

Beques de col·laboració amb un grup de recerca de la Facultat de Química. 2022.3.FQ.1



## Proposta de projecte de Treball Final de Màster

El Treball Final de Màster (TFM) que desenvoluparà el/la sol·licitant, cas de ser concedit l'ajut, s'emmarcarà en un projecte d'investigació d'un grup de recerca de la Facultat de Química.

El TFM s'iniciarà amb una cerca bibliogràfica que tindrà com a objectiu la contextualització del treball i la identificació d'estudis anteriors en la mateixa temàtica o temàtiques afins. Posteriorment es procedirà a la realització d'experiments o simulacions computacionals, segons s'escaigui, per tal de obtenir els resultats de la recerca experimental. Aquests resultats seran analitzats i discutits per extreure'n les conclusions pertinents. El TFM finalitzarà amb la redacció d'un document científic i serà defensat públicament i avaluat.

El/la sol·licitant indica a continuació, de manera prioritzada, **fins a tres propostes de projecte de TFM** escollides del llistat adjunt a aquest document.

- 1 .....
- 2 .....
- 3 .....

Barcelona, \_\_\_\_\_ de \_\_\_\_\_ de 2022

Nom i signatura del/de la sol·licitant

El responsable  
Fermín Huarte Larrañaga  
Vicedegà d'Ordenació Acadèmica i Qualitat  
(vd.quimica.ordenacio@ub.edu)

Beques de col·laboració amb un grup de recerca de la Facultat de Química. 2022.3.FQ.1



## Llistat de Propostes de Projectes de Recerca

### Secció Departamental de Ciència i Enginyeria de Materials

- Títol: Sustainable and alternative binders to Portland cement formulated from industrial wastes and by-products.  
Tutor/a: Josep Ma. Chimenos Ribera ([chimenos@ub.edu](mailto:chimenos@ub.edu))
- Títol: Shyntesis and characterization of solid-solid phase change materials.  
Tutor/a: Ana Inés Fernández Renna ([ana\\_inesfernandez@ub.edu](mailto:ana_inesfernandez@ub.edu))
- Títol: 3D hierarchical structured materials for environmental applications.  
Tutor/a: Núria Llorca ([nulorca@ub.edu](mailto:nulorca@ub.edu))
- Títol: Fabricación aditiva de placas bipolares (BPPs) por proyección fría de alta presión (HP-CGS).  
Tutor/a: Vicente Albaladejo Fuentes ([vicente.albaladejo@ub.edu](mailto:vicente.albaladejo@ub.edu))

### Secció Departamental d'Enginyeria Química

- Títol: Investigating techno feasibility of Advanced Oxidation Processes coupled with membranes as a water treatment.  
Tutor/a: Pilar Marco ([pmarco@ub.edu](mailto:pmarco@ub.edu))
- Títol: Wastewater purification through integrated physical and chemical treatments.  
Tutor/a: Jordi Labanda ([jlabanda@ub.edu](mailto:jlabanda@ub.edu))
- Títol: Contribució al estudi de la deshidratció de manitol a isomanide sobre reines de bescanvi iònic  
Tutor/a: Javier Tejero ([jtejero@ub.edu](mailto:jtejero@ub.edu))
- Títol: Gamma Valerolactone synthesis with bifunctional catalysts supported on ion exchange resins  
Tutor/a: Eliana Ramírez Rangel ([eliana.ramirez-rangel@ub.edu](mailto:eliana.ramirez-rangel@ub.edu))
- Títol: Photochemical processes for water reuse  
Tutor/a: Alberto Cruz ([alberto.cruz@ub.edu](mailto:alberto.cruz@ub.edu))
- Títol: Liquid-phase synthesis of biolubricant octyl levulinate over acidic ion-exchange resins: a catalyst screening study  
Tutor/a: Rodrigo Soto ([r.soto@ub.edu](mailto:r.soto@ub.edu))
- Títol: CFD simulations including chemical reactions.  
Tutor/a: Alexandra Plesu Popescu ([a\\_plesu@ub.edu](mailto:a_plesu@ub.edu))
- Títol: CFD simulations in porous media.  
Tutor/a: Jordi Bonet Ruiz ([bonet@ub.edu](mailto:bonet@ub.edu))
- Títol: CFD simulations of cyclones.  
Tutor/a: David Curcó Cantarell ([dcurco@ub.edu](mailto:dcurco@ub.edu))
- Títol: Removal of micro-contaminants by innovative technologies for water reuse.  
Tutor/a: Carme Sans ([carmesans@ub.edu](mailto:carmesans@ub.edu))

