



Universitat Autònoma de Barcelona

Departament de Química

Proposta projecte de treball fi de màster (TFM) curs 2016-2017

PROPOSTES DE TREBALL DE FI DE MÀSTER CURS 2016/2017.
MÀSTER IN INDUSTRIAL CHEMISTRY AND INTRODUCTION TO CHEMICAL RESEARCH

Proposta	Professor	Títol de la proposta de TFM
1	Dr. Manel Alcalà	Development and validation of a near-infrared spectral library for pharmaceutical raw material identification
2	Dr. Ramón Alibés	Synthesis of cyclobutane scaffolds employing a Zr-mediated ring contraction reaction as a key reaction
3	Dr. Julià Alonso	Miniaturización, Integración y Paralelización de Procesos y Ensayos (Bio)Químicos. Aplicaciones Innovadoras de las Plataformas de Microfluídica en el campo medioambiental, biotecnológico y aeroespacial.
4	Dr. Jordi Bartrolí i Dr. Esteve Fàbregas	Refinement de bio-oil mitjançant el desenvolupament de microreactors amb materials catalítics integrats
5	Dr. Joan Carles Bayón	Aplicació de noves fosfines àcides sulfonades en processos catalítics de formació d'enllaços C-C.
6	Dr. Pau Bayón Rueda	Nuevos Complejos Fotoactivos de Pt(II) con Propiedades Antitumorales Modulables
7	Dr. Roger Bofill	Nanopartícules metàl·liques per a reducció de CO ₂
8	Dr. Félix Busqué	Synthesis of azobenzene based photoswitches: on the quest of optimized two-photon neuronal optical control
9	Dra. Marta Figueredo	Photochemical studies related to the synthesis of cyclobutanic feromones
10	Dr. Jordi Garcia-Antón	Improvement of the water oxidation catalytic properties of metallic oxide nanoparticles anchored to semiconducting materials
11	Dr. Gonzalo Guirado	Estudi de processos electroquímics en Dissolvents Verds
12	Dr. Jordi Hernando	Photovoltaic nanostructures based on peryleneimide
13	Dra. Ona Illa	Development of new contrast agents for magnetic resonance imaging based on gad-dota.
14	Dr. Carles Jaime Cardiel	Simulacions de dinàmica molecular de nanopartícules d'or funcionalitzades amb tensioactius basats en sals d'imidazoli, emprant mètodes "coarse-grain".
15	Dr. Santiago Maspoch	Control de calidad en la industria farmacéutica
16	Dras. Cristina Palet i Maria del Mar Baeza	Mètode de determinació d'hidrocarburs poliaromàtics (PAHs) en sòls mitjançant pre-tractament de les mostres amb microones analític, etapa de purificació adient, i determinació de l'extracte amb cromatografia de gasos acoblada a detector de masses (GC-MS). Posta a punt del mètode.
17	Dra. Maria Isabel Pividori	BeSens. Next Generation of Rapid Test for worldwide diagnostic
18	Dra. Roser Pleixats	Towards the preparation of periodic mesoporous organosilica nanoparticles (PMON) for biomedical applications
19	Dra. Josefina Pons	Materials porosos. Síntesis, caracterització i aplicacions de MOFs
20	Dra. M ^a del Mar Puyol	Intensificació de processos de síntesi de nanomaterials per aplicacions analítiques.
21	Dr. Xavier Sala	Boosting the water oxidation activity of transition-metal based oxide nanoparticles
22	Dra. Rosa M ^a Sebastián	Development of environmentally friendly synthetic methodology for the preparation of polymeric materials used in the aerospace industry
23	Dr. Gregori Ujaque	Molecular Modelling of Supramolecular Nanocontainers and Their Potential Use in Catalysis
24	Dr. Manel del Valle	Llengües electròniques en la detecció de defectes en el vi
25	Dra. Adelina Vallribera	Artificial surfaces: fluorescent dyes for high added-value paper



Universitat Autònoma de Barcelona

Departament de Química

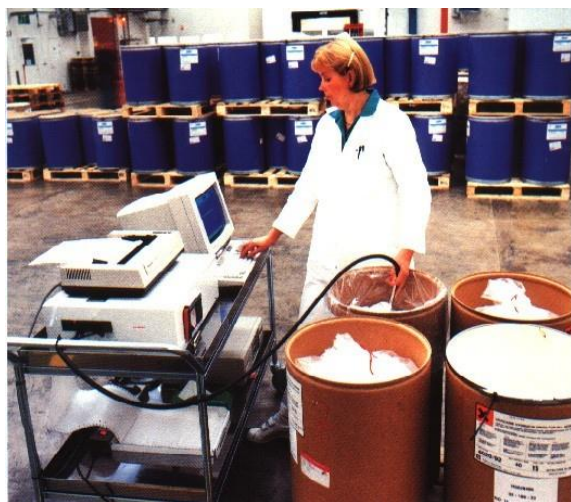
Proposta projecte de treball fi de màster (TFM) curs 2016-2017

PROPOSTA 1

Títol del projecte: Development and validation of a near-infrared spectral library for pharmaceutical raw material identification

Professor que presenta el projecte de TFM: Manel Alcalà

Breu descripció del projecte a desenvolupar pel alumne (màxim 6 línies + una possible petita figura o esquema + possibles referències bibliogràfiques o enllaç a pàgina web):



The construction of a near-infrared spectral library as an alternative to qualitative analysis methods for identifying pharmaceutical raw materials is proposed. Various conceptual and practical aspects of library construction will be assessed and discussed. The library including NIR spectra for a number of different raw materials using will be modelled using different pattern recognition strategies. The concept of main library and sub-cascading libraries will be evaluated. The construction of sub-libraries and their performance will be validated according to

the appropriate guidelines.

