

# **TEMES PER A TREBALLS DE FI DE GRAU (TFG)**

## **GRAU EN ENGINYERIA QUÍMICA** **Curs 2025-2026**

## **DEPARTAMENT ENGINYERIA QUÍMICA I CIÈNCIA DE MATERIALS**

### **1. Cap a una economia circular: revalorització d'elastòmers en materials termoplàstics reciclats per a injecció.**

Aquest projecte té com a objectiu donar suport a l'empresa en la seva tasca cap a una economia circular mitjançant la reutilització i revalorització d'elastòmers, que habitualment esdevenen residus que no es poden reutilitzar. Es busca incorporar aquests elastòmers en termoplàstics reciclats per desenvolupar nous materials aptes per a processos d'injecció, utilitzats en la fabricació de peces industrials. D'aquesta manera, es pretén reduir l'impacte ambiental, així com allargar la vida útil dels materials, promovent una producció més sostenible.

Direcció: Dra. Núria Agulló Chaler amb un tutor de l'empresa CITSALP

### **2. Estudi de l'ús de microesferes com a reforç en polipropilè: avantatges respecte a les fibres convencionals.**

Aquest projecte pretén estudiar la incorporació de microesferes com a material de reforç en el polipropilè, un plàstic molt utilitzat a la indústria. L'objectiu és comparar-ne el comportament i els avantatges respecte a les fibres convencionals (com les de vidre o carboni), valorant aspectes com el pes, la rigidesa, el cost i la facilitat de processament. En resum, el projecte busca determinar si les microesferes poden millorar les propietats del polipropilè i oferir una alternativa més lleugera i eficient als reforços tradicionals

Direcció: Dra. Núria Agulló Chaler amb un tutor de l'empresa CITSALP

### **3. Caracterització predictiva de materials plàstics reciclats per a processos d'injecció.**

Aquest projecte té com a objectiu analitzar i predir el comportament dels materials plàstics reciclats que s'utilitzen en processos d'injecció. A través de tècniques de caracterització química, mecànica i tèrmica, es busca entendre millor les seves propietats i desenvolupar models predictius que permetin anticipar-ne el rendiment durant la fabricació. Això podria ajudar a millorar la qualitat i la fiabilitat dels productes reciclats, fomentant una producció més sostenible i eficient.

Direcció: Dra. Núria Agulló Chaler amb un tutor de l'empresa TATAY

#### **4. Captura directa de CO<sub>2</sub> del aire (DAC): Captura de CO<sub>2</sub> y su uso in-situ en la industria agrícola.**

La industria agrícola se caracteriza por sus altas emisiones de CO<sub>2</sub>, siendo una industria intensiva sobre la cual hay una presión creciente para que su huella de carbono se reduzca drásticamente en los próximos años. La captura directa de CO<sub>2</sub> del aire (DAC) es una tecnología innovadora que produce una doble ventaja competitiva: la adsorción de CO<sub>2</sub> presente en la atmósfera y por tanto favoreciendo la descarbonización del aire, y su posterior desorción en invernaderos agrícolas con el objetivo de aumentar la productividad de cultivos (como por ejemplo el tomate). Durante el proyecto, se montarán, operarán y optimizarán las columnas de adsorción de CO<sub>2</sub> con zeolitas específicas para maximizar la captura del CO<sub>2</sub> atmosférico. La optimización de la tecnología supone una oportunidad relevante para el/la alumno/a para desarrollar y optimizar una tecnología emergente y ayudar de forma simultánea a la industria agrícola de Barcelona y sus alrededores.

Importante: El TFG es experimental y supone más de un 70% de trabajo en el laboratorio.

Direcció: Dr. Rafael González Olmos

#### **5. Estudi de la conversió de CO<sub>2</sub> a Metanol en reactor de plasma tipus DBD.**

La conversió de CO<sub>2</sub> per plasma és una tecnologia que permet transformar el diòxid de carboni en productes útils (com CO, CH<sub>4</sub> o CH<sub>3</sub>OH) utilitzant descàrregues de plasma, en lloc de processos químics tradicionals a alta temperatura. Aquest mètode presenta uns clars avantatges:

- Pot funcionar a temperatura i pressió ambientals.
- Pot ser alimentat amb energia renovable, fent el procés més sostenible.
- Reaccions ràpides i controlables mitjançant l'electricitat.

