



UNIVERSITAT DE  
BARCELONA

# **IV Tesimarató de Química**

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

**Llibre de resums | 2021**

Comissió de Dinamització Lingüística  
de la Facultat de Química





### **Organització de la IV Tesimarató**

Comissió de Dinamització Lingüística

Facultat de Química

Serveis Lingüístics de la Universitat de Barcelona

### **President**

Miquel Vidal Espinar, degà de la Facultat

### **Presidenta per delegació**

Dolors Velasco Castrillo, secretària acadèmica de la Facultat

### **Membres de la Comissió de Dinamització Lingüística**

Dolors Velasco Castrillo, presidenta

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

Arnald Grabulosa Rodríguez, representant del professorat de la secció de Química Inorgànica

Eudald Vilaseca Font, representant del professorat de la secció de Química Física

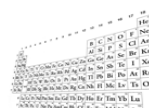
Manuela Mora Ballester, cap de Secretaria en funcions

Núria Castells Quintana, representant dels Serveis Lingüístics de la UB

Amb la col·laboració d'Irene Llamas Cano, becària de la Xarxa de Dinamització Lingüística de la Universitat de Barcelona (curs 2021-22)

### **Il·lustració de la portada**

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





## IV Tesimarató de Química | Facultat de Química | 16 de novembre de 2021

### Aula Magna Enric Casassas

#### Programa

12:05 Benvinguda i presentació

12:15 Primer bloc d'exposicions orals

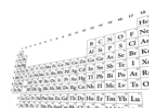
- 1 Clara Fabregat Pallejà *Síntesi, fabricació i estudi de transistors fotomodulables basats en semiconductors orgànics*
- 2 Clara Jaén Fló *Influència de les inversions tèrmiques en l'aerosol orgànic: mostreig amb globus meteorològics*
- 3 Marc Majó Robles *La calor del sol per a un futur sostenible*
- 4 Iván Sánchez Campillo *Sonic hedgehog i la partida contra el càncer*
- 5 Manuel A. Cánovas Montes *Estudi de la metanació del CO<sub>2</sub> en catalitzadors tipus single-atom suportats en zeolites. Des de càlculs Ab initio/DFT fins a models de reactor*
- 6 Elizabeth Martínez Medina *Captura selectiva de CO<sub>2</sub> de l'atmosfera a través de materials híbrids d'òxid de grafè i 'metal organic frameworks'*
- 7 Joan Serra Ventura *Elucidant els mecanismes que governen la interacció de radionúclids d'origen natural (NOR) i lantànids en sòls i materials rics en carboni*
- 8 Isabel Díez Palet *Estudi de la distribució vertical de contaminants orgànics atmosfèrics en fase gas en condicions estàndard i d'inversió tèrmica*

13:00-13:15 Pausa

13:15 Segon bloc d'exposicions orals

- 9 Isaac Giménez Guerra *Noves resines selectives escintil·ladores per a la mesura avançada de la radioactivitat*
- 10 Anna Alcofea Roig *Desenvolupament i avaluació de ciments de fosfats de magnesi mitjançant l'ús de subproductes i residus industrials*
- 11 Mohamed Amazian El Moussaoui *Aliatge Au-Cu-In: formulació i reptes*
- 12 Arnau Coma Garcia *Nous escintil·ladors plàstics per a la mesura avançada de la radioactivitat*
- 13 Maria López Olivé *Emissions de partícules en zones portuàries: alliberació, exposició i anàlisis*
- 14 Albert Ruiz Soriano *Síntesi de nous antibiòtics fotocommutables*
- 15 Javier Eusamio Rodríguez *Hidroboració i hidroacilació catalítiques amb complexos de Rh i Co*

14:00 Clausura de la IV Tesimarató de Química





## Presentació

La Tesimarató de Química és una jornada de divulgació científica de caràcter anual dirigida a joves investigadors que organitza la Comissió de Dinamització Lingüística (CDL) de la Facultat de Química cada mes de novembre pels volts de Sant Albert, que és el patró de la ciència i dels científics i científiques. Aquesta activitat, que empra el català com a eina de comunicació especialitzada, repta els doctorands de la Facultat de Química a presentar oralment, i de forma condensada, entenedora i atractiva, la temàtica i els objectius del seu treball de tesi doctoral, així com els avenços en el coneixement que han generat.

Va tenir lloc per primera vegada l'any 2018 i la iniciativa neix de la necessitat que els científics sàpiguen divulgar de forma clara i concisa les idees clau de la recerca que estan duent a terme per posar la ciència a l'abast de tothom. Per tant, aquestes presentacions no van tant adreçades a una audiència especialitzada com a un públic ampli que pugui comprendre la recerca de forma senzilla i engrescadora, però alhora rigorosa des d'un punt de vista científic.

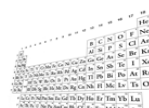
A la jornada de la Tesimarató es pot comprovar el grau elevat de satisfacció i d'aprenentatge de tots els assistents per l'ocasió que representa de participar en una sessió en què s'integren d'una manera dinàmica i compartida temes tan diferents de la recerca que actualment s'està duent a terme en els programes de doctorat de la Facultat.

Des de l'inici, la Tesimarató està organitzada en format de premi i un jurat interdisciplinari en valora totes les exposicions i en selecciona tres tenint en compte la claredat i capacitat comunicativa, l'ús d'un llenguatge correcte i rigorós però adequat per poder ser entès per un públic de formació científica generalista, i l'organització i la durada total de cada intervenció, que no pot sobrepassar els 4 minuts. El jurat està format per cinc persones: un membre de la CDL de la Facultat de Química, un membre d'una altra CDL de l'àrea de ciències, un membre dels Serveis Lingüístics de la Universitat de Barcelona i dos experts en comunicació científica.

En el present document es recullen els resums de les contribucions de la IV Tesimarató de la Facultat de Química que han confeccionat els participants d'aquesta edició, seguint el mateix ordre en què es van fer les presentacions orals. Mitjançant aquesta publicació en accés obert a través del Dipòsit Digital de la Universitat de Barcelona, es pretén divulgar els continguts d'aquesta activitat a tothom, ja que és precisament la raó per la qual s'organitza.

Finalment, la CDL de la Facultat de Química vol expressar el seu agraïment i felicitació a tots els qui han fet possible aquesta jornada, especialment els autors de les excel·lents aportacions rebudes, i confia que aquest recull de resums contribueixi a retornar a la societat els coneixements científics adquirits en la recerca de la Facultat d'una manera que resulti interessant i útil i també que sigui un estímul engrescador per a noves edicions.

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



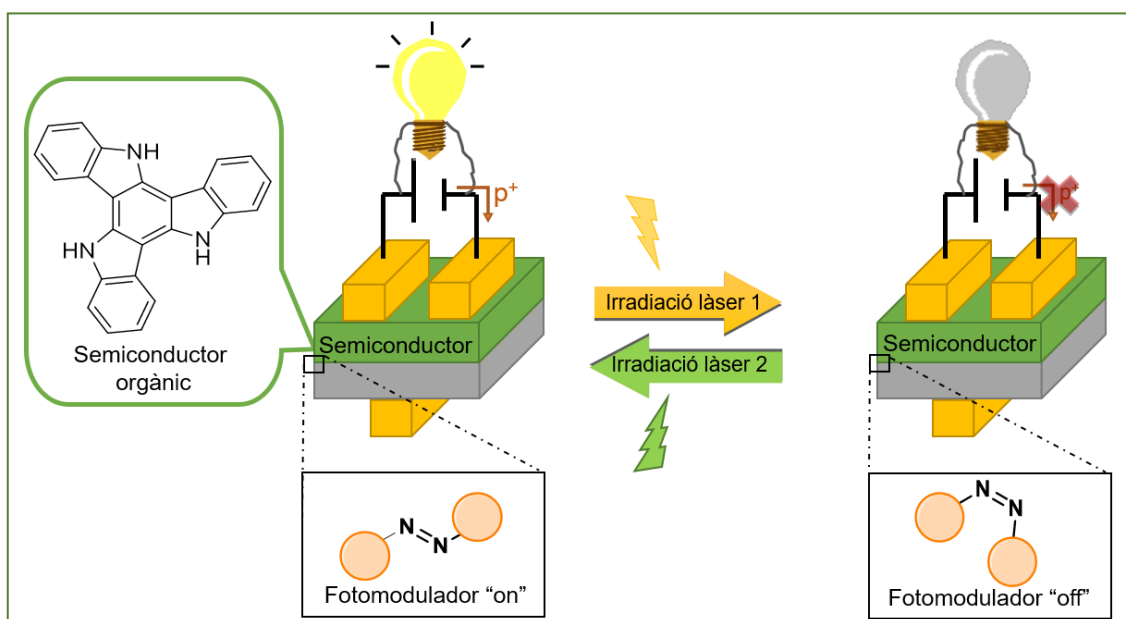
## Síntesi, fabricació i estudi de transistors fotomodulables basats en semiconductors orgànics