References:

1- Analyst, 2001,126, 2212-2217 <http://pubs.rsc.org/en/content/articlelanding/2001/an/b105012p>

2- EMA guideline 2014

http://www.ema.europa.eu/docs/en_GB/document_library/Scientific_guideline/2014/06/WC500167967.pdf

3-The European Pharmacopoeia: Chemometric methods applied to analytical data (5.21)

<https://www.edqm.eu/en/news/new-ph-eur-general-chapter-chemometrics-now-available#sthash.DeGFerPA.dpuf>

Dades de contacte amb el professor

Direcció correu electrònic: manel.alcala@uab.cat

Número telèfon: **93 5814899**



Universitat Autònoma de Barcelona

Departament de Química

Proposta projecte de treball fi de màster (TFM) curs 2016-2017

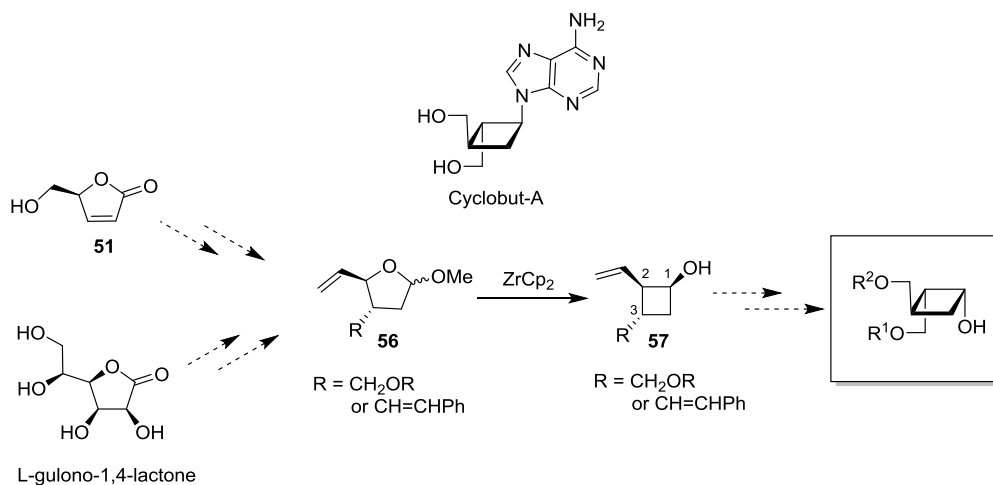
PROPOSTA 2

Títol del projecte: Synthesis of cyclobutane scaffolds employing a Zr-mediated ring contraction reaction as a key reaction

Professor que presenta el projecte de TFM: **Ramon Alibés**

Breu descripció del projecte a desenvolupar pel alumne:

Carbocyclic nucleosides analogues (CNAs) constitute a prominent class of antiviral and anticancer prodrugs whose capacity to mimic the structural and functional features of natural nucleosides allows them to interact with viral and/or cellular enzymes inhibiting thus critical processes in the metabolism of nucleic acids. In a line of research devoted to prepare cyclobut-A analogues, this project will be focused on the development of a new route to enantioselective cyclobutane building blocks by means of a zirconocene-mediated reaction of a key 4-vinylfuranoside intermediate.



Dades de contacte amb el professor

Direcció correu electrònic: ramon.alibes@uab.cat

Número telèfon: 93 581 2897



Universitat Autònoma de Barcelona

Departament de Química

Proposta projecte de treball fi de màster (TFM) curs 2016-2017

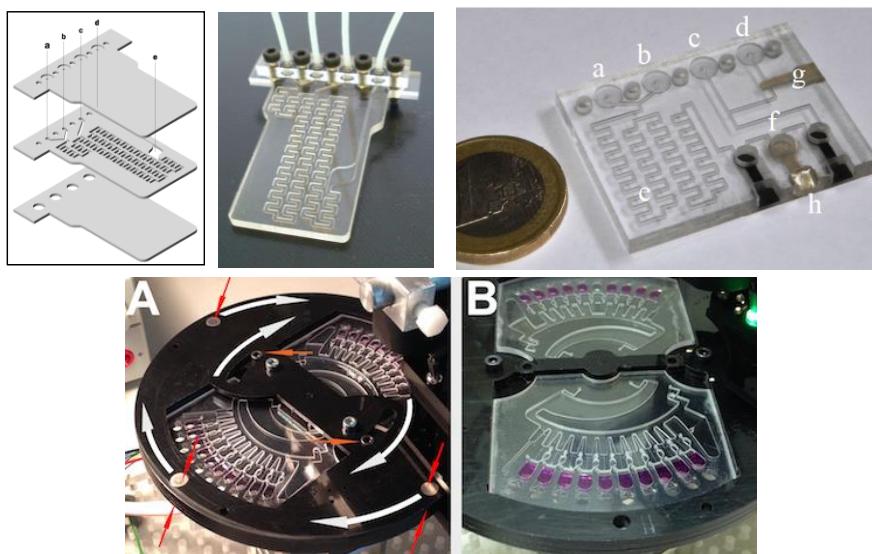
PROPOSTA 3

Títol del projecte: Miniaturització, Integració y Paralelització de Procesos y Ensayos (Bio)Químicos. Aplicaciones Innovadoras de las Plataformas de Microfluídica en el campo medioambiental, biotecnológico y aeroespacial.

Professor que presenta el projecte de TFM: **Julian Alonso Chamarro**

La microfluídica ha sido clave para el crecimiento exponencial observado en el área de la instrumentación analítica miniaturizada, ya que aporta la conectividad necesaria entre los diferentes elementos y etapas asociadas con el procedimiento analítico convirtiéndose en una herramienta imprescindible para su automatización y optimización.

El objetivo principal del proyecto es aplicar la potencialidad de las plataformas de microfluídica desarrolladas, utilizando las tecnologías de microfabricación a disposición del equipo de investigación, en una resolución innovadora de problemas planteados en áreas como la automatización de bioensayos o la monitorización de procesos medioambientales (tratamiento aguas y control de calidad de estas) y biotecnológicos (producción industrial de fármacos en biorreactores, monitorización y optimización de cultivos celulares, etc.)



(<https://gsbanalyticalmicrosystems.wordpress.com/research/>)

Dades de contacte amb el professor

Direcció correu electrònic: Julian.Alonso@uab.es

Número telèfon: 915812149



Universitat Autònoma de Barcelona

Departament de Química

Proposta projecte de treball fi de màster (TFM) curs 2016-2017

PROPOSTA 4

Títol del projecte: Refinament de bio-oil mitjançant el desenvolupament de microreactors amb materials catalítics integrats

Professors que presenta el projecte de TFM: **Jordi Bartrolí i Esteve Fàbregas**

Breu descripció del projecte a desenvolupar pel alumne:

El bio-oil és un biocombustible obtingut a partir de biomassa (no comestible) mitjançant piròlisi ràpida. El projecte representa un pas endavant en la intensificació de processos, més eficients gràcies a la seva automatització i miniaturització. A més, les implicacions derivades d'aquest projecte són significatives no només en el camp energètic, per l'ús del bio-oil com a combustible líquid renovable, sinó també en la indústria química de base, partint del bio-oil i el seu refinament com el procés inicial d'una biorefineria.