Al laboratori del grup de recerca GESPA d'IQS ja fa anys que s'està treballant en el desenvolupament d'aquesta tecnologia obtenint molt bons resultats en la conversió de CO<sub>2</sub> a CO. Am baques TFG es vol anar una mica més enllà i utilitzar el mateix reactor per a convertir el CO<sub>2</sub> a substàncies de major valor afegir com poden ser el metà, el metanol o el formaldehid fent una recerca dels catalitzadors que es poden utilitzar així com les condicions del plasma òptimes per a la màxima eficiència del procés.

Direcció: Dr. Oriol Pou Ibar i Dr. Rafael González Olmos

## **6. Disseny de reactors per a reaccions d'oxidació amb peròxid d'hidrogen.**

Ús de tècniques calorimètriques (Calorímetre Diferencial d'Escombratge i Calorímetre de Reacció) obtenir les dades experimentals necessàries per al disseny de reactors per dur a terme reaccions d'oxidació amb peròxid d'hidrogen, per exemple, l'epoxidació de la isoforona. És un treball amb part experimental i amb una part de càlcul. L'objectiu final és dissenyar diferents tipus de reactors on es puguin dur a terme aquests tipus de reaccions i escollir la millor alternativa.

Direcció: Dr. Eduard Serra Hosta

## **7. Avaluació de l'impacte en el territori d'una planta de producció de films de coure per electrodeposició.**

Es tracta d'avaluar l'impacte, sota tots els punts de vista possibles, del fet d'instal·lar una planta de producció de films de coure per electrodeposició. Cal tenir en compte qüestions com la possible generació de contaminació, emissions, proximitat de la fàbrica a nuclis de població, transport, consum d'aigua, matèries primeres, productes, subproductes, residus, consum d'energia, ...

Direcció: Dr. Eduard Serra Hosta

## **8. Reavaluació de riscos de l'IQS, proposta i aplicació de millores.**

Les empreses cal que es sotmetin a una avaluació de riscos de forma periòdica. L'IQS passa aquesta avaluació cada dos anys. El que cal fer és una revisió i adequació de l'avaluació recent feta recalculant els paràmetres de risc, establint les propostes per millorar els nivells de risc, i aplicant-les o preparant-ne la seva aplicació. TFG poc experimental.

Direcció: Dr. Eduard Serra Hosta

## **9. From Emissions to Resources: A Critical Review of CO<sub>2</sub> Conversion Pathways.**

This project will focus on a comprehensive literature review on current methods for CO<sub>2</sub> conversion into value-added products. The student will analyze recent advances in catalytic, electrochemical, and photochemical processes. The study will highlight key materials, reaction mechanisms, and efficiency challenges. Comparative evaluation of technologies will be provided based on sustainability and scalability. Finally, future perspectives will be discussed to guide research toward efficient CO<sub>2</sub> utilization strategies.

Direcció: Dr. Javier Fernández García

## **10. Design of styrene plant with Aspen simulation combined with heat integration.**

Taking into account the current energy crisis situation, companies tackle strategies for energy savings. In process engineering, one important approach is the pinch method for energy integration. Therefore, simulation of styrene plant will be carried out with Aspen in order to study the critical units, hot spot energy analysis and key variables for the optimal performance. Additionally heat integration with pinch method will be considered for the whole plant to save energy and resources. Finally economic assessment and sustainability impact will be studied.

Direcció: Dr. Javier Fernández García

## **11. Design of absorption plant for CO<sub>2</sub> capture with amines using Aspen simulation.**

Sustainability and climate change are critical nowadays for many industrial sites, so treatment units are needed in order to reduce emissions. Simulation of CO<sub>2</sub> capture plant will be carried out with Aspen in order to study the critical units and key variables for the optimal performance. This is the usual day for a process engineer focused on sustainability issues. Additionally heat integration will be considered for the whole plant to save energy and resources. Finally economic assessment and sustainability impact will be studied.

