics amb nous fotocatalitzadors

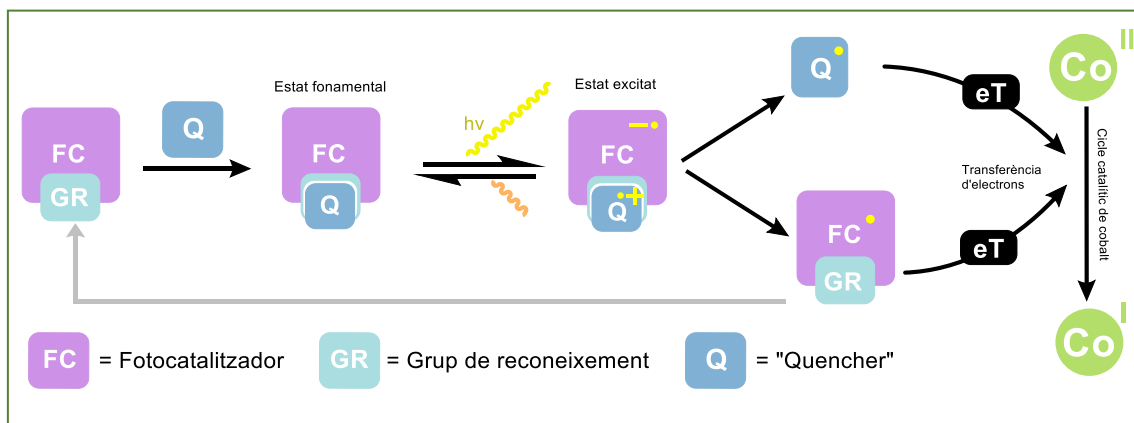
Yaiza Martínez Medina¹ i Bart Limburg^{1,2}

¹Departament de Química Inorgànica i Orgànica, Secció de Química Orgànica

²Institut de Química Teòrica i Computacional de la Universitat de Barcelona

ymartinez@ub.edu

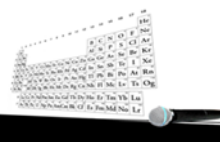
Programa de doctorat en Química Orgànica



Un dels objectius essencials de la química sintètica és el desenvolupament de mètodes catalítics versàtils i eficients. En l'última dècada, la catàlisi fotoredox ha esdevingut un camp tan prometedor que és una prioritat per a la comunitat científica. Com funciona? Quan una molècula de fotocatalitzador s'irradia amb llum absorbeix energia i s'excita, i accedeix a un estat de major energia, anomenat *singlet* (S1). En aquest estat el fotocatalitzador pot recórrer diferents camins que el poden fer retornar a l'estat fonamental; també pot produir-se un entrecruament cap a l'estat triplet (T1), o bé seguir el camí desitjat i aprofitar l'energia per dur a terme reaccions fotocatalítiques. Aquestes reaccions tenen grans avantatges, ja que utilitzen la llum com a font d'energia, s'eviten temperatures elevades que poden descompondre els reactius i, a més, s'obre la porta a rutes sintètiques més curtes. Un dels reptes que cal superar, i que s'abordarà a la tesi, és el baix rendiment quàntic, és a dir, la baixa quantitat de producte generat per fotó de llum absorbit.

La proposta de la tesi consisteix a dissenyar diferents fotocatalitzadors units mitjançant enllaços d'hidrogen a un *quencher*, que és una molècula dissenyada per absorbir l'energia d'excitació i evitar pèrdues energètiques. Primer se sintetitzarà un «grup de reconeixement» amb afinitat pel *quencher*, que es trobarà enllaçat covalentment al fotocatalitzador i farà enllaços d'hidrogen amb aquest *quencher*. Després s'utilitzaran aquests sistemes en reaccions fotocatalítiques i s'estudiarà si augmenta el rendiment quàntic de les reaccions.