Clara Fabregat Pallejà,<sup>1</sup> Dolores Velasco Castrillo,<sup>1</sup> Jaume García Amorós<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Departament de Química Inorgànica i Orgànica, Secció de Química Orgànica

clarafabregat@ub.edu

Programa de doctorat de Química Orgànica



Els transistors són dispositius que modulen el corrent elèctric i es troben en gairebé tots els enginyers electrònics. Tradicionalment, aquests elements es basaven gairebé exclusivament en el silici, ja que proporciona una bona mobilitat de càrrega i una alta eficiència. No obstant això, en les últimes dècades, la investigació entorn de transistors orgànics ha augmentat exponencialment perquè l'ús de semiconductors orgànics permeten una reducció en les dimensions dels dispositius, així com un estalvi energètic i de recursos en els procediments de fabricació. Addicionalment, una de les innovacions que s'investiga en aquesta tesi doctoral és que els transistors, a més de ser modulats per un corrent elèctric, també ho puguin ser mitjançant una font lumínica (fotomodulació). Aquesta funcionalitat addicional permetria la realització de dispositius avançats, com ara cel·les de memòria o sensors. Per assolir aquest objectiu, s'incorporarien en l'estructura del transistor compostos que es transformen reversiblement amb irradiació de llum de longitud d'ona determinada, de manera que provoquen un canvi en les propietats del sistema.

Així doncs, en aquesta tesi doctoral se sintetitzaran noves famílies de molècules orgàniques amb possible comportament de semiconductor, així com compostos que puguin actuar de fotomodulador. Un cop s'hagin caracteritzat els elements per separat i determinat que tenen un ús potencial en transistors, es fabricaran degudament aquests elements electrònics i se n'avaluarà el rendiment amb irradiació de llum i sense.

PARAULES CLAU: transistors orgànics, semiconductors orgànics, fotomodulació, materials orgànics

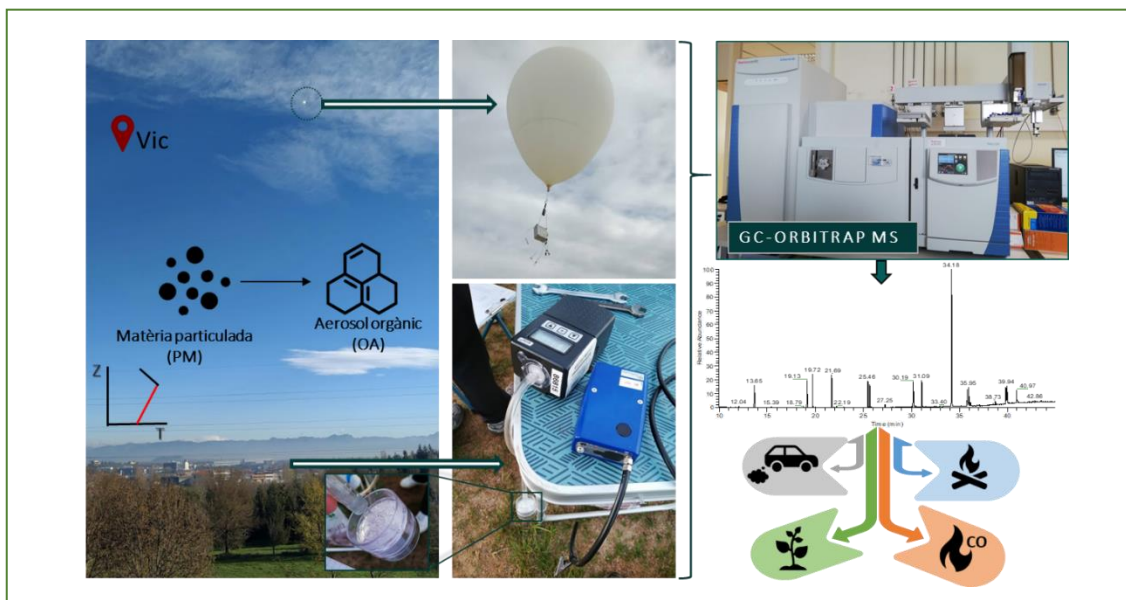
## Influència de les inversions tèrmiques en l'aerosol orgànic: mostreig amb globus meteorològics

Clara Jaén Fló,<sup>1</sup> Joan Grimalt Obrador,<sup>1</sup> Barend L. van Drooge<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Departament de Química Ambiental, grup de Geoquímica i Contaminació, Institut de Diagnòstic Ambiental i Estudis de l'Aigua (IDAEA-CSIC)

clara.jaen@idaea.csic.es

Programa de doctorat de Química Analítica i Medi Ambient



L'objectiu principal d'aquest projecte és l'estudi integrat de la composició de contaminants orgànics en fase particulada i de les condicions meteorològiques que influeixen en els episodis de més contaminació atmosfèrica, principalment aquells relacionats amb les inversions de temperatura. La dispersió restringida dels contaminants, combinada amb la fotooxidació a les capes superiors de l'aire, produeix canvis qualitius i quantitius dels aerosols atmosfèrics i sovint implica alertes sanitàries.

Per estudiar la distribució vertical dels contaminants orgànics en la matèria particulada s'han fet mostres arran de terra i en alçada amb l'ajuda de globus captius equipats amb bombes de captació d'aire i monitors de sutge. La presa de mostra s'ha dut a terme en diferents ambients urbans i rurals i en diferents estacions de l'any, com per exemple a l'àrea d'Osona, on sovint es registren les concentracions més elevades de benzopirè de la península.

Les mostres s'han analitzat amb cromatografia de gasos acoblada a espectrometria de masses (GC-MS) i GC-MS/MS d'alta resolució. La identificació i quantificació dels compostos ens han permès establir les fonts d'emissió principals a les diverses localitzacions i èpoques de l'any i les diferències de distribució que presenten sota gradients atmosfèrics estàndard i en condicions d'inversió tèrmica.

PARAULES CLAU: inversió tèrmica, matèria particulada, contaminants orgànics, distribució vertical, globus meteorològics

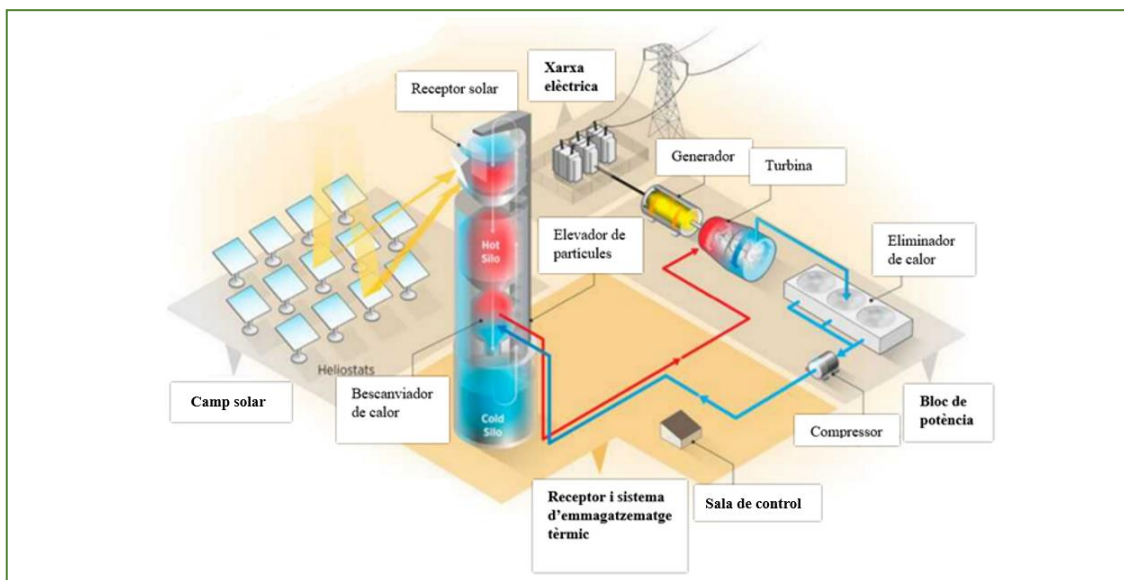
## La calor del sol per a un futur sostenible

Marc Majó Robles,<sup>1</sup> Camila Barreneche Güerisoli,<sup>1</sup> Alejandro Calderón Díaz<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Departament de Ciència de Materials i Química Física, Secció de Ciència de Materials

marc.majo@ub.edu

Programa de doctorat d'Enginyeria i Ciències Aplicades



Els sistemes d'emmagatzematge d'energia són crucials en els nostres temps, entre altres raons, perquè afavoreixen la transició del nostre sistema energètic actual cap a un de basat en les energies renovables. Aquesta transició contribuiria a disminuir les emissions de gasos d'efecte hivernacle, així com a millorar la seguretat i l'eficiència del sistema energètic.