Dades de contacte amb el professor: Departament de Química. Despatx C7-247

Direcció correu electrònic: Jordi.bartroli@uab.cat

Número telèfon: 93 581 2918



Universitat Autònoma de Barcelona

Departament de Química

Proposta projecte de treball fi de màster (TFM) curs 2016-2017

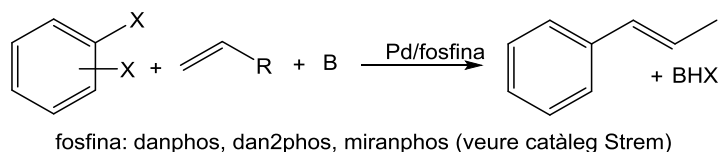
PROPOSTA 5

Títol del projecte: Aplicació de noves fosfines àcides sulfonades en processos catalítics de formació d'enllaços C-C.

Professor que presenta el projecte de TFM: **J. Carles Bayón**

Breu descripció del projecte a desenvolupar pel alumne (màxim 6 línies + una possible petita figura o esquema + possibles referències bibliogràfiques o enllaç a pàgina web):

Se investigará l'aplicació de noves fosfines hidrosolubles desenvolupades al nostre grup a reaccions tipus Heck catalitzada per complexos Pd-fosfina i, eventualment, el possible reciclatge i reutilització del catalitzador.



D. Peral et al. Eur. Pat. Appl. (2011), EP 2319852 A1 20110511

D. Herrera Span. (2014), ES 2459790 A1 20140512

D. Peral et al. Catalysis Science & Technology (2016), 6(3), 800-808.

J.M. Balbino et al. ChemCatChem (2015), 7(6), 972-977

Dades de contacte amb el professor

Direcció correu electrònic: joancarles.bayon@uab.cat

Número telèfon: 935812889



Universitat Autònoma de Barcelona

Departament de Química

Proposta projecte de treball fi de màster (TFM) curs 2016-2017

PROPOSTA 6

Títol del projecte: **Nuevos Complejos Fotoactivos de Pt(II) con Propiedades Antitumorales Modulables**

Professor que presenta el projecte de TFM: **Pau Bayón Rueda**

Breu descripció del projecte a desenvolupar pel alumne:

La quimioteràpia es uno de los tratamientos más extendidos contra el cáncer. Uno de los agentes antitumorales de uso más común ha sido y es el cis-diaminodicloroplatino(II) (cisplatino) aunque otros complejos basados en diferentes metales son también utilizados.¹ Sin embargo, todos estos complejos metálicos presentan severos efectos secundarios en los pacientes durante el tratamiento. Principalmente por este motivo, existe una gran necesidad de diseñar nuevos agentes antitumorales que presenten menos interacción con proteínas y más afinidad por el ADN, con el objeto de disminuir o paliar sus efectos secundarios. En el presente proyecto se pretende diseñar nuevos complejos fotoactivos de Pt(II),² de manera que los complejos formados actúen como interruptores moleculares, los cuales puedan ser activados o desactivados a voluntad mediante estímulos externos.

Dades de contacte amb el professor

Direcció correu electrònic: pau.bayon@uab.cat

Número telèfon: +34 93 581 48 80

¹

a) J. J. Wilson, S. J. Lippard, *Chem. Rev.* **2014**, 114, 4470; b) J. Reedijk, *Eur. J. Inorg. Chem.* **2009**, 1303; c) L. Kelland, *Nat. Rev. Cancer* **2007**, 7, 573.

²

Presa, A.; Brissos, R. F.; Caballero, A. B.; Borilovic, I.; Korrodi-Gregório, L.; Pérez-Tomás, R.; Roubeau, O.; Gamez, P. *Angew. Chem. Int. Ed.* **2015**, 54, 4561.



Universitat Autònoma de Barcelona

Departament de Química

Proposta projecte de treball fi de màster (TFM) curs 2016-2017

PROPOSTA 7

Títol del projecte: **Nanopartícules metàl·liques per a reducció de CO₂**

Professor que presenta el projecte de TFM: **Roger Bofill**

Breu descripció del projecte:

Un dels reptes principals als quals s'enfronta la nostra societat és l'escassetat d'energia i el canvi climàtic a causa de la nostra dependència en els combustibles fòssils. El projecte està orientat en la reducció de CO₂ per generar combustibles útils emprant nanopartícules metàl·liques (MNPs) com a catalitzadors. Així doncs, es sintetitzaran NPs de Fe, Co i Ni, metalls abundants i barats, per reducció química d'un precursor organometàl·lic o sal metàl·lica. També s'ampliarà l'estudi a NPs bimetàl·liques, ja que s'ha demostrat que aquestes sovint mostren una activitat catalítica superior gràcies a efectes sinèrgics o a la modificació de les propietats electròniques i geomètriques de les NPs.

Pàgina web: <https://seloxcat.wordpress.com/>

Dades de contacte amb el professor

Direcció correu electrònic: roger.bofill@uab.cat

Número telèfon: 93-581 28 86



Universitat Autònoma de Barcelona

Departament de Química

Proposta projecte de treball fi de màster (TFM) curs 2016-2017

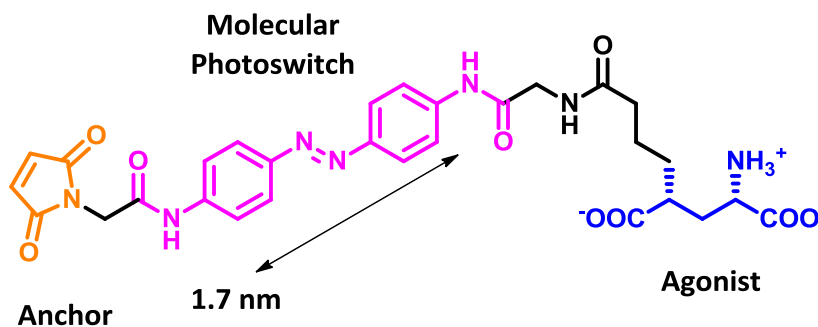
PROPOSTA 8

Títol del projecte: **Synthesis of azobenzene based photoswitches: on the quest of optimized two-photon neuronal optical control**

Professor que presenta el projecte de TFM: **Félix Busqué**

Breu descripció del projecte a desenvolupar pel alumne:

The project will be focused in the development of new photoswitches based on **MAG** structure designed to achieve control by irradiation of ionotropic glutamate receptors in neurons.^{1,2}



Maleimide-Azobenzene-Glutamate MAG

1. Izquierdo-Serra, M.; Gascón-Moya, M.; Hirtz, J.J.; Pittolo, S.; Poskanzer, K.E.; Ferrer, E.; Alibés, R; Busqué, F.; Yuste, R.; Hernando, J.; Gorostiza, P. *J. Am. Chem. Soc.* **2014**, *136*, 8693-8701.