Beques de col·laboració amb un grup de recerca de la Facultat de Química. 2022.3.FQ.1



### Secció Departamental de Química Analítica

- Títol: Anàlisi de DNA víric mitjançant la tecnologia dels nanoclústers fluorescents de metalls nobles.  
Tutor/a: Raimundo Gargallo Gómez ([raimon\\_gargallo@ub.edu](mailto:raimon_gargallo@ub.edu))
- Títol: Biochar: una estratègia sostenible per a la descontaminació d'aigües.  
Tutor/a: Anna Rigol Parera ([annarigol@ub.edu](mailto:annarigol@ub.edu))
- Títol: Autenticació de productes alimentaris per cromatografia de líquids amb detecció UV-visible i amperomètrica.  
Tutor/a: Clara Pérez Ràfols ([claraperezrafols@ub.edu](mailto:claraperezrafols@ub.edu))
- Títol: Desenvolupament de sensors electroquímics basats en aptàmers per a la determinació de compostos d'interès biològic i ambiental.  
Tutor/a: Núria Serrano ([nuria.serrano@ub.edu](mailto:nuria.serrano@ub.edu))
- Títol: Combinació de sensors òptics i electroquímics per a la determinació de contaminants persistents i emergents.  
Tutor/a: José Manuel Díaz Cruz ([josemanuel.diaz@ub.edu](mailto:josemanuel.diaz@ub.edu))
- Títol: Anàlisi de contaminants orgànics emergents en entorns aquàtics mitjançant UHPLC-HRMS.  
Tutor/a: Encarnación Moyano Morcillo ([encarna.moyano@ub.edu](mailto:encarna.moyano@ub.edu))
- Títol: Ús d'imatge química hiperespectral i quimiometria per a l'estudi i interpretació de mostres d'origen biològic, alimentari i industrial..  
Tutor/a: Anna de Juan Capdevila ([anna.dejuan@ub.edu](mailto:anna.dejuan@ub.edu))
- Títol: La xocolata: classificació segons l'origen i la varietat a partir d'anàlisis per LC-UV i LC-MS.  
Tutor/a: Sònia Sentellas ([sonia.sentellas@ub.edu](mailto:sonia.sentellas@ub.edu))
- Títol: Artomics: obres d'art, anàlisi i quimiometria.  
Tutor/a: José F. Garcia ([jfgarcia@ub.edu](mailto:jfgarcia@ub.edu))
- Títol: Desenvolupament d'un polímer imprès fluorescent per l'anàlisi selectiu de glucosa marcada amb C-14.  
Tutor/a: Héctor Bagan Navarro ([hector.bagan@ub.edu](mailto:hector.bagan@ub.edu))

### Secció Departamental de Química Física

- Títol: Transport de col·loides actius en cristall líquids confinats en microcanals.  
Tutor/a: Jordi Ignés Molló ([jignes@ub.edu](mailto:jignes@ub.edu))
- Títol: Optimització de nanopartícules polimèriques d'entrecruament iònic per administració de siRNA en teixit adipós.  
Tutor/a: Marina I. Giannotti ([migiannotti@ub.edu](mailto:migiannotti@ub.edu))
- Títol: Band gap engineering in MXenes.  
Tutor/a: Carme Sousa Romero ([c.sousa@ub.edu](mailto:c.sousa@ub.edu))
- Títol: Molecular dynamics simulations of CO<sub>2</sub> hydrogenation over a transition metal@silicalite using a ReaxFF force field.  
Tutor/a: Ramón Sayós ([r.sayos@ub.edu](mailto:r.sayos@ub.edu))
- Títol: Band gap engineering in MXenes.  
Tutor/a: Carme Sousa Romero ([c.sousa@ub.edu](mailto:c.sousa@ub.edu))

Beques de col·laboració amb un grup de recerca de la Facultat de Química. 2022.3.FQ.1