Per tant, la innovació i la investigació en aquesta àrea són necessàries per al desenvolupament del nostre model socioeconòmic, per a la preservació del medi ambient i del nostre planeta i per a una opció viable i sostenible de futur.

Els sistemes d'emmagatzematge d'energia tèrmica són emprats avui dia principalment en fonts intermitents d'energia com ara l'energia solar. Les plantes solars de concentració són molt atractives degut als seus avantatges en temes d'alta eficiència, baix cost d'operació i bon potencial i facilitat en l'emmagatzematge d'energia. Aquest emmagatzematge es duu a terme mitjançant diferents tipus de materials que captaran la calor produïda a la planta, que podrien ser, per exemple, sals foses, sorra, formigó o, fins i tot, residus o subproductes de diferents indústries.

Des de la perspectiva de la ciència de materials, la meua tesi se centra en l'estudi dels materials emprats per les plantes de concentració solar, així com la compatibilitat amb altres elements de la planta. D'aquesta manera, se centra en una selecció completa dels materials, tenint en compte els requeriments físics i químics que han de tenir per complir la seva funció al llarg de la vida útil de la planta solar.

PARAULES CLAU: energies renovables, emmagatzematge d'energia, centrals solars de concentració, ciència de materials, economia circular

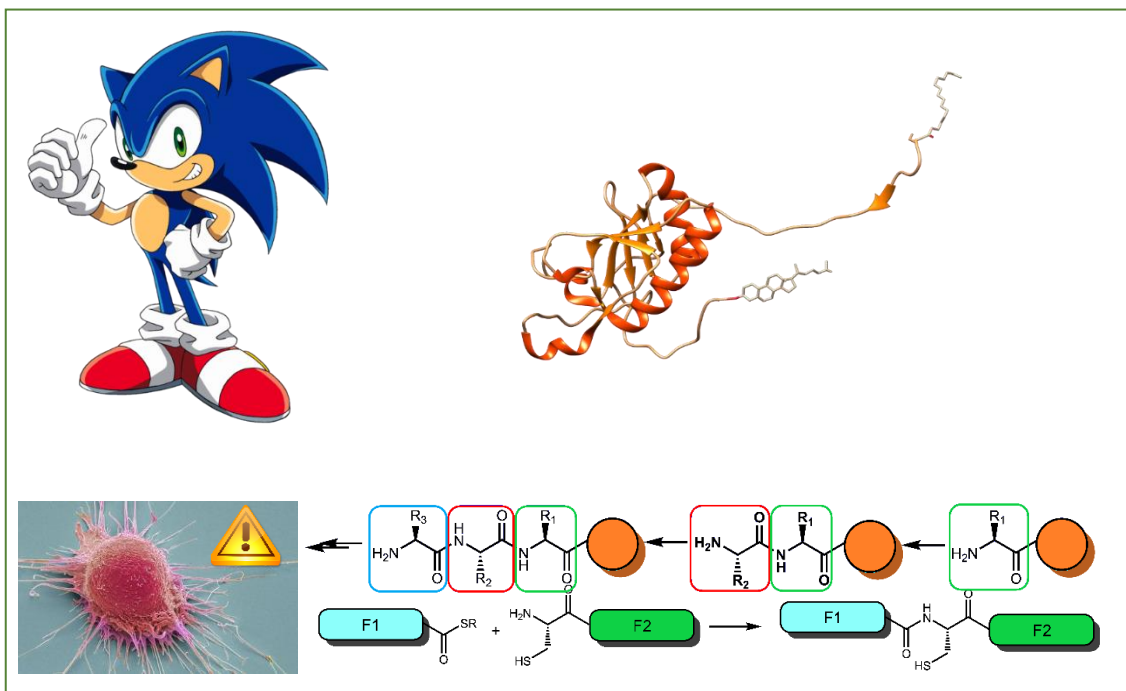
## Sonic Hedgehog i la partida contra el càncer

Iván Sánchez Campillo,<sup>1,2</sup> Juan Bautista Blanco Canosa,<sup>1</sup> Fernando Albericio Palomera<sup>2</sup>

<sup>1</sup>Grup de Biologia Química, Institut de Química Avançada de Catalunya (IQAC-CSIC)

<sup>2</sup>Departament de Química Inorgànica i Orgànica, Secció de Química Orgànica, Facultat de Química  
iscqbl@cid.csic.es

Programa de doctorat de Química Orgànica



La ruta de senyalització Hedgehog és una de les moltes línies biològiques d'instruccions que tenim programades i la seva activació depèn de la proteïna senyalitzadora Sonic Hedgehog. Aquesta ruta exerceix funcions importants durant el desenvolupament embrionari, però en adults té poca activitat. Tot i així, s'ha comprovat que l'activitat desregulada de Hedgehog en adults, que és provocada per la sobreexpressió de Sonic, comporta el desenvolupament de molts tipus de càncer. Per tant, hi ha un interès científic d'estudiar la proteïna Sonic per trobar medicaments que puguin fer-ne disminuir l'activitat.

Malauradament, la proteïna Sonic té unes característiques concretes que en dificulten l'obtenció al laboratori, i, per tant, també en dificulten l'estudi. L'objectiu d'aquesta tesi és elaborar una ruta de síntesi que permeti obtenir la proteïna Sonic fàcilment perquè pugui ser estudiada. Es volen fer servir tècniques de síntesi química de proteïnes, com ara la síntesi de pèptids en fase sòlida i la lligació química nativa, amb què es poden modificar les condicions per compensar les dificultats sorgides de les seves propietats.

PARAULES CLAU: Sonic Hedgehog, càncer, síntesi de proteïnes, metodologia sintètica



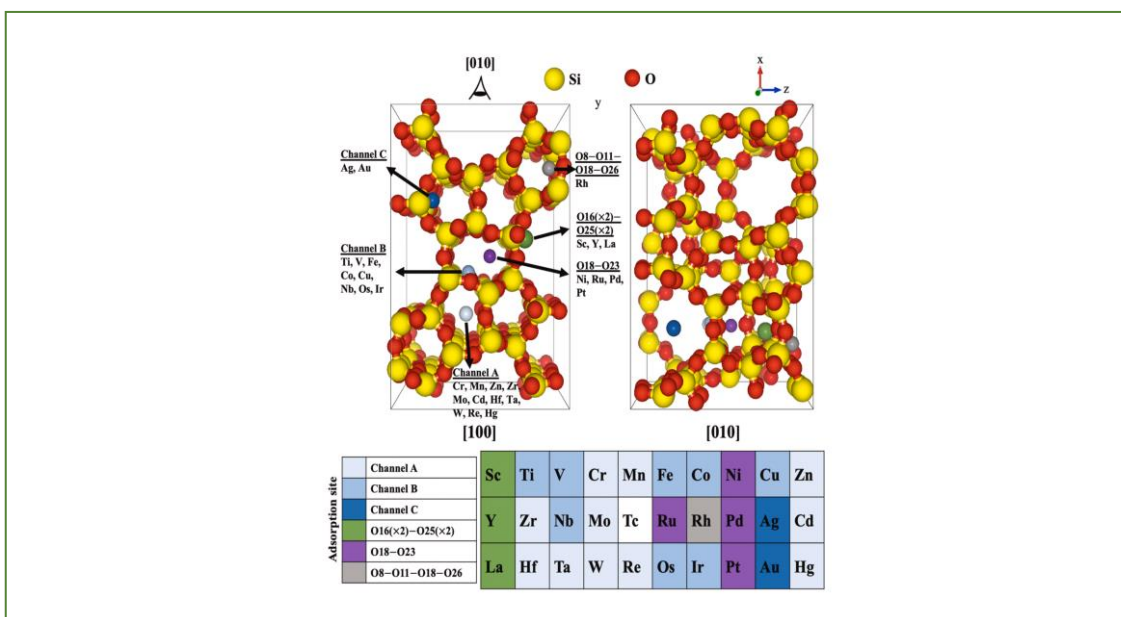
## Estudi de la metanació del CO<sub>2</sub> en catalitzadors tipus ‘single-atom’ suportats en zeolites. Des de càlculs ab initio/DFT fins a models de reactor

Manuel Antonio Cánovas Montes, Pablo Gamallo Belmonte, Ramón Sayós Ortega

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

manuelcanovas96@ub.edu

Programa de doctorat de Química Teòrica i Modelització Computacional



Aquests dies estem presenciant els nous acords que es volen fer per reduir les emissions de CO<sub>2</sub> i CH<sub>4</sub>. En el meu projecte de tesi tenim com a objectiu fer l'estudi de l'adsorció d'aquests gasos. Utilitzarem catalitzadors d'àtoms aïllats (*single-atom catalysts*), ja que recentment s'han mostrat com a materials molt prometedors per a la catàlisi, degut a l'alta activitat i selectivitat. Farem un estudi exhaustiu dels 29 metalls de transició (TMs) que pertanyen al grup 3 fins al 12 i del període IV al VI. En aquests tipus de catalitzadors, el suport és molt important, ja que, entre altres efectes, és l'encarregat d'evitar l'agregació dels nuclis metàl·lics en forma de nanopartícules. La zeolita que farem servir en una primera etapa és la silicalita.