Dades de contacte amb el professor

Direcció correu electrònic: Felix.busque@uab.es

Número telèfon: 935814321



Universitat Autònoma de Barcelona

Departament de Química

Proposta projecte de treball fi de màster (TFM) curs 2016-2017

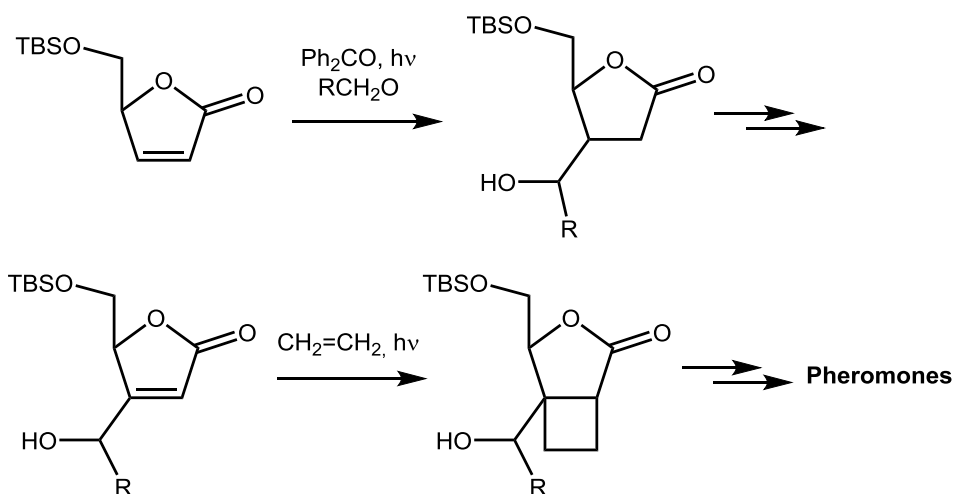
PROPOSTA 9

Títol del projecte: **Photochemical studies related to the synthesis of cyclobutanic feromones**

Professor que presenta el projecte de TFM: **Marta Figueredo**

Breu descripció del projecte a desenvolupar pel alumne:

The purpose of the work is preparing a series of γ -substituted 2(5*H*)-furanones and then studying their [2+2] photocycloaddition to ethylene as a mean to obtain synthetic precursors of cyclobutanic pheromones.



Dades de contacte amb el professor

Direcció correu electrònic: marta.figueredo@uab.cat

Número telèfon: 935811853



Universitat Autònoma de Barcelona

Departament de Química

Proposta projecte de treball fi de màster (TFM) curs 2016-2017

PROPOSTA 10

Títol del projecte: **Improvement of the water oxidation catalytic properties of metallic oxide nanoparticles anchored to semiconducting materials**

Professor que presenta el projecte de TFM: **Jordi García-Antón Aviñó**

With this proposal, we aim to study the water oxidation catalytic activity of metallic oxide nanoparticles (Co_3O_4 , RuO_2 ) anchored to semiconducting materials (for example WO_3). The chemical nature and the length of the anchoring molecules will be a determining part of this work. Therefore, the study will include work in molecular chemistry (synthesis and characterization of the anchoring species) and materials (synthesis of the nanoparticles and characterization of the systems).

Pàgina WEB del grup de recerca: <https://seloxcat.wordpress.com/>

Dades de contacte amb el professor

Direcció correu electrònic: jordi.garciaanton@uab.es

Número telèfon: 93 581 4881



Universitat Autònoma de Barcelona

Departament de Química

Proposta projecte de treball fi de màster (TFM) curs 2016-2017

PROPOSTA 11

Títol del projecte: **Estudi de processos electroquímics en Dissolvents Verds**

Professor que presenta el projecte de TFM: **Gonzalo Guirado**

Breu descripció del projecte a desenvolupar pel alumne:

L'alumne desenvoluparà l'activació de processos de forma electroquímica en dissolvents verds aplicant els principis de la Química Verda. El disseny d'aquest processos es centrarà en la preparació de compostos d'alt valor afegit utilitzant CO_2 i tecnologies netes.



Dades de contacte amb el professor: Departament de Química, UAB

Direcció correu electrònic: Gonzalo.Guirado@uab.cat

Número telèfon: 93 581 48 82



Universitat Autònoma de Barcelona

Departament de Química

Proposta projecte de treball fi de màster (TFM) curs 2016-2017

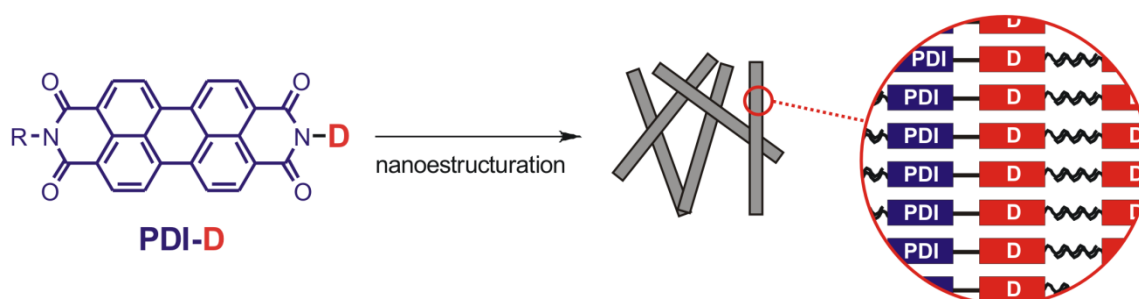
PROPOSTA 12

Títol del projecte: **Photovoltaic nanostructures based on perylendiimide**

Professor que presenta el projecte de TFM: **Jordi Hernando Campos**

Breu descripció del projecte a desenvolupar pel alumne:

This project aims at developing photoconductive 1D nanostructures made of self-assembled perylendiimide (PDI) molecules, which are of interest for the fabrication of opto-electronic devices such as sensors and solar cells. For this, the following tasks are proposed: (a) the synthesis of dyads between PDI and organic electron-donor groups (D); (b) their nanostructuration using different wet methodologies; (c) the characterization of the photoactive behavior of the resulting structures.