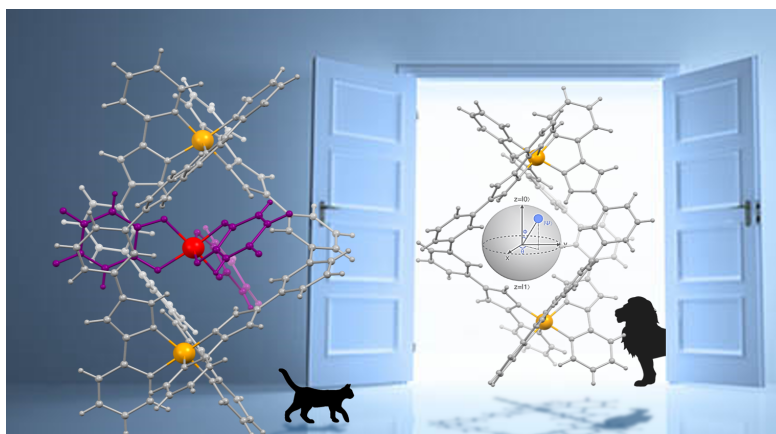
PARAULES CLAU: fotocatalisi, *quenching*, estat excitat, rendiment quàntic, fotocatalitzador



Coordinació multifuncional i architectures supramoleculares per a aplicacions espintròniques

Jordi Martínez Morató, Guillem Aromí Bedmar i Leoní Alejandra Barrios Moreno
*Departament de Química Inorgànica, Secció de Química Inorgànica
i Institut de Nanociència i Nanotecnologia de la Universitat de Barcelona*

jordimartinez@ub.edu
Programa de doctorat en Nanociències



Les tendències actuals de recerca a tot el món se centren en l'explotació de la versatilitat de la química sintètica per a l'enginyeria de molècules funcionals. Aquestes molècules es poden utilitzar com a components de dispositius nanoscòpics per a aplicacions tecnològiques reals a nanoescala. Això obre noves oportunitats tecnològiques, amb un exemple paradigmàtic: la capacitat de manipulació de la informació quàntica. L'estratègia implica el disseny químic i la preparació d'objectes nanoscòpics discrets funcionals amb control atòmic de l'estructura i amb perfecta reproductibilitat.

La proposta per a aquest doctorat se centra en el disseny i la preparació de molècules funcionals (o conjunts supramoleculares) amb interès per desenvolupar dispositius per a nanotecnologia, espintrònica i, sobretot, tecnologies quàntiques. Amb aquest objectiu, es treballarà per obtenir architectures que incorporin diferents lligands coordinats a diversos metalls, per tal d'estudiar-ne les propietats magnètiques com les propietats de transició d'espín, entre d'altres. Gràcies als grups funcionals i la forma dels lligands utilitzats, es formen compostos helicoidals que tenen la capacitat d'encapsular convidats de diferent mida mitjançant ponts d'hidrogen. A més, es poden establir interaccions supramoleculares que poden afectar les propietats magnètiques dels ions metàl·lics del conjunt. Aquestes interaccions podrien generar la sinergia perfecta per a l'estudi de l'espín d'aquests ions metàl·lics amb l'objectiu d'estudiar les seves propietats com a *spin qubits*. En funció dels lligands utilitzats, es pot explorar la versatilitat d'aquests sistemes combinant-los amb diferents centres metàl·lics, cosa que obre la possibilitat de manipular de manera independent més d'un espín diferent i amplia les aplicacions en tecnologies quàntiques i altres camps.

PARAULES CLAU: química supramolecular, química de coordinació, computació quàntica, *spin qubits*, transició d'espín