El meu projecte comença amb càlculs de la teoria del funcional de la densitat (DFT, sigla anglesa de *density functional theory*), adsorbint diferents gasos: el CO<sub>2</sub>, H<sub>2</sub>, CH<sub>4</sub> i H<sub>2</sub>O en els centres actius (TMs) de la zeolita. Una vegada obtenim l'estat amb menor energia per a cada TM i gas, verifiquem que siguin mínims mitjançant un càlcul de freqüències. Repetirem el procés per a l'activació dels gasos i en calcularem la barrera energètica. A continuació, farem un model microcinètic per als TMs que presentin una barrera petita i estudiarem el cicle complet de la reacció de Sabatier que porta el CO<sub>2</sub> + H<sub>2</sub> fins a CH<sub>4</sub> + H<sub>2</sub>O, per diferents temperatures i pressions buscant la major eficiència possible. Finalment, estudiarem un model de reactor mitjançant la dinàmica de fluids computacional (CFD, de l'anglès *computational fluid dynamics*).

PARAULES CLAU: catalitzadors d'àtoms aïllats, zeolita, metall de transició, teoria del funcional de la densitat

## Captura selectiva de CO<sub>2</sub> de l'atmosfera a través de materials híbrids d'òxid de grafè i 'metal organic frameworks'

Elizabeth Martínez Medina,<sup>1,2</sup> Mercè Segarra Rubí,<sup>1</sup> Mònica Martínez López,<sup>1</sup>

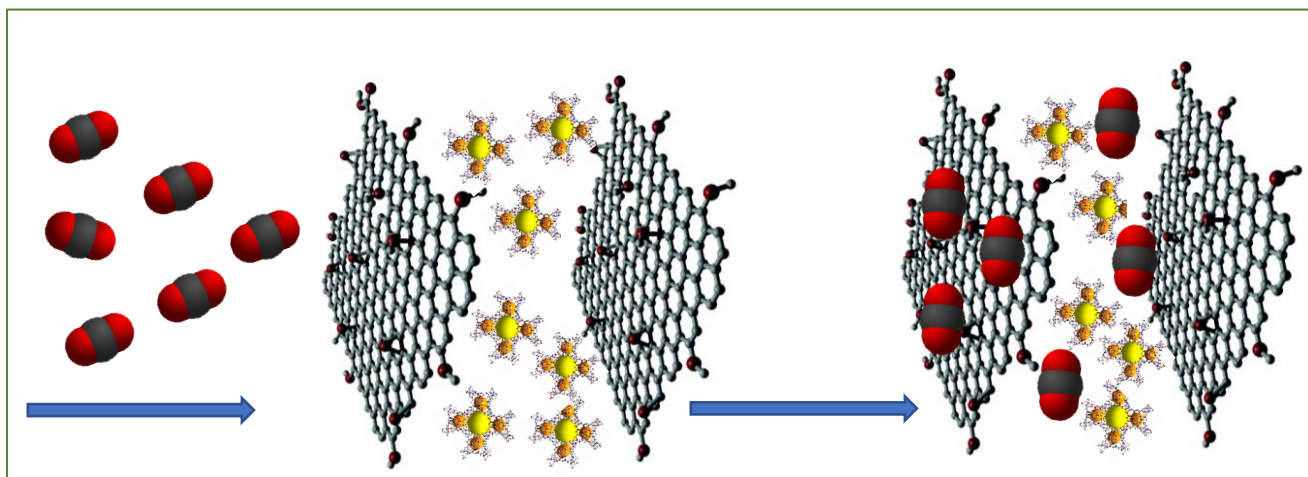
Elena Xuriguera Martín<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Departament de Ciència de Materials i Química Física, Secció de Ciència i Enginyeria de Materials

<sup>2</sup>Fundació Greenova

e\_martinez@ub.edu

Programa de doctorat d'Enginyeria i Ciències Aplicades



Actualment, la lluita contra el canvi climàtic i les emissions del CO<sub>2</sub> és un dels principals objectius de la Unió Europea. Fins a dia d'avui, s'han desenvolupat tecnologies per reduir la concentració de CO<sub>2</sub> en el medi ambient, concretament, en els processos de generació del CO<sub>2</sub>, com per exemple a les xemeneies industrials. Tot i així, encara no s'ha desenvolupat cap tecnologia amb èxits importants que capturi el CO<sub>2</sub> directament de l'aire atmosfèric. D'altra banda, els materials adsorbents sòlids avançats que puguin atendre adequadament els requisits inherents dels sistemes de captura de CO<sub>2</sub> han estat al punt de mira durant els últims anys. En concret, l'atenció s'ha centrat sobretot en els materials basats en grafè i es proposen com una generació d'adsorbents de CO<sub>2</sub> eficaços i amb gran volum d'adsorció, degut a la seva excepcional superfície específica, l'excel·lent conductivitat tèrmica, bones propietats mecàniques i una bona estabilitat química. Per tant, el disseny i la síntesi de materials porosos amb grafè amb una gran superfície de volum de porus per a la captació de CO<sub>2</sub> semblen una direcció de recerca prometedora.

Aquesta tesi s'emmarca en el desenvolupament de nous materials híbrids de grafè i les seves diferents estructures, combinats principalment amb *metal organic frameworks* (MOFs) i incidint en la corresponent caracterització dels materials sintetitzats. Per tant, se sintetitzaran MOFs combinats amb estructures de grafè i s'estudiarà la funcionalització del material amb altres molècules que millorin l'afinitat amb el CO<sub>2</sub>. L'objectiu principal és assolir una quantitat de captura de CO<sub>2</sub> rellevant directament de l'aire atmosfèric a través d'aquests materials porosos sintetitzats.

PARAULES CLAU: canvi climàtic, CO<sub>2</sub>, materials adsorbents, grafè, *metal organic frameworks*

## Elucidant els mecanismes que governen la interacció de radionúclids d'origen natural (NOR) i lantànids en sòls i materials rics en carboni

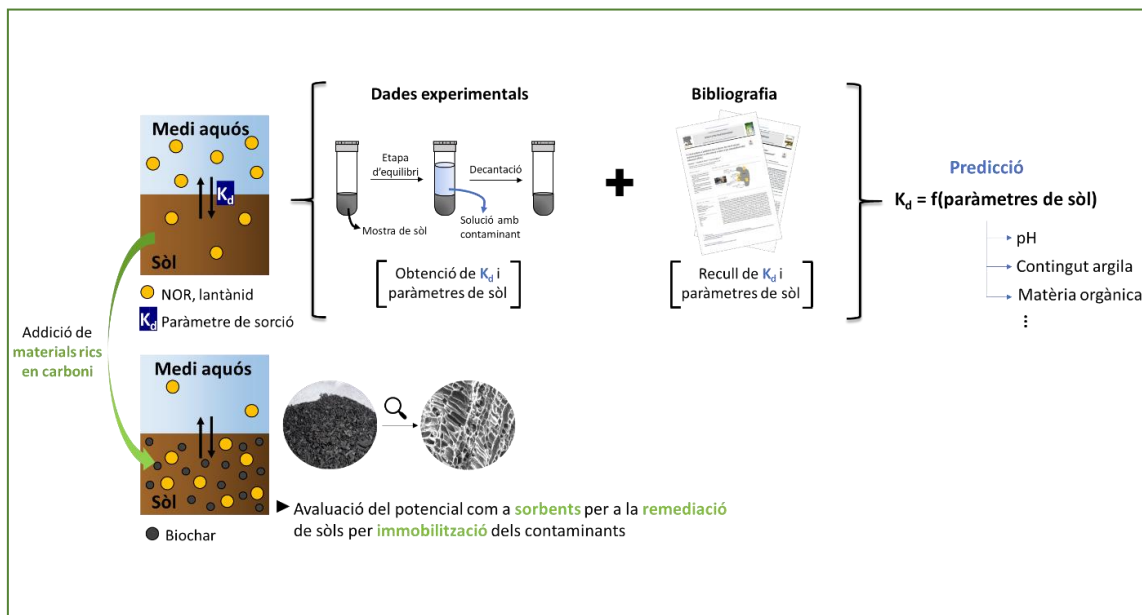
Joan Serra Ventura,<sup>1</sup> Anna Rigol Parera,<sup>2</sup> Miquel Vidal Espinar<sup>2</sup>