Dades de contacte amb el professor

Direcció correu electrònic: jordi.hernando@uab.cat

Número telèfon: 93 581 4024



Universitat Autònoma de Barcelona

Departament de Química

Proposta projecte de treball fi de màster (TFM) curs 2016-2017

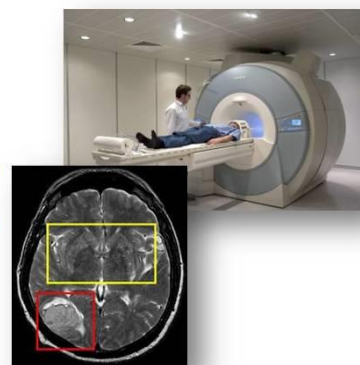
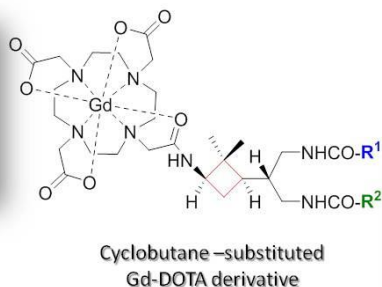
PROPOSTA 13

Títol del projecte: **Development of new contrast agents for magnetic resonance imaging based on gd-dota.**

Professor que presenta el projecte de TFM: **Ona Illa Soler**

Breu descripció del projecte a desenvolupar pel alumne:

The proposed project deals with the design and synthesis of new contrast agents (CA) for Magnetic Resonance Imaging (MRI) based on the Gd-DOTA scaffold. Several cyclobutane-substituted Gd-DOTA derivatives will be prepared changing the nature of the lateral chains (R^1 and R^2). Their performance as CA in MRI will be tested, as well as their stability.



Per a més informació visiteu el web: <http://grupsderecerca.uab.cat/rosamortuno/>

Dades de contacte amb el professor

Direcció correu electrònic: ona.illa@uab.cat

Número telèfon: 935814884



Universitat Autònoma de Barcelona

Departament de Química

Proposta projecte de treball fi de màster (TFM) curs 2016-2017

PROPOSTA 14

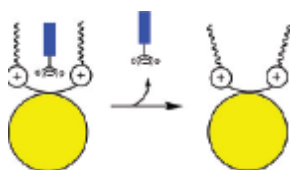
Títol del projecte: **Simulacions de dinàmica molecular de nanopartícules d'or funcionalitzades amb tensioactius basats en sals d'imidazoli, emprant mètodes “coarse-grain”.**

Professor que presenta el projecte de TFM: **Carles JAIME CARDIEL**

Breu descripció del projecte a desenvolupar pel alumne:

Recentment s'han preparat nanopartícules d'or recobertes amb tensioactius basats en sals d'imadazoli per explorar la seva viabilitat en reconeixement molecular d'anions i pel seu possible ús en nanomedicina [1]. Si bé s'han pogut caracteritzar químicament i física, estudiar la seva estabilitat en dissolució, la seva toxicitat davant models cel·lulars, estudiar la seva capacitat de reconèixer medicaments que contenen grups carboxilats (estudiant la seva activitat davant dels anions ibuprofenat i valproat) i realitzar estudis in vitro de la seva capacitat per actuar com a transportadors de fàrmacs aniònics, no hi ha informació sobre les interaccions existents entre els tensioactius i la nanopartícula d'or ni sobre com transporta els fàrmacs.

És precisament en aquest aspecte en el que els càlculs teòrics poden ajudar a obtenir informació en sistemes tan complexos.



[1] L. Casal-Dujat, M. Rodrigues, A. Yagüe, A.C. Calpena, D.B. Amabilino, J. González-Linares, M. Borrás, i Ll. Pérez-García; [dx.doi.org/10.1021/la203601n](https://doi.org/10.1021/la203601n); *Langmuir* **2012**, 28, 2368–2381.

Dades de contacte amb el professor

Direcció correu electrònic: carlos.jaime@uab.cat

Número telèfon: 93 581 2591



Universitat Autònoma de Barcelona

Departament de Química

Proposta projecte de treball fi de màster (TFM) curs 2016-2017

PROPOSTA 15

Títol del projecte: **Control de calidad en la industria farmacéutica**

Professor que presenta el projecte de TFM: **Santiago Maspoch Andrés**

Breu descripció del projecte a desenvolupar pel alumne:

El control de calidad en la industria farmacéutica ha evolucionado del control del producto final, al control del proceso de producción. Herramientas clave para ese cambio son la espectroscopia NIR, espectroscopia Raman y tratamiento quimiométrico multivariable. El objetivo concreto del TFM es la comparación del NIR y Raman para la cuantificación de los dos principios activos de un fármaco en situación de stress: baja concentración y estructura química parecida.

Dades de contacte amb el professor

Direcció correu electrònic: santiago.maspoch@uab.cat

Número telèfon: 935811011



Universitat Autònoma de Barcelona

Departament de Química

Proposta projecte de treball fi de màster (TFM) curs 2016-2017

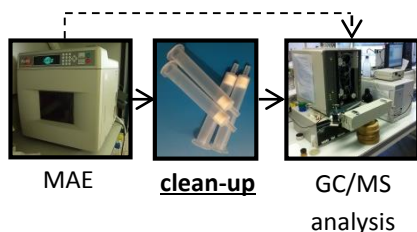
PROPOSTA 16

Títol del projecte: Mètode de determinació d'hidrocarburs poliaromàtics (PAHs) en sòls mitjançant pre-tractament de les mostres amb microones analític, etapa de purificació adient, i determinació de l'extracte amb cromatografia de gasos acoblada a detector de masses (GC-MS). Posta a punt del mètode.