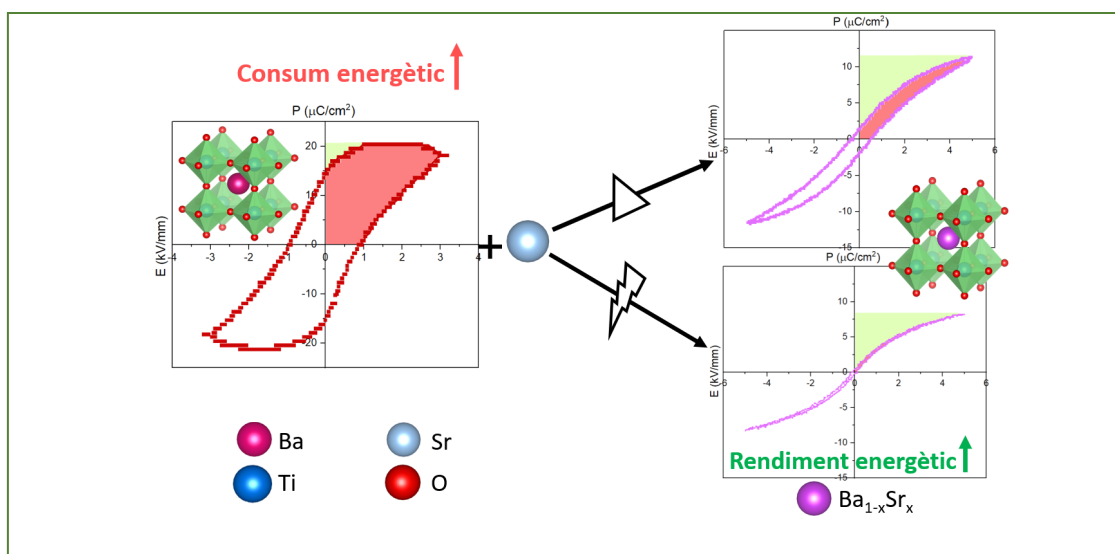
Condensadors d'alt rendiment energètic basats en materials ferroelèctrics

Nerea Morante del Pino i Xavier Vendrell Villafruela

Departament de Química Inorgànica i Orgànica, Secció de Química Inorgànica

nerea.morante@ub.edu

Programa de doctorat en Nanociències

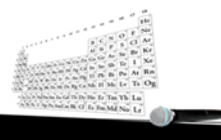


Els materials dielèctrics són essencials en dispositius electrònics com els condensadors. Tot i que tradicionalment s'utilitzen materials dielèctrics basats en el titanat de plom (PbTiO_3), s'investiguen alternatives sense plom, a causa de la seva elevada toxicitat i el seu perill mediambiental. Entre els possibles substituïts, els materials ferroelèctrics basats en el titanat de bari (BaTiO_3 o BTO) són prometedors per les seves propietats elèctriques. No obstant això, no són ideals per emmagatzemar energia, ja que es requereix un baix camp coercitiu (E_c), i el BTO presenta un E_c alt. Per millorar aquest paràmetre, es proposa substituir el bari per l'estranci, i així se'n redueix el camp coercitiu i se'n millora l'eficiència en emmagatzematge d'energia.

El titanat de bari substituït parcialment per estranci ($\text{Ba}_{1-x}\text{Sr}_x\text{TiO}_3$) es pot sintetitzar per mitjà del mètode ceràmic convencional, el qual requereix altes temperatures en períodes llargs de temps i, per tant, un cost energètic elevat. Recentment, s'ha desenvolupat una tècnica innovadora anomenada *sinterització flash*, que empra un camp elèctric en tractaments de temperatura i temps menor, de manera que hi ha un estalvi d'energia.

L'objectiu d'aquesta tesi és avaluar l'efecte de la substitució del bari per l'estranci, tant en el comportament dielèctric com en la capacitat d'emmagatzemar energia, sintetitzant els materials pel mètode ceràmic i per sinterització *flash*, i variant-ne la composició dins de l'interval $x = 0,30-0,60$.