<sup>1</sup>Departament d'Enginyeria Química i Química Analítica, Secció de Química Analítica

<sup>2</sup> Departament d'Enginyeria Química i Química Analítica, Secció de Química Analítica

jserrav@ub.edu

Programa de doctorat de Química Analítica i Medi Ambient



Els radionúclids d'origen natural (NOR) i els lantànids es poden trobar en el medi ambient per acumulació de residus provinents d'explotacions mineres i altres indústries, i es transfereixen dels sòls i aigües a plantes i animals, de manera que entren a la cadena tròfica i causen efectes adversos a la nostra salut. Així doncs, és d'interès estudiar la interacció i la mobilitat dels NOR i lantànids en sòls i elucidar els mecanismes a través dels quals s'hi queden retinguts i quines característiques del sòl tenen un paper clau en aquest procés. Per aquest motiu, duré a terme experiments posant en contacte solucions dels contaminants amb sòls per tal d'obtenir paràmetres de sorció que informen de l'afinitat entre contaminant i sòl. Les dades experimentals obtingudes, juntament amb les disponibles a la literatura, s'utilitzaran per construir models matemàtics que permetin predir aquest comportament a partir de les característiques dels sòls, per actuar amb bon criteri en un escenari de contaminació ambiental. Finalment, s'avaluarà el potencial de materials rics en carboni com el biocarbó o *biochar*, obtinguts a partir del reciclatge de biomassa agrícola i forestal, com a sorbents sostenibles per a la descontaminació d'aigües i remediació de sòls afectats per NOR i lantànids.

PARAULES CLAU: NOR, lantànids, sorció, predicció, materials rics en carboni

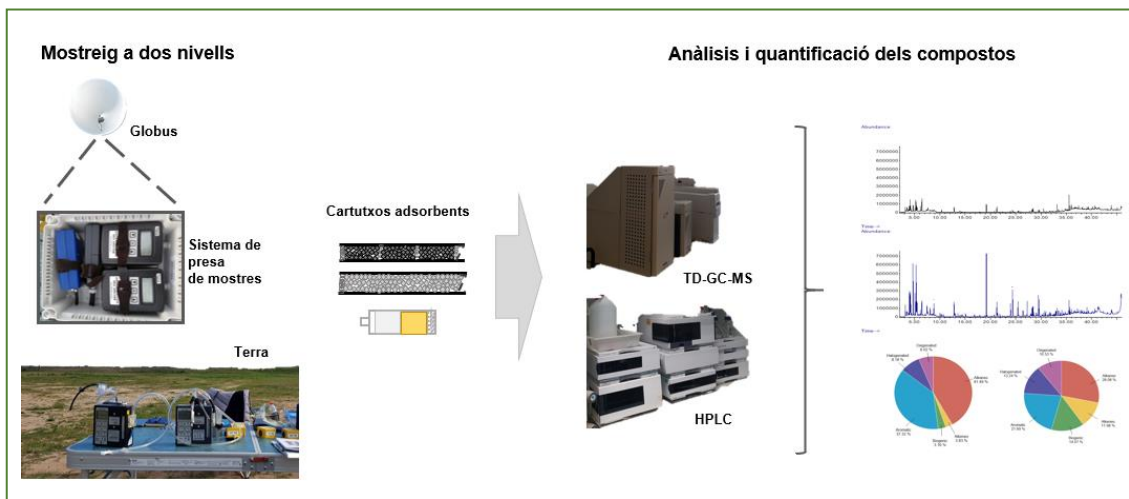
## Estudi de la distribució vertical de contaminants orgànics atmosfèrics en fase gas en condicions estàndard i d'inversió tèrmica

Isabel Díez Palet,<sup>1</sup> Joan Grimalt Obrador,<sup>1</sup> Pilar Fernández Ramón<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Departament de Química Ambiental, Institut de Diagnòstic Ambiental i Estudis de l'Aigua (IDAEA-CSIC)

[isabel.diez@idaea.csic.es](mailto:isabel.diez@idaea.csic.es)

Programa de doctorat de Química Analítica i Medi Ambient



Una gran part dels episodis d'alta contaminació estan relacionats amb canvis en les condicions meteorològiques combinades amb els nivells d'emissions. Els episodis d'inversió tèrmica impliquen condicions d'estancament que restringeixen la dispersió dels contaminants atmosfèrics i afavoreixen la transformació de compostos químics mitjançant la fotooxidació. L'objectiu principal de la tesi doctoral és l'estudi vertical exhaustiu dels nivells i de la composició química dels compostos orgànics volàtils (COV) i la influència que tenen en la formació d'ozó troposfèric en condicions d'absència i presència d'inversió tèrmica. Per a l'estudi vertical dels COV i ozó, es faran mostreigs a dos nivells d'altura, per sota i per sobre la capa d'inversió tèrmica, utilitzant un sistema de mostreig format de globus aerostàtics equipats amb bombes de succió i cartutxos adsorbents. Les campanyes de mostreig en diferents zones (urbanes, rurals i semirurals) i en diferents estacions de l'any permetran estudiar exhaustivament el comportament i l'estacionalitat d'aquests compostos. Les mostres s'analitzaran mitjançant tècniques de cromatografia de gasos acoblada a espectrometria de masses i cromatografia líquida d'alta resolució. Els resultats obtinguts permetran definir quines són les millors estratègies per minimitzar l'impacte de l'acumulació dels compostos tòxics durant els episodis d'alta contaminació atmosfèrica.

PARAULES CLAU: inversió tèrmica, compostos orgànics volàtils, ozó, globus aerostàtic

## Noves resines selectives escintil·ladores per a la mesura avançada de la radioactivitat

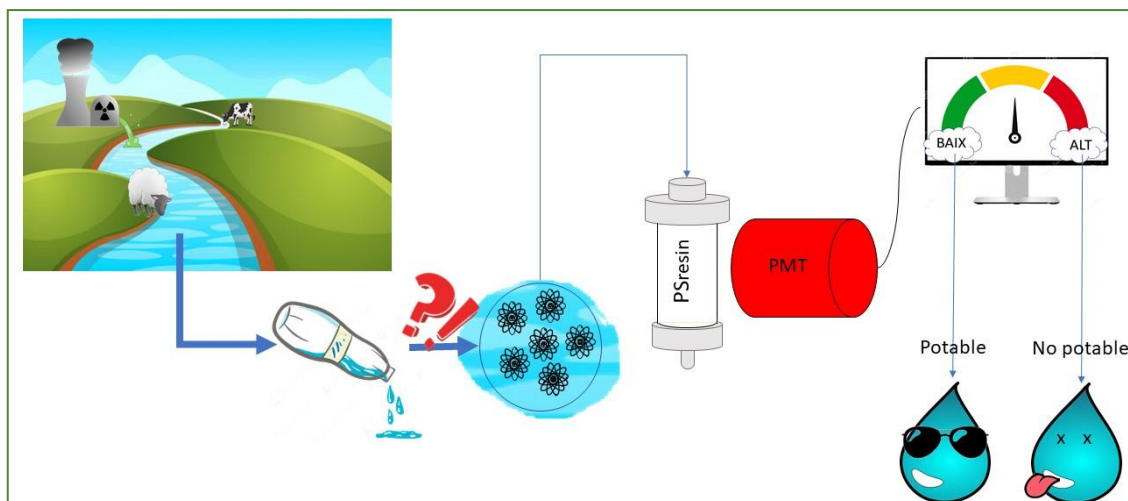
Isaac Giménez Guerra,<sup>1</sup> Alex Tarancón Sanz,<sup>1,2</sup> Hèctor Bagán Navarro<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Departament d'Enginyeria Química i Química Analítica, Secció de Química Analítica

<sup>2</sup>Programa Serra-Húnter, Generalitat de Catalunya, Barcelona

\*Isaacgimenez@ub.edu

Programa de doctorat de Química Analítica i Medi Ambient



El seguiment dels nivells de radioactivitat en el medi és una necessitat derivada dels danys biològics que pot produir. Per tant, se n'ha de detectar la presència abans que pugui disseminar-se i incorporar-se a la cadena tròfica.