Professor que presenta el projecte de TFM: Maria del Mar Baeza i Cristina Palet

Breu descripció del projecte a desenvolupar pel alumne:

La proposta es basa en posar a punt un mètode ja establert per a l'anàlisi de compostos hidrocarburs poliaromàtics en sòls contaminats mitjançant determinació final amb cromatografia de gasos acoblada a detector de masses (GC-MS). Es necessari extreure els PAHs de la mostra de sòl, i el mètode recomana una extracció en dissolvent mitjançant microones analític (mètode optimitzat), i posterior purificació de l'extracte. Aquest punt és el que requereix de la major atenció en la posta a punt del mètode, doncs és on hi ha més dificultat de reproduir-lo actualment als nostres laboratoris.



Dades de contacte amb el professor

Direcció correu electrònic:

MariaDelMar.Baeza@uab.cat

cristina.palet@uab.cat

Número telèfon:

935814927

935813475



Universitat Autònoma de Barcelona

Departament de Química

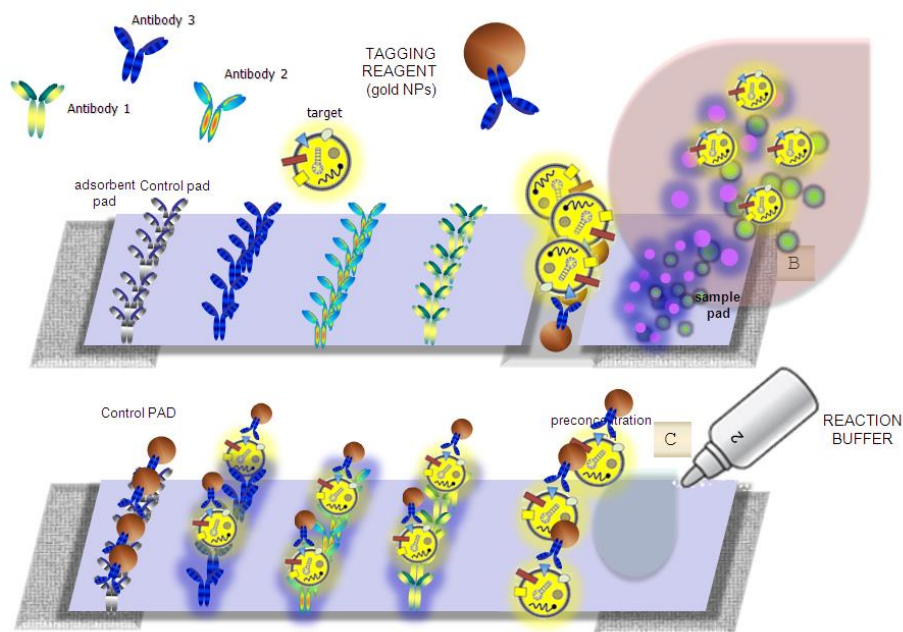
Proposta projecte de treball fi de màster (TFM) curs 2016-2017

PROPOSTA 17

Títol del projecte: **BeSens. Next Generation of Rapid Test for worldwide diagnostic**

Professor que presenta el projecte de TFM: **María Isabel Pividori**

The aim of this proposal is to contribute in the development of the next generation of rapid diagnostic test (RDTs) for low-resource settings to solve the societal challenge of Global Health. This proposal will explore three key cross-cutting technological challenges that have been identified as technology bottlenecks in RDTs (i) the study of emerging diagnostic biomarkers for the early detection of global diseases, (ii) the enhancement of the analytical signal, and (iii) the isolation of targets from complex specimens by novel solid-phase preconcentration strategies. Finally, the integration of these technological challenges in RDTs will be explored. Analytical simplification will be implemented in all cases to provide low complexity and affordable platforms requiring minimal training for final users, but without any lost in the diagnostic accuracy. The application that are envisaged includes targets affecting global health, taking as a reference communicable diseases and emerging infection diseases disregarding borders (malaria, tuberculosis, AIDS, Ebola), non-communicable diseases (breast cancer), and targets affecting food and water supplies.



Dades de contacte amb el professor

Direcció correu electrònic: Isabel.Pividori@uab.cat

Número telèfon: 935814937



Universitat Autònoma de Barcelona

Departament de Química

Proposta projecte de treball fi de màster (TFM) curs 2016-2017

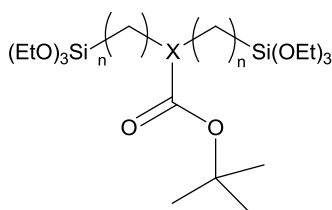
PROPOSTA 18

Títol del projecte: **Towards the preparation of periodic mesoporous organosilica nanoparticles (PMON) for biomedical applications**

Professor que presenta el projecte de TFM: **Roser Pleixats**

Breu descripció del projecte a desenvolupar pel alumne:

The project envisages the synthesis of bis- and tris-silylated organic precursors for the preparation of periodic mesoporous organosilica nanoparticles (PMON)¹ that should be capable of generating microbubbles *in situ* under the action of ultrasound. These materials will be tested for biomedical applications, particularly in ultrasonography and therapies based on high-intensity focused ultrasound (HIFU)² with the collaboration of french research groups.



- 1- a) N. Moitra, P. Trens, L. Raehm, J.-O. Durand, X. Cattoën, M. Wong Chi Man, *J. Mater. Chem.* **2011**, 21, 13476; b) J. Croissant, X. Cattoën, M. Wong Chi Man, A. Gallud, L. Raehm, P. Trens, M. Maynadier, J.-O. Durand, *Adv. Mater.* **2014**, 26, 6174.
- 2.- X. Wang, H. Chen, Y. Chen, M. Ma, K. Zhang, F. Li, Y. Zheng, D. Zeng, Q. Wang, J. Shi, *Adv. Mater.* **2012**, 24, 785.