PARAULES CLAU: emmagatzematge energètic, ferroelèctric, mètode ceràmic, sinterització *flash*

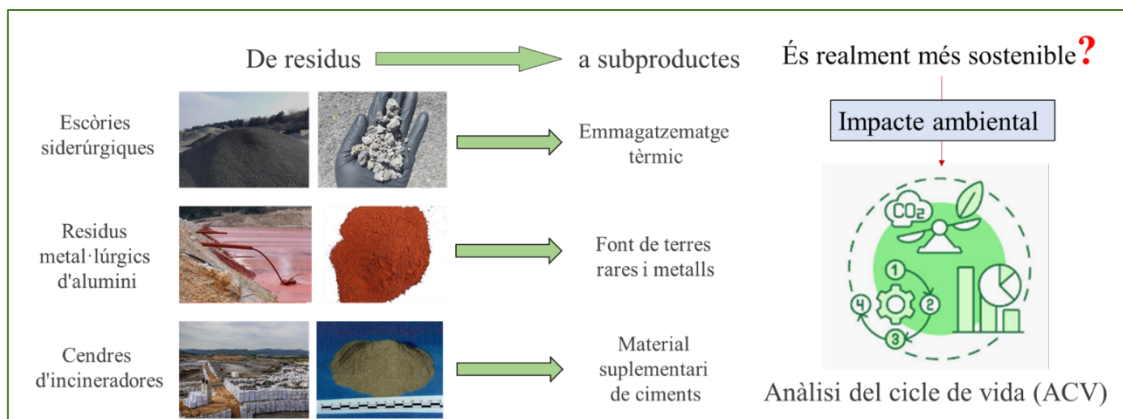


Circularitat de residus: cap a nous sistemes sostenibles

Carlos Alberto Vielma Leal, Camila Barreneche i Adela Svobodova Sedlackova
*Departament de Ciència de Materials i Química Física, Secció de Ciència
 i Enginyeria de Materials*

cvielma@ub.edu

Programa de doctorat en Enginyeria i Ciències Aplicades

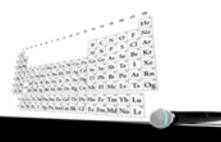


Bona part dels esforços en l'estudi de la reutilització de residus se centren en l'avaluació de la seva viabilitat tècnica. Un enfocament diferent, i cada cop més rellevant, és l'anàlisi de l'impacte ambiental amb l'objectiu de comparar solucions competitives en termes de sostenibilitat. L'anàlisi del cicle de vida (ACV) és una metodologia per avaluar la sostenibilitat d'un procés o producte mitjançant l'avaluació dels impactes ambientals que genera. En relació amb la gestió de residus, l'anàlisi del cicle de vida permet l'anàlisi integral del residu des de l'origen, durant el transport, el tractament i els intercanvis de materials i energia.

Aquesta tesi aborda l'impacte ambiental de diferents processos i productes en sistemes en què els residus s'implementen per a noves aplicacions industrials. Actualment s'estan avaluant residus com ara escòries de la mineria i de la indústria metal·lúrgica, cendres d'incineradores, plàstics, deixalles del sector de l'automoció, entre d'altres. La major part d'aquests residus provenen de sectors associats a una demanda important de materials i energia, i amb una petjada de carboni alta.

Amb l'objectiu final de determinar, de manera quantitativa i comparable, l'impacte ambiental d'aquests materials, es facilita la presa de decisions en cada etapa del cicle de vida per incrementar la sostenibilitat ambiental en sectors estratègics com poden ser el sector energètic, el sector de la construcció i l'edificació, la mineria i la indústria metal·lúrgica, i el reciclatge de plàstics. Aquesta investigació s'alinea amb diversos objectius de desenvolupament sostenible (ODS), que s'enfoquen a desenvolupar energies més netes, impulsar tecnologies renovables innovadores, gestionar els recursos de manera responsable i contribuir a la mitigació del canvi climàtic.

PARAULES CLAU: circularitat de residus, anàlisi del cicle de vida (ACV), impacte ambiental, sostenibilitat industrial