Per aquesta raó és necessari disposar d'estratègies integrades de caracterització per a aquelles situacions d'emergència (com ara accidents, actes terroristes, etc.) on una anàlisi convencional no ofereix una resposta eficient. El desenvolupament, la validació i la implementació de procediments que permetin mesurar la radioactivitat mitjançant una reducció del personal, reactius, residus i temps necessaris, són un repte dins el camp de la radioactivitat.

En aquest escenari sorgeix l'ús de PSresin: micropolímers escintil·ladors recoberts d'un extractant selectiu. Les PSresin presenten l'avantatge que la separació i la mesura es poden fer utilitzant el mateix material, de manera que s'eliminen dues etapes del procés d'anàlisi: es redueix el temps d'anàlisi, el consum de reactius i la generació de residus.

La present tesi doctoral té dos objectius:

- Avaluar nous procediments de preparació de PSresin que generin materials amb millors capacitats: escintil·ladors entrecreuat porosos amb l'extractant enllaçat covalentment i polímers centellejadors impresos.
- Desenvolupar noves PSresin per radionúclids d'interès: isòtops de plutoni, actínids i  $^{63}\text{Ni}$ , i la mesura seqüencial de radionúclids mitjançant la mesura en tàndem.

PARAULES CLAU: radioactivitat, PSresin, centelleig, emergències, micropolímers

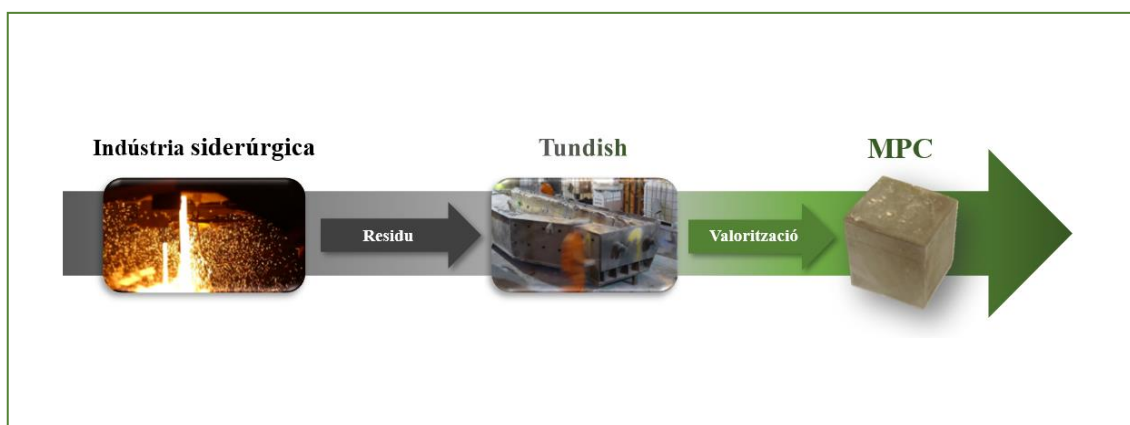
## Desenvolupament i avaluació de ciments de fosfats de magnesi mitjançant l'ús de subproductes i residus industrials

Anna Alfocea Roig,<sup>1</sup> Joan Formosa Mitjans<sup>1</sup> i Jessica Giró Paloma<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Departament de Ciència de Materials i Química Física, Secció de Ciència i Enginyeria de Materials

annaalfocea@ub.edu

Programa de doctorat d'Enginyeria i Ciències Aplicades



Actualment, aproximadament el 8 % de les emissions globals de CO<sub>2</sub> s'originen a la indústria del ciment. És per aquest motiu que existeix un repte mediambiental, tecnològic i científic de (re)valorització de diferents residus i subproductes industrials amb l'objectiu de formular un ciment capaç de substituir el ciment portland ordinari (OPC, de l'anglès *ordinary portland cement*) en alguna de les seves aplicacions en el camp de la construcció. Principalment, en aquelles en què es puguin fer materials prefabricats, de petites i/o mitjanes dimensions, com ara llambordes, panots, mobiliari urbà, etc.

Una possible alternativa són els ciments de fosfat de magnesi (MPC, de l'anglès *magnesium phosphate cement*). L'elaboració dels MPCs consisteix en la reacció d'òxid de magnesi en pols (MgO) amb fosfat monopotàssic (KH<sub>2</sub>PO<sub>4</sub>) per formar fosfat de magnesi i potassi (MgKPO<sub>4</sub>·6H<sub>2</sub>O) a temperatura ambient. L'estudi se centra a desenvolupar un ciment de fosfat de magnesi en el qual l'òxid de magnesi utilitzat és un residu provinent de la indústria siderúrgica anomenat *tundish*. És per aquesta raó que aquest ciment és classificat com a material sostenible respecte a l'MPC convencional, ja que potencia criteris de sostenibilitat i medi ambient. En particular, es vol avaluar com diferents residus i subproductes industrials rics en silici afecten la xarxa de l'MPC sostenible per tal de proposar noves línies d'aplicacions. Per quantificar l'impacte ambiental dels MPCs sostenibles s'elaborarà una anàlisi del cicle de vida (ACV).

PARAULES CLAU: ciment de fosfat de magnesi (MPC), anàlisi del cicle de vida (ACV), economia circular, residus, ciment portland

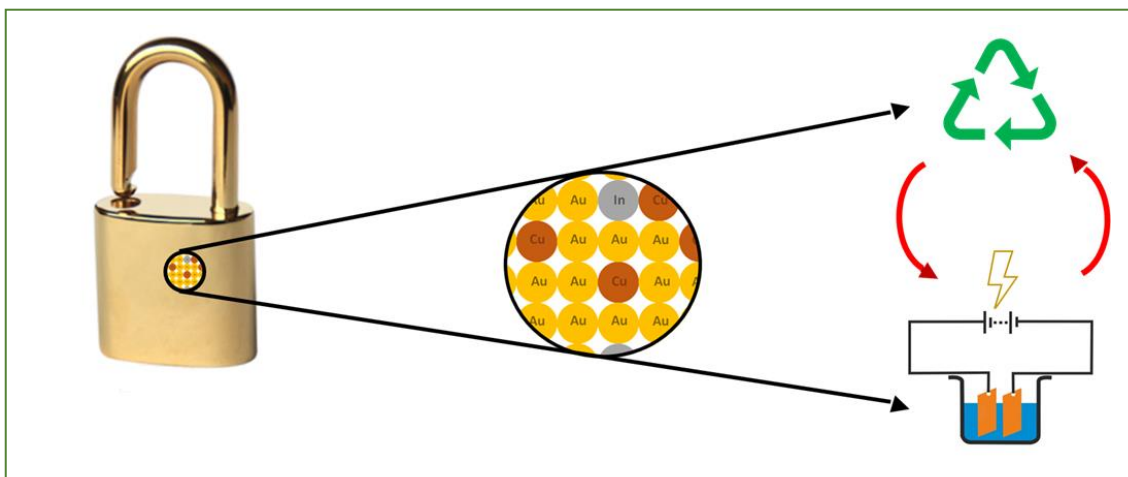
## Aliatge Au-Cu-In: formulació i reptes

Mohamed Amzian El Moussaoui,<sup>1</sup> Maria Sarret Pons,<sup>1</sup> Teresa Andreu Arbella<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Departament de Ciència de Materials i Química Física, Secció de Química Física, Institut de Nanociència i Nanotecnologia

m.amzian@ub.edu

Programa de doctorat d'Enginyeria i Ciències Aplicades



L'electrodeposició d'or té nombroses aplicacions funcionals (biosensors, dispositius electrònics...) i decoratives. L'objectiu d'aquest projecte de recerca és el desenvolupament d'un bany electroquímic per a l'obtenció d'un aliatge ternari d'or de 18 kt. Un dels reptes d'aquest tipus de bany és aconseguir l'estabilitat dels ions metàl·lics en solució. L'objectiu principal del treball és desenvolupar la formulació, el manteniment i la caracterització d'aquest bany perquè sigui estable i mantingui el rendiment i per poder obtenir recobriments amb un aspecte i propietats adequats.

Per al desenvolupament d'aquest projecte, es plantegen els objectius específics següents:

- Proposta de formulació del bany, fent un estudi electroquímic de laboratori del procés de formació dels recobriments en funció de la composició de l'electròlit, i caracterització del material en condicions controlades.
- Estudi de l'estabilitat dels banyos i monitoratge per tècniques òptiques.
- Incorporació d'additius i estudi del seu efecte en l'aspecte i les propietats del recobriments.
- Disseny i posada en marxa d'una planta pilot del procés industrial. Proposta de monitoratge/anàlisi del consum i reposició de metalls actius i additius. En funció de l'objectiu *b*) s'implementaria un sistema òptic de monitoratge en línia.