Direcció: Dr. Javier Fernández García

## **12. Refrigeration gases adsorption with innovative experimental radiofrequency heating set-up.**

Separation technologies are research topics of high interest nowadays in the refrigeration industry with fluorinated gases (F-gases). F-gases must be recovered and reused in order to avoid its high global warming potential. Adsorption is one promising alternative for the F-gases. The electrification of such adsorption processes is the consequential step towards a carbon neutral operation. One promising GHG adsorption principle is the inductively heated temperature swing adsorption (TSA), that is part of the ongoing project. This operation requires dual materials to be inductively susceptible as heating source and to have high sorption capacity for the F-gases. The experimental setup of a laboratory scale fixed bed reactor with an induction coil has been brought into operation and is now ready to investigate critical parameters of such suitable multifunctional materials on their heating and sorption capacity performance. The student will carry out the production and testing of multifunctional materials to gather insights about their sorption and desorption capacities of F-gases, along with the materials heating response by induction heating.

Direcció: Dr. Javier Fernández García i Dr. Rafael Gonzalez Olmos

### **13. CO<sub>2</sub> capture pilot plant through pressure swing adsorption.**

This TFG project focuses on the experimental study and optimisation of a pilot-scale system for CO<sub>2</sub> capture using Pressure Swing Adsorption (PSA). Student will investigate the influence of operating parameters in a pilot plant—such as humidity, pressure, and regeneration conditions—on the performance of adsorbent materials for efficient CO<sub>2</sub> separation. This project is based on the previous step before industrial scale-up. The project involves hands-on work with an existing pilot installation, data acquisition through sensors, and analysis of key performance indicators such as purity, recovery, productivity, and energy consumption. The aim is to deepen understanding of sustainable gas separation processes and contribute to the development of innovative, low-carbon technologies for industrial CO<sub>2</sub> mitigation.

Direcció: Dr. Javier Fernández García i Dr. Rafael Gonzalez Olmos

### **14. Degradation-based mechanical performance characterization of polymeric stents.**

Bioresorbable polymeric stents represent a next-generation solution for treating cardiovascular diseases, offering temporary mechanical support while gradually degrading and being replaced by native tissue. Despite their promise, a key challenge lies in understanding how material degradation affects mechanical performance over time. The progressive loss of strength and stiffness can compromise structural integrity before the vessel has fully remodeled, limiting clinical reliability. This project aims to investigate the relationship between degradation kinetics and mechanical stability in polymeric stents, addressing a critical knowledge gap for their safe and effective design.

The study will involve both material-level and stent-level characterization under controlled degradation conditions. Samples of candidate bioresorbable polymers will be subjected to hydrolytic degradation in phosphate-buffered saline (PBS) at physiological temperature, and periodically analyzed for changes in mass, morphology, and mechanical properties. In parallel, polymeric stent prototypes will be tested at different degradation stages to assess their radial strength, recoil, and deformation behavior. By correlating the degradation state with key mechanical parameters, the project will quantify how structural performance evolves throughout the resorption process.

This work will generate essential data to support the predictive modeling and optimization of bioresorbable stent lifetimes, helping define the balance between mechanical persistence and timely resorption. The results are expected to provide fundamental insight into how polymer degradation governs device function, contributing to the rational design of safer and more durable bioresorbable vascular scaffolds for pediatric and adult applications.

Direcció: Dr. Jordi Martorell López

### **15. Piròlisis de plàstics per a la obtenció de combustibles.**

En aquest TFG es vol avaluar el potencial de diferents residus plàstics per a la obtenció de combustibles a través d'un procés de piròlisi maximitzant la formació de fraccions líquida i gasosa. Es mesurarà la composició de la fase gas obtinguda i es determinarà el poder calorífic de les fases gas, líquida i sòlida. A més, es vol valorar la viabilitat energètica i ambiental del procés com a alternativa sostenible per a l'aprofitament dels residus plàstics.