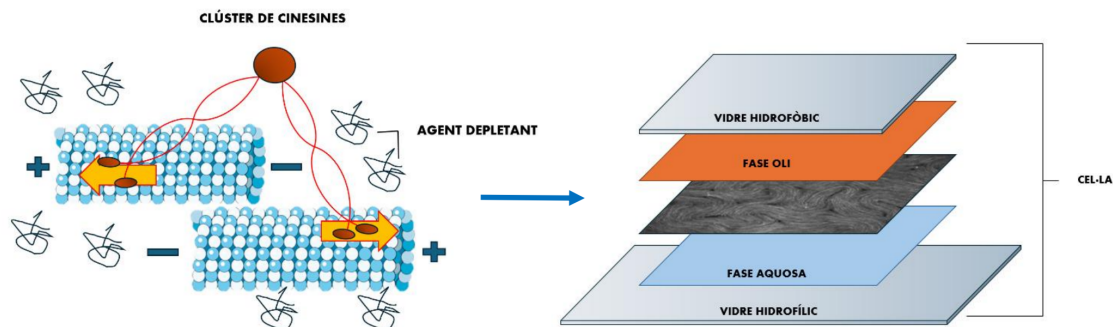


Estudi i confinament de matèria activa

Marc Vergés Vilarrubia, Jordi Ignés Mullol i Francesc Sagués Mestre
Departament de Ciència de Materials i Química Física, Secció de Química Física

marc.verges@ub.edu

Programa de doctorat en Nanociències



La matèria activa descriu sistemes que es mantenen fora de l'equilibri mitjançant una injecció d'energia en els seus components. Inclou tant entitats vives, com ara ocells i bacteris, com estructures artificials, com ara partícules col·loïdals autopropulsades. Aquest camp ofereix noves perspectives per entendre l'autoorganització dels processos vius i dissenyar entitats autònomes per a aplicacions de laboratori. Un dels sistemes actius més estudiats mundialment és el format per microtúbuls de tubulina propulsats per kinesina que formen una capa compacta de filaments autopropulsats anomenada *nemàtic actiu*, amb fluxos que generen una «turbulència activa». Recentment, s'ha investigat el confinament de la matèria activa en microcanals, però presenta diverses limitacions, com ara la rigidesa dels canals i les dificultats en l'estudi de la interfase. Aquest projecte de tesi proposa resoldre aquestes barreres mitjançant l'ús de monòmers biocompatibles i llum UV per crear estructures d'hidrogel flexibles i adaptables in situ, cosa que ofereix noves possibilitats experimentals en el camp.

PARAULES CLAU: kinesina, microtúbuls, nemàtic actiu, matèria activa, hidrogel

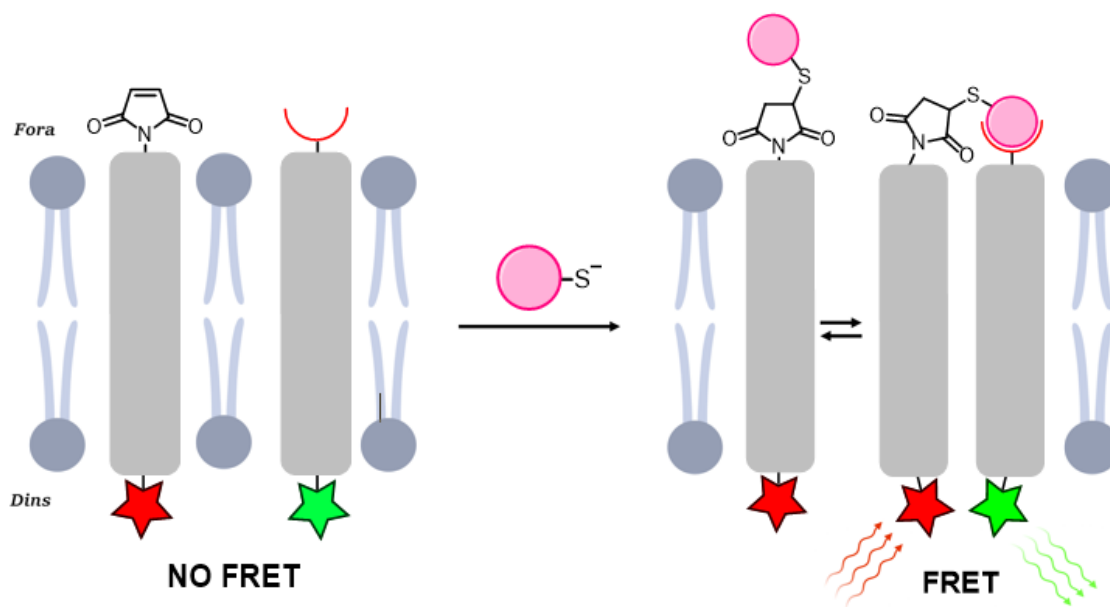
Receptors de membrana sintètics per a la transducció de senyal artificial a través de capes lipídiques