PARAULES CLAU: electrodeposició, or, bany electroquímic, additius

## Nous escintil·ladors plàstics per a la mesura avançada de la radioactivitat

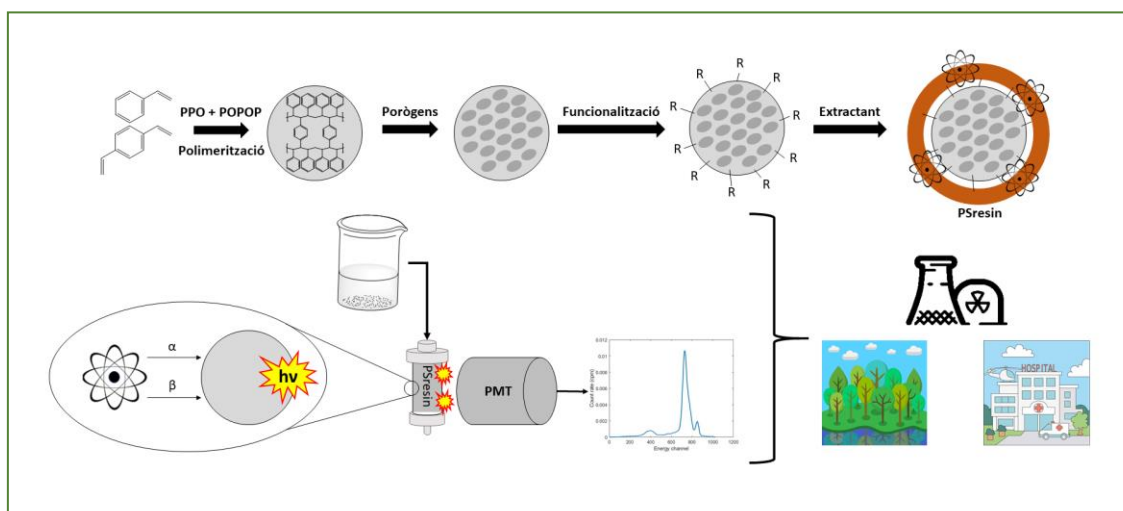
Arnau Coma Garcia,<sup>1</sup> Alex Tarancón Sanz,<sup>2</sup> Héctor Bagán Navarro<sup>2</sup>

<sup>1</sup>Departament d'Enginyeria Química i Química Analítica, Secció de Química Analítica

<sup>2</sup>Departament d'Enginyeria Química i Química Analítica, Secció de Química Analítica

*a.comagarcia@ub.edu*

Programa de doctorat de Química Analítica i Medi Ambient



Des de mitjans del segle xx, les tècniques de mesura de la radioactivitat han estat àmpliament desenvolupades. Entre aquestes tècniques es troben els centellejadors plàstics en forma de microesfera (PSm), materials que presenten capacitats per detectar partícules  $\alpha$  i  $\beta$ , seguint les mateixes bases que en la tècnica de centelleig líquid, en un suport polimèric. Les PSm actuen també com a suport per a la immobilització de resines extractants per obtenir PSresins amb la capacitat de fer extraccions selectives i mesures en un mateix suport. Actualment aquestes PSm se sintetitzen en base de poliestirè lineal i presenten diverses limitacions com ara una elevada solubilitat en solvents orgànics i una baixa resistència en medis agressius. Per aquest motiu, en aquesta tesi es desenvoluparan nous materials en base de poliestirè entrecreuat (CPSm). Aquesta modificació estructural permetria augmentar les capacitats d'aquests materials i produir una millora en la tècnica del centelleig plàstic. Així doncs, els objectius de la tesi per assolir són els següents:

- Desenvolupar un mètode per a l'obtenció de CPSm.
- Emprar diferents solvents orgànics per incorporar porus a les CPSm.
- Funcionalitzar la superfície per augmentar la resistència de les resines extractants.

PARAULES CLAU: radioactivitat, centelleig, plàstics, polimerització, mesura



## Emissions de partícules en zones portuàries: alliberació, exposició i anàlisi

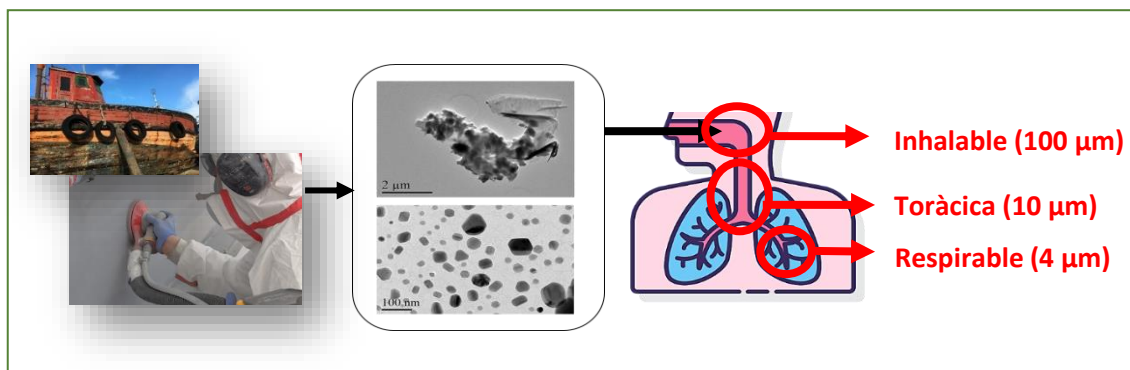
Maria López Olivé,<sup>1,2</sup> Mar Viana<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Institute of Environmental Assessment and Water Research (IDAEA-CSIC)

<sup>2</sup> Universitat de Barcelona, Facultat de Química

[olivelopezmaria@gmail.com](mailto:olivelopezmaria@gmail.com); [maria.lopez@idaea.csic.es](mailto:maria.lopez@idaea.csic.es)

Programa de doctorat de Química Analítica i Medi Ambient



La tesi doctoral es troba dins del projecte IDEALPORT, liderat per l'IDAEA-CSIC, i consisteix a quantificar i qualificar les partícules emeses durant les activitats en la indústria i l'impacte que poden causar. En concret, aquest projecte se centra en les emissions que es produeixen a causa de les activitats de manteniment dels vaixells d'ús recreatiu o personal a les drassanes del port de Mallorca (un dels ports europeus on es porta a terme un percentatge alt d'aquestes activitats). El transport marítim es va incrementant i no hi ha gaires estudis previs que parlin d'emissions de partícules en aquest sector industrial. Així doncs, l'objectiu principal del projecte és avaluar les emissions de partícules, incloses les partícules ultrafines, de les activitats de manteniment de vaixells recreatius i la seva toxicitat, tant per a la salut humana com per al medi ambient.

Fins ara, ja s'han fet les campanyes de mostreig, que quantifiquen les concentracions en massa, concentracions en nombre de partícules i el diàmetre i la morfologia. A més s'ha dut a terme l'anàlisi química de les partícules de la fracció respirable i toràtica i s'ha quantificat la toxicitat i l'estrès oxidatiu (ROS) de certes mostres en diferents escenaris de mostreig amb una tècnica *in vitro*, usant cèl·lules pulmonars humanes.

Per concloure el que s'ha exposat amb els resultats extrets fins al moment: les activitats de manteniment dels vaixells són una font de partícules ultrafines que són potencialment perilloses per a la salut i el medi ambient; s'han observat partícules regulars i irregulars (*engineered nanoparticles*) durant l'abrasió mecànica dels recobriments superficials coincidint amb la composició química de les partícules respirables; les anàlisis toxicològiques evidencien certa toxicitat, per la qual cosa s'estudiarà aquest paràmetre amb més profunditat en un futur.