Dades de contacte amb el professor

Direcció correu electrònic: roser.pleixats@uab.cat

Número telèfon: 93 581 2067



Universitat Autònoma de Barcelona

Departament de Química

Proposta projecte de treball fi de màster (TFM) curs 2016-2017

PROPOSTA 19

Títol del projecte: Materials porosos. Síntesis, caracterització i aplicacions de MOFs

Professor que presenta el projecte de TFM: Josefina Pons Picart

Breu descripció del projecte a desenvolupar pel alumne:

En aquest treball es pretenen sintetitzar materials porosos aptes per la retenció de gasos líquids. Depenen de la mida dels forats. Per portar a terme aquest treball es dissenyaran, sintetitzaran i caracteritzaran lligands que puguin crear els suficients espais per ser útils per la finalitat que ens proposem. Una vegada obtinguts als lligands se sintetitzaran els complexos, utilitzant diferents metalls i diferents sals dels metalls. Sempre s'intentarà obtenir cristalls que siguin aptes per la difracció de Raig-X, i s'estudiarà l'estructura supramolecular, analitzant en tot moment si el material obtingut es útil per la finalitat proposada.

Dades de contacte amb el professor

Direcció correu electrònic: josefina.pons@uab.cat

Número telèfon: 93 5812895



Universitat Autònoma de Barcelona

Departament de Química

Proposta projecte de treball fi de màster (TFM) curs 2016-2017

PROPOSTA 20

Títol del projecte: **Intensificació de processos de síntesi de nanomaterials per aplicacions analítiques.**

Professor que presenta el projecte de TFM: **M^a Mar Puyol Bosch**

Breu descripció del projecte a desenvolupar pel alumne:

El projecte s'emmarcarà dins d'una línia de recerca enfocada a la intensificació de processos de síntesi de nanomaterials mitjançant sistemes de microfluídica automatitzats.

<https://gsbanalyticalmicrosystems.wordpress.com/research/>

S'optimitzaran sistemes per a la síntesi de punts de carboni (Cdots) i nanopartícules magnètiques (nPMs) modificades amb elements de reconeixement selectiu i s'estudiarà la seva resposta en l'anàlisi de metalls pesants o altres contaminants emergents en aigües o com a sistemes de diagnosi per imatge. El tipus de detecció/transducció a emprar serà determinat en funció de l'aplicació (sistemes òptics o electroquímics).

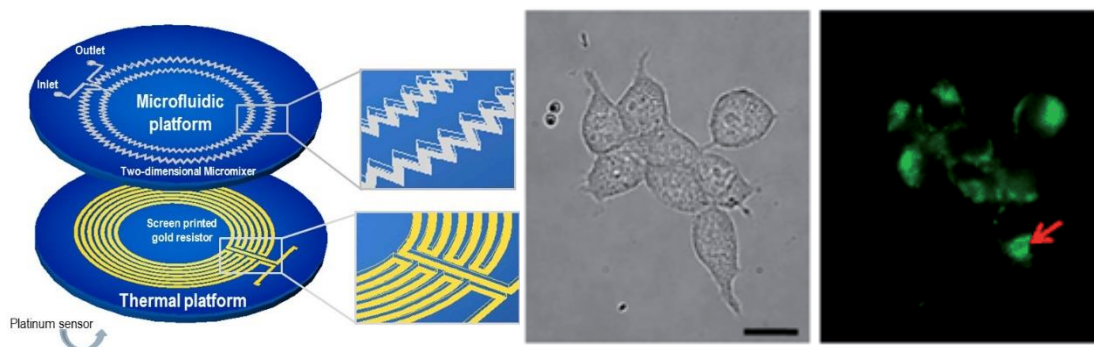


Figura 1. Exemple de microreactor per a la síntesi de punts de carboni (Cdots) com a sensors de pH d'aplicació en bioimaging.

Referències:

- [Nanoscale, 6, 6018-6024 \(2014\)](#)
- [Lab on a Chip, 12 \(11\), 1979-1986 \(2012\).](#)

Dades de contacte amb el professor

Direcció correu electrònic: mariadelmar.puyol@uab.cat

Número telèfon: +34 935868296



Universitat Autònoma de Barcelona

Departament de Química

Proposta projecte de treball fi de màster (TFM) curs 2016-2017

PROPOSTA 21

Títol del projecte: **Boosting the water oxidation activity of transition-metal based oxide nanoparticles**

Professor que presenta el projecte de TFM: **Xavier Sala Román**

Breu descripció del projecte a desenvolupar pel alumne:

The aim of this TFM is to unravel the key factors governing the performance of metal oxide nanoparticles (NPs) as catalysts for efficiently oxidizing water to dioxygen, a key reaction for the sustainable production of H₂. We will prepare size and shape mono and bimetallic NPs stabilized by several ligands or supports, to understand the fundamental principles that dictate the selectivity, efficiency and durability of colloidal systems. For more info: www.seloxcat.wordpress.com

Dades de contacte amb el professor

Direcció correu electrònic: xavier.sala@uab.cat

Número telèfon: 935868295



Universitat Autònoma de Barcelona

Departament de Química

Proposta projecte de treball fi de màster (TFM) curs 2016-2017

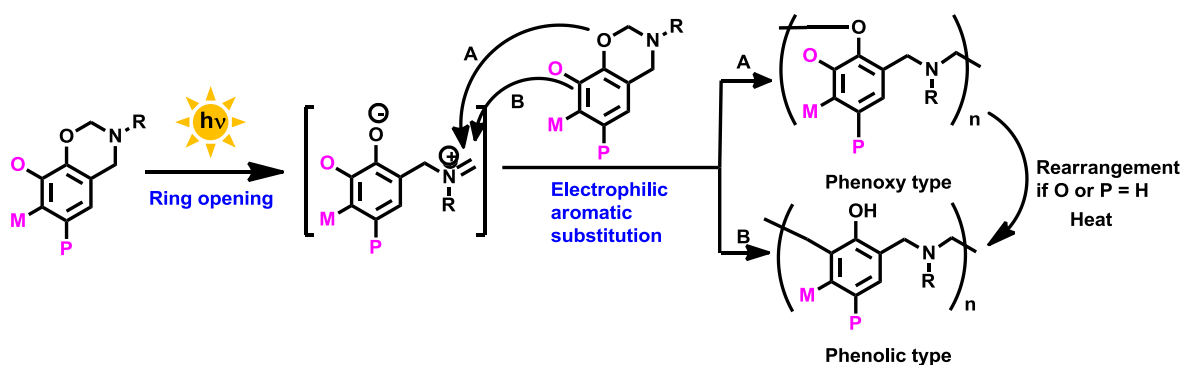
PROPOSTA 22

Títol del projecte: **Development of environmentally friendly synthetic methodology for the preparation of polymeric materials used in the aerospace industry**

Professor que presenta el projecte de TFM: **Rosa María Sebastián Pérez**

Breu descripció del projecte a desenvolupar pel alumne:

Polybenzoxazines are a quite new family of polymers used in the preparation of composites for different special high added value applications, among them they are used to create part of the fuselage of some modern aircrafts. The polymerization of benzoxazines is normally performed at high temperatures, promoting partial decomposition of final polymer, and wasting a lot of energy. In this Master we propose to photoinduce the polymerization, a cheaper and cleaner method that can be carried out at room temperature.