Arnau Oliveras i Bart Limburg

Departament de Química Inorgànica i Orgànica, Secció de Química Orgànica

a.oliveras@ub.edu

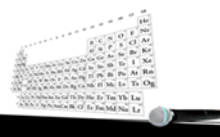
Programa de doctorat en Química Orgànica



Les cèl·lules estan aïllades del seu entorn per membranes formades per una bicapa lipídica. En la membrana també hi trobem receptors de membrana que són un dels encarregats del funcionament i la supervivència de les cèl·lules, ja que tenen l'habilitat de detectar i donar resposta a canvis en l'entorn cel·lular. Els receptors reconeixen selectivament estímuls externs (anomenats missatgers primaris), s'enllacen a aquests i transmeten informació mitjançant l'alliberació de missatgers secundaris que arriben al nucli de la cèl·lula, on es produeixen canvis en l'àmbit cel·lular.

En aquest projecte, es pretén crear un sistema artificial que imiti aquesta comunicació intracel·lular mitjançant la dimerització de dos receptors introduïts en liposomes. El sistema reconeixerà específicament molècules i amb el procés de FRET (transferència d'energia per ressonància de Förster) monitorarem la dimerització, ja que és un procés altament dependent de la distància. Així, el senyal registrat abans de la dimerització serà més feble que el que s'obtindrà posteriorment.

PARAULES CLAU: transducció de senyal, receptors, liposoma, FRET

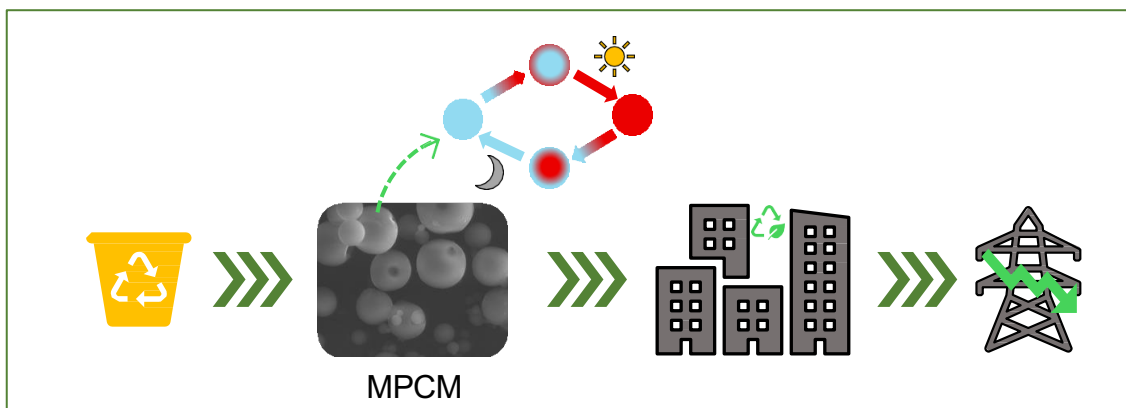


Desenvolupament de microcàpsules amb residus plàstics per contenir PCM

David Vera Rivera, Jessica Giró Paloma i Joan Formosa Mitjans
*Departament de Ciència de Materials i Química Física, Secció de Ciència
i Enginyeria de Materials*