- Títol: Artificial Intelligence as a tool to increase the predictive power of scoring functions for drug-design.  
Tutor/a: Jaime Rubio Martínez ([jaime.rubio@ub.edu](mailto:jaime.rubio@ub.edu))
- Títol: New 2D Materials for Photocatalysis.  
Tutor/a: Francesc Viñes ([francesc.vines@ub.edu](mailto:francesc.vines@ub.edu))
- Títol: Computational modelling of metal@zeolite catalysts for carbon oxides conversion.  
Tutor/a: Fermín Huarte Larrañaga ([fermin.huarte@ub.edu](mailto:fermin.huarte@ub.edu))
- Títol: Electrosynthesis of effective Ni-based catalysts for solar light assisted preparation of high added value products from biomass residues. Sustainable circular economy.  
Tutor/a: Albert Serra ([a.serra@ub.edu](mailto:a.serra@ub.edu))
- Títol: Electroless preparation of mesoporous Ni/NiPt catalysts for radiation assisted synthesis from biomass residues. Sustainable circular economy.  
Tutor/a: Elvira Gómez ([e.gomez@ub.edu](mailto:e.gomez@ub.edu))
- Títol: Simulació de contaminants i matèria orgànica sobre microplàstics.  
Tutor/a: Sergio Madurga Díez ([s.madurga@ub.edu](mailto:s.madurga@ub.edu))
- Títol: New switchable 2D materials based on electric field responsive molecular building blocks.  
Tutor/a: Stefan Bromley ([s.bromley@ub.edu](mailto:s.bromley@ub.edu))
- Títol: New 2D covalent organic framework materials for nanoelectronic devices.  
Tutor/a: Jordi Ribas ([j.ribas@ub.edu](mailto:j.ribas@ub.edu))
- Títol: Better catalysts for a better world (capture and transformation of CO<sub>2</sub>).  
Tutor/a: Pablo Gamallo Belmonte ([gamallo@ub.edu](mailto:gamallo@ub.edu))

#### Secció Departamental de Química Inorgànica

- Títol: 2D organization of magnetic molecules on surfaces for spintronic applications.  
Tutor/a: Eva Carolina Sañudo ([esanudo@ub.edu](mailto:esanudo@ub.edu))
- Títol: Study of room temperature phosphorescence with luminescent gold(I) complexes.  
Tutor/a: Inmaculada Angurell Purroy ([inmaangurell@ub.edu](mailto:inmaangurell@ub.edu))
- Títol: Luminescent gold(I) complexes as singlet oxygen generators.  
Tutor/a: Laura Rodríguez ([laura.rodriiguez@qi.ub.es](mailto:laura.rodriiguez@qi.ub.es))
- Títol: Protein-Gold nanoparticles as Platforms for Drug Delivery and Gene Transfer.  
Tutor/a: Ana Belén Caballero ([ana.caballero@ub.edu](mailto:ana.caballero@ub.edu))
- Títol: Synthesis and spectroscopic studies of systems with electronic spin  $S=1/2$  with and without nuclear spin. Quantum technologies.  
Tutor/a: Julia Mayans ([julia.mayans@qi.ub.es](mailto:julia.mayans@qi.ub.es))
- Títol: Supramolecular polygons and polyhedra from 3d cations. Magnetic properties.  
Tutor/a: Albert Escuer ([albert.escuer@qi.ub.es](mailto:albert.escuer@qi.ub.es))

Beques de col·laboració amb un grup de recerca de la Facultat de Química. 2022.3.FQ.1



- Títol: Preparation of diatopic azo ligands and their Fe(II) coordination compounds.  
Tutor/a: Montserrat Sofía Ferrer García ([montse.ferrer@ub.edu](mailto:montse.ferrer@ub.edu))
- Títol: Hybrid Inorganic Nanoparticles As Bimodal Therapeutic Agents.  
Tutor/a: Albert Figuerola ([albert.figuerola@ub.edu](mailto:albert.figuerola@ub.edu))
- Títol: Study of room temperature phosphorescence with luminescent gold(I) complexes.  
Tutor/a: Inmaculada Angurell Purroy ([inmaangurell@ub.edu](mailto:inmaangurell@ub.edu))
- Títol: Polifosfines P-estereogèniques: síntesi, coordinació i aplicacions.  
Tutor/a: Arnald Grabulosa ([arnald.grabulosa@qi.ub.es](mailto:arnald.grabulosa@qi.ub.es))
- Títol: Cyclometallated compounds: synthesis and applications.  
Tutor/a: Joan Albert ([joanalbert@ub.edu](mailto:joanalbert@ub.edu))
- Títol: Computational modelling of the breathing behavior in the Cr-MIL53 Metal-Organic Framework.  
Tutor/a: Jordi Cirera ([jordi.cirera@qi.ub.es](mailto:jordi.cirera@qi.ub.es))
- Títol: Catalitzadors basats en carburs 2D (MXene) i semiconductors per a la producció fotocatalítica d'hidrogen.  
Tutor/a: Narcís Homs ([narcis.homs@qi.ub.es](mailto:narcis.homs@qi.ub.es))
- Títol: Desenvolupament de nous materials per a la producció d'hidrogen mitjançant el reformat catalític de bioetanol.  
Tutor/a: Pilar Ramírez de la Piscina ([pilar.piscina@qi.ub.es](mailto:pilar.piscina@qi.ub.es))
- Títol: Estudi de catalitzadors basats en carburs dels grups 5 i 6 i metalls de transició, per a la conversió química de CO<sub>2</sub> en productes valoritzats.  
Tutor/a: Lourdes Mestres ([lourdes.mestres@qi.ub.es](mailto:lourdes.mestres@qi.ub.es))
- Títol: Mecanochemical Tuning/approach of MXene materials as catalysts for CO<sub>2</sub> conversion.  
Tutor/a: Xavier Vendrell ([xavier.vendrell@ub.edu](mailto:xavier.vendrell@ub.edu))
- Títol: Computational assessment on the electronic parameters of ligands in coordination complexes.  
Tutor/a: Jesús Jover ([jesus.jover@qi.ub.es](mailto:jesus.jover@qi.ub.es))
- Títol: Design, Synthesis and Study of Supramolecular Switchable Magnetic Materials.  
Tutor/a: David Aguilà ([david.aguilà@qi.ub.edu](mailto:david.aguilà@qi.ub.edu))