Dades de contacte amb el professor

Direcció correu electrònic: rosamaria.sebastian@uab.es

Número telèfon: 93 581 42 88 (<http://www.rosamariasebastian.com/>)



Universitat Autònoma de Barcelona

Departament de Química

Proposta projecte de treball fi de màster (TFM) curs 2016-2017

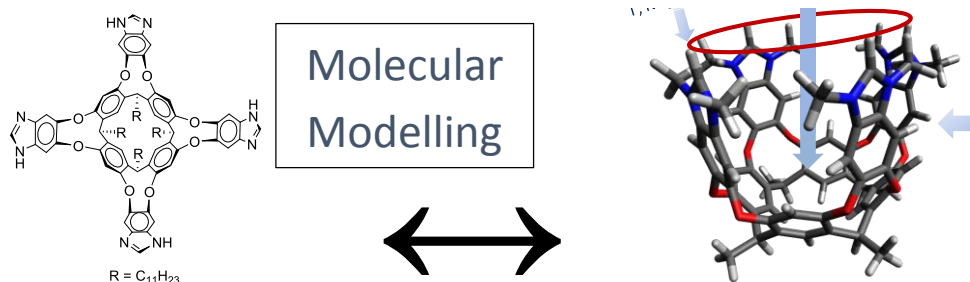
PROPOSTA 23

Títol del projecte: **Molecular Modelling of Supramolecular Nanocontainers and Their Potential Use in Catalysis**

Professor que presenta el projecte de TFM: **Gregori Ujaque**

We are involved in a new project devoted to the development of cavitands able to selectively recognize anions and/or cations. In collaboration with experimental groups we are designing new nanocontainers able to selectively recognize molecules. In top of that, decorating the cavitand with transition metal catalysts we envisage the preparation of new and more efficient catalysts.

For instance, we are developing cavitands as those presented in the scheme below, that are selective for the inclusion of aromatic anions. These very promising results encouraged us to explore their potential use as catalysts. We are in charge of use computational methods to obtain a molecular view of the chemical processes taking place in the lab.



Dades de contacte amb el professor: Gregori Ujaque (C7/145)

Direcció correu electrònic: gregori.ujaque@uab.cat

Número telèfon: 93.581.4220



Universitat Autònoma de Barcelona

Departament de Química

Proposta projecte de treball fi de màster (TFM) curs 2016-2017

PROPOSTA 24

Títol del projecte: **Llengües electròniques en la detecció de defectes en el vi**

Professor que presenta el projecte de TFM: **Manel del Valle**

Breu descripció del projecte a desenvolupar pel alumne:

Estudi mitjançant una llengua electrònica formada per sensors voltamètrics de defectes que apareixen en l'elaboració del vi. El treball pot comportar, eestudi i desenvolupament de sensors voltamètrics, familiarització amb conceptes de l'enologia i tractament avançat de dades tipus 'big data'.

<https://ddd.uab.cat/record/117235?ln=ca>

Dades de contacte amb el professor

Direcció correu electrònic: manel.delvalle@uab.cat

Número telèfon: (93-581)3235



Universitat Autònoma de Barcelona

Departament de Química

Proposta projecte de treball fi de màster (TFM) curs 2016-2017

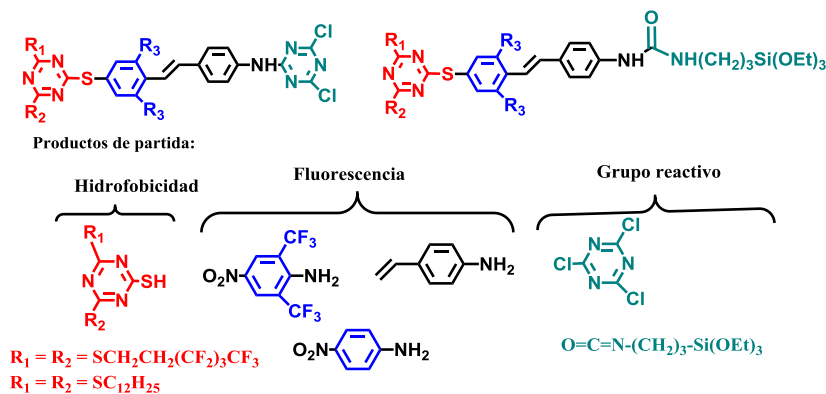
PROPOSTA 25

Títol del projecte: **Artificial surfaces: fluorescent dyes for high added-value paper**

Professor que presenta el projecte de TFM: **Adelina Vallribera**

Breu descripció del projecte a desenvolupar pel alumne:

Uno de los tipos estructurales más conocidos de colorantes fluorescentes son los que contienen un grupo $-\text{CH}=\text{CH}-$ combinado con arenos o heteroarenos (estilbenos) y se excitan bajo irradiación UV entre 340-400 nm. Sin duda una de las aplicaciones más importante es su utilización para validar la autenticidad de sellos postales y papeles impresos de elevada seguridad (papel moneda). En este sentido, queremos preparar colorantes fluorescentes con propiedades hidrofóbicas. ¿Cuál es la motivación? Dado que los colorantes fluorescentes se utilizan como criterio de identificación de papeles de alto valor añadido es deseable que no haya pérdidas del colorante (fijación con el papel por enlace covalente), evitar la pérdida por solubilidad en agua (por ejemplo en el caso de que el papel moneda se moje) y evitar que se ensucie (una capa oleofóbica bajaría su fluorescencia). Estas propiedades pueden conseguirse con los colorantes fluorados fluorescentes de la figura:



Dades de contacte amb el professor

Direcció correu electrònic: adelina.vallribera@uab.cat

Número telèfon: 93-5813045