PARAULES CLAU: partícules ultrafines, drassanes de recondicionament i reparació d'embarcacions, impactes en la salut humana i el medi ambient, nanopartícules d'origen antropogènic, partícules tòxicament perilloses

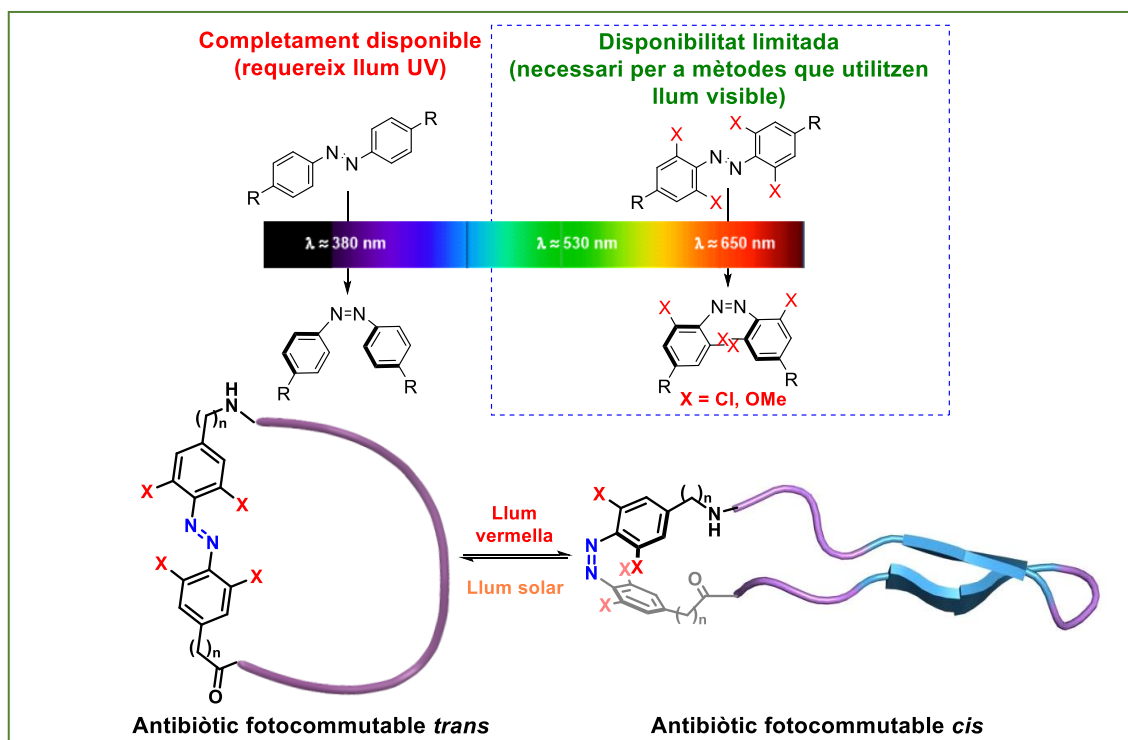
## Síntesi de nous antibiòtics fotocommutables

Albert Ruiz Soriano,<sup>1</sup> Mercedes Amat Tusón,<sup>1</sup> Xavier Just-Baringo<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Laboratori de Química Orgànica, Facultat de Farmàcia i Ciències de l'Alimentació

[aruizsor@ub.edu](mailto:aruizsor@ub.edu)

Programa de doctorat de Química Orgànica



Una de les preocupacions recents en l'àmbit de la salut és l'ús extens d'antibiòtics, tant a la ramaderia com en humans, cosa que pot portar a l'aparició i propagació de bacteris resistents. El desenvolupament de teràpies segures, selectives i no invasives, és essencial per minimitzar efectes secundaris i reduir l'impacte ambiental. Diversos precedents presenten la llum visible com un bon mecanisme per controlar la localització i l'activitat temporal d'un fàrmac, gràcies a la utilització de molècules fotocommutables. Aquestes molècules tenen la particularitat que poden canviar la seva geometria quan són il·luminades amb llum d'una determinada longitud d'ona. El nostre interès se centra en els azobenzens *orto*-substituïts, que poden canviar la seva conformació mitjançant llum visible, i en la seva incorporació en antibiòtics per permetre'n l'activació mitjançant llum vermella i la desactivació posterior en ser exposats a la llum solar. Així, aconseguiríem antibiòtics que poden ser activats localitzadament i que es desactiven en ser alliberats al medi ambient de manera inactiva i se n'evitaria l'acumulació a l'entorn. L'objectiu de la tesi és desenvolupar una metodologia per introduir grups funcionals als azobenzens de manera pràctica i eficient emprant l'activació C—H i incorporar-los posteriorment en antibiòtics classificats com a crítics per l'OMS.

PARAULES CLAU: antibiòtics, activació C—H, azobenzens, fotocommutadors, fotofarmacologia

## Hidroboració i hidroacilació catalítiques amb complexos de Rh i Co

Javier Eusamio<sup>1,2</sup> Arnald Grabulosa<sup>1,2</sup> Anton Vidal-Ferran<sup>1,2,3</sup>

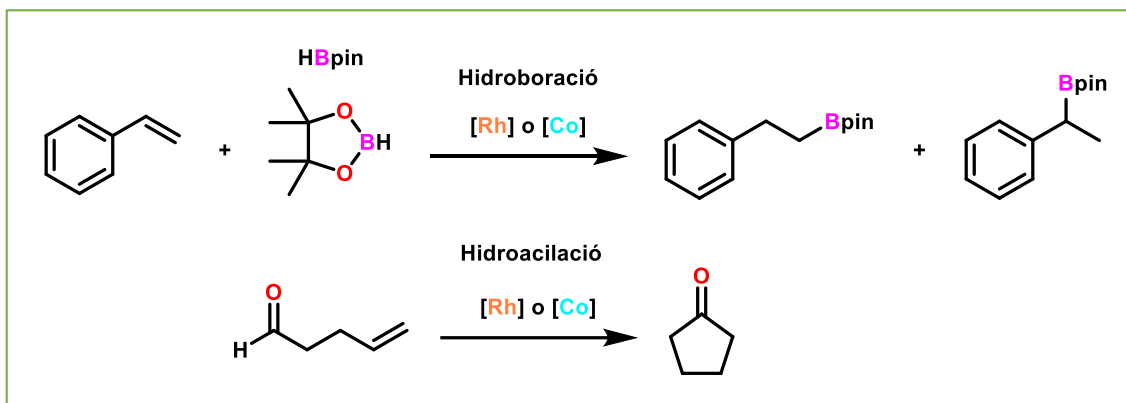
<sup>1</sup>Departament de Química Inorgànica i Orgànica, Secció de Química Inorgànica

<sup>2</sup>Institut de Nanociència i Nanotecnologia (IN<sup>2</sup>UB)

<sup>3</sup>Institució Catalana de Recerca i Estudis Avançats (ICREA)

jeusamro7@alumnes.ub.edu

Programa de doctorat de Química Orgànica

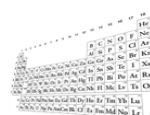


La catàlisi és una eina imprescindible per a la indústria a causa de la seva alta eficiència, però també pels beneficis mediambientals que comporta, ja que no genera residus. D'entre les múltiples reaccions catalitzades conegudes, aquesta tesi se centra en dues: la hidroboració i la hidroacilació d'alquens. En ambdós casos es tracta de reaccions catalitzades per complexos organometàl·lics de rodi o de cobalt. Els sistemes basats en rodi estan més ben establerts, però els basats en cobalt s'estan començant desenvolupar perquè aquest metall és una alternativa molt més econòmica i sostenible que el rodi. Malgrat això, el cobalt presenta una sèrie de dificultats que caldrà resoldre escollint els lligands adequats per obtenir sistemes actius i selectius.

PARAULES CLAU: catàlisi, Rh, Co, hidroacilació, hidroboració

## ÍNDEX DE PARAULES CLAU

activació C—H	14	impactes en la salut humana	
additius	11	i el medi ambient	13
anàlisi del cicle de vida (acv)	10	inversió tèrmica	2, 8
antibiòtics	14	lantànids	7
azobenzens	14	matèria particulada	2
bany electroquímic	11	materials adsorbents	6
càncer	4	materials orgànics	1
canvi climàtic	6	materials rics en carboni	7
catàlisi	15	mesura	12
catalitzadors d'àtoms aïllats	5	<i>metal organic frameworks</i>	6
centelleig	9, 12	metall de transició	5
centrals solars		metodologia sintètica	4
de concentració	3	micropolímers	9
ciència de materials	3	nanopartícules d'origen	
ciment de fosfat		antropogènic	13
de magnesi (MPC)	10	NOR	7
ciment portland	10	or	11
CO	15	ozó	8
CO <sub>2</sub>	6	partícules tòxicament	
compostos orgànics volàtils	8	perilloses	13
contaminants orgànics	2	partícules ultrafines	13
distribució vertical	2	plàstics	12
drassanes de recondicionament		polimerització	12
i reparació d'embarcacions	13	predicció	7
economia circular	3, 10	PSresin	9
electrodeposició	11	radioactivitat	9, 12
emergències	9	residus	10
emmagatzematge d'energia	3	Rh	15
energies renovables	3	semiconductors orgànics	1
fotocommutadors	14	síntesi de proteïnes	4
fotofarmacologia	14	<i>Sonic Hedgehog</i>	4
fotomodulació	1	sorció	7
globus aerostàtic	8	teoria del funcional de	
globus meteorològics	2	la densitat	5
grafè	6	transistors orgànics	1
hidroacilació	15	zeolita	5
hidroboració	15		





UNIVERSITAT DE  
BARCELONA

#### IV Tesimarató de Química

Jornada de comunicació de joves investigadors de la Facultat de Química  
(16 de novembre de 2021)

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

Data d'edició: desembre de 2021



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