#### Secció Departamental de Química Orgànica

- Títol: Controlling Chemical Reactivity with Optimal Oriented External Electric Field.  
Tutor/a: Josep Maria Bofill ([jmbofill@ub.edu](mailto:jmbofill@ub.edu))
- Títol: Asymmetric sustainable functionalisation of carbonyl compounds by merging aminocatalysis and electrocatalysis.  
Tutor/a: Xavier Companyó ([x.companyo@ub.edu](mailto:x.companyo@ub.edu))
- Títol: Cyclization reactions via C–H activation processes.  
Tutor/a: Xavier Ariza Piquer ([ariza@ub.edu](mailto:ariza@ub.edu))

Beques de col·laboració amb un grup de recerca de la Facultat de Química. 2022.3.FQ.1



- Títol: New stereoselective radical-based reactions. Approach to the total synthesis of the Sch 38513.  
Tutor/a: Pedro Romea García ([pedro.romea@ub.edu](mailto:pedro.romea@ub.edu))
- Títol: Modelització de mecanismes moleculars d'enzims causants de malalties de desordre lisosomal.  
Tutor/a: Carme Rovira ([c.rovira@ub.edu](mailto:c.rovira@ub.edu))
- Títol: Fosforilació i miristoilació del domini desordenat de la proteïna Src.  
Tutor/a: Miquel Pons ([mpons@ub.edu](mailto:mpons@ub.edu))
- Títol: Development of novel coumarin-based photosensitizers for photodynamic therapy of cancer.  
Tutor/a: Vicente Marchán ([vmarchan@ub.edu](mailto:vmarchan@ub.edu))
- Títol: Síntesi de composts i derivats peptídics antibiòtics.  
Tutor/a: Francesc Rabanal ([frabanal@ub.edu](mailto:frabanal@ub.edu))
- Títol: Síntesi de molècules bifuncionals per a la modificació de proteïnes.  
Tutor/a: Antoni Riera ([ariera@ub.edu](mailto:ariera@ub.edu))
- Títol: Síntesi de fragments de l'Iriomoteolida-2a.  
Tutor/a: Anna Maria Costa ([amcosta@ub.edu](mailto:amcosta@ub.edu))
- Títol: Síntesis de lligands heterocíclics quirals aplicables a la computació quàntica.  
Tutor/a: Jordi Garcia Gómez ([jordigarciagomez@ub.edu](mailto:jordigarciagomez@ub.edu))
- Títol: Synthesis of porous supramolecular materials controlled by chemical fuels.  
Tutor/a: Alessandro Sorrenti ([asorrenti@ub.edu](mailto:asorrenti@ub.edu))
- Títol: Catàlisi asimètrica absoluta i l'origen prebiòtic de la quiralitat biomolecular.  
Tutor/a: Albert Moyano ([amoyano@ub.edu](mailto:amoyano@ub.edu))
- Títol: Synthesis of new 2'-modified nucleotides as building blocks of potential antitumoral oligonucleotide-based tools.  
Tutor/a: Montserrat Terrazas ([montserrat.terrazas@ub.edu](mailto:montserrat.terrazas@ub.edu))
- Títol: I-motif structures. Insights into the understanding of their biological implications and their interaction with other structural elements of DNA.  
Tutor/a: Núria Escaja ([nescaja@ub.edu](mailto:nescaja@ub.edu))
- Títol: Direct and enantioselective C–C bond forming reactions catalyzed by nickel(II) complexes. Approach to the total synthesis of the baulamycin A.  
Tutor/a: Fèlix Urpi ([felix.urpi@ub.edu](mailto:felix.urpi@ub.edu))