dvera@ub.edu

Programa de doctorat d'Enginyeria i Ciències Aplicades

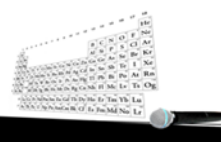


Durant les darreres dècades, s'ha detectat un augment del consum energètic a causa del condicionament tèrmic a les llars. Una proposta eficaç per afrontar aquesta problemàtica és l'emmagatzematge d'energia tèrmica (TES, de l'anglès *thermal energy storage*). Entre els diferents tipus de materials utilitzats en el TES, hi ha els anomenats *materials de canvi de fase* (PCM, de l'anglès *phase change materials*), que poden ser tant orgànics com inorgànics. Per preservar-los, una tècnica comuna és la microencapsulació. Les microcàpsules (MPCM, de l'anglès *microencapsulated phase change materials*) presenten dues parts: un nucli (PCM orgànic) i una paret externa polimèrica (carcassa).

La petjada de carboni i els problemes associats a la producció de plàstics es deuen al fet que, en acabar la seva vida útil, molts d'aquests plàstics, especialment els d'un sol ús, no es reciclen i acaben als abocadors o a la natura, de manera que causen greus problemes mediambientals.

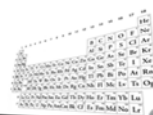
Una possible solució innovadora és la microencapsulació de PCM usant carcasses polimèriques a partir de residus plàstics, cosa que contribueix a una economia circular. L'estudi se centra en la microencapsulació mitjançant el mètode d'evaporació de dissolvent. A partir d'una emulsió —composta per una fase aquosa amb un emulgent i una fase orgànica que conté una solució de PCM i polímer—, el dissolvent orgànic, en augmentar la temperatura, s'evapora i així es formen les microcàpsules. També es vol avaluar l'ús de diferents plàstics i estudiar-ne l'aplicació per a la seva incorporació en materials de construcció.

PARAULES CLAU: emmagatzematge d'energia tèrmica (TES), materials de canvi de fase (PCM), materials de canvi de fase microencapsulats (MPCM), economia circular, residus plàstics



Índex de paraules clau

- anàlisi del cicle de vida (ACV), 17
 asimetria, 10
 autenticació, 12
 biocombustible, 7
 bit quàntic, 8
 catàlisi, 7, 10
 cinesina, 18
 circularitat de residus, 17
 complex de coordinació, 13
 computació quàntica, 11, 13, 15
 computació, 8
 coordinació, 8
 cristalls líquids, 6
 cromatografia de líquids, 12
 economia circular, 20
electroless, 7
 electrosíntesi, 7
 emmagatzematge d'energia tèrmica (TES), 20
 emmagatzematge energètic, 16
 espín, 11
 estat excitat, 14
 ferroelèctric, 16
 fotocatalisi, 14
 fotocatalitzador, 14
 frau alimentari, 12
 FRET, 19
 gamma-valerolactona, 7
 hidrogel, 18
 impacte ambiental, 17
 infraroig proper, 5
 liposoma, 19
 luminescència, 5
 magnetisme, 8
 matèria activa, 6, 18
 materials de canvi de fase (PCM), 20
 materials de canvi de fase microencapsulats (MPCM), 20
 materials, 9
 mètode ceràmic, 16
 microtúbuls, 18
 multicapa, 9
 nemàtic actiu, 18
 níquel, 10
 piezoelectrics, 9
 productes alimentaris, 12
 Pt(II), 5
 PZT, 9
 qbit, 11, 13
 quasipartícules, 6
quenching, 14
 química de coordinació, 11, 15
 química supramolecular, 5, 15
 quimiometria, 12
 reaccions pericíclics, 10
 receptors, 19
 rendiment quàntic, 14
 residus plàstics, 20
 ressonància, 11
 sinterització *flash*, 16
 sistemes col·loïdals, 6
 skyrmions, 6
 sostenibilitat industrial, 17
 sostenibilitat, 10
spin qubits, 15
 transducció de senyal, 19
 transició d'espín, 15
 xarxa multidimensional, 13





UNIVERSITAT DE
BARCELONA

VII Tesimarató de Química

Jornada de comunicació de joves investigadors de la Facultat de Química
(19 de novembre de 2024)

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

Data d'edició: març de 2025



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