Direcció: Dr. Oriol Pou Ibar i Dr. Rafael Gonzalez Olmos

### **16. Simulació i avaluació ambiental de sistemes de refrigeració.**

El repte d'aconseguir processos industrials més sostenibles afecta tant al disseny de productes amb menors impactes així com al desenvolupament de millors tècniques de producció. D'entre les tècniques més esteses i amb un major impacte ambiental es troben els sistemes de refrigeració, aplicats tant a escala industrial com a escala domestica (per exemple, aires condicionats). A més de l'energia requerida per aconseguir la refrigeració desitjada, també cal tenir en compte que la producció i emissió dels refrigerants normalment utilitzats representen una gran part dels impactes ambientals generats. Per aquest motiu, no deixen d'aparèixer noves regulacions limitant l'aplicació de refrigerants convencionals, requerint l'aplicació de nous refrigerants més sostenibles (amb una petjada de carboni mes petita).

Aquest projecte té com a objectiu desenvolupar simulacions de cicles de refrigeració amb nous compostos refrigerants, optimitzant aquets processos i avaluant la seva eficàcia econòmica i ambiental mitjançant anàlisi de cicle de vida (ACV).

Direcció: Dr. Rafael Gonzalez Olmos i Dr. Raul Calvo Serrano

### **17. Simulation and Optimization of Biomass Gasification for Syngas Production Using Aspen.**

Biomass gasification (Baruah and Baruah, 2014) is one of the most notable routes being studied extensively due to its ability to produce low-emission important chemical building blocks, specifically, syngas. Gasification of biomass also takes place at a lower temperature than the traditional coal gasification, due to the nature of the reagent. However, simulating it is not straightforward due to the lack of a general composition biomass chemical in standard simulation packages, such as the Aspen suite.

The objective of the project is threefold. First, perform a literature review of the current state of biomass gasification both at an academic and industrial level, making sure to pinpoint strengths and fields of improvement. Secondly, generating a flowsheet using either Aspen HYSYS or Aspen Plus to reproduce a plant of biomass gasification. Finally, optimizing said flowsheet to its more favorable operating conditions including economic and environmental objectives by modifying variables such as chemical flows, heat integration, and type of feedstock.



Baruah, D., Baruah, D.C., 2014. Modeling of biomass gasification: A review. Renewable and Sustainable Energy Reviews 39, 806–815. <https://doi.org/10.1016/j.rser.2014.07.129>

Direcció: Dr. Daniel Vazquez Vazquez i Dr. Raul Calvo Serrano

### **18. Puesta en marcha, operación, y optimización de reactores anaerobios duales. Producción de biocombustibles a partir de residuos orgánicos de EDAR.**

Este proyecto nace con el objetivo de aumentar la eficiencia y la sostenibilidad de los digestores anaerobios convencionales en las EDAR del territorio a través del diseño de digestores anaerobios duales (a dos temperaturas). Estos digestores duales realizan una doble función con la fracción orgánica urbana: una fermentación termofílica de la materia orgánica produciendo un caudal constante de hidrógeno biológico (biocombustible 1), y una posterior digestión mesofílica en el segundo digestor anaerobio produciendo una corriente a muy alta concentración de metano que también puede ser utilizado como biocombustible.

El/la alumno/a pondrá en marcha los digestores y será el responsable de su optimización con el objetivo de alcanzar una corriente de biometano de alta pureza a partir de los fangos de EDAR. Este TFG también tiene como objetivo obtener resultados de calidad que puedan ser posteriormente publicados y difundidos en conferencias nacionales e internacionales.

**Importante:** El TFG es experimental y supone más de un 70% de trabajo en el laboratorio.

Direcció: Dr. Yeray Asensio Ramírez

### **19. Evaluación tecno-económica y ambiental de las tecnologías de purificación del biogás.**

El objetivo es realizar una evaluación integral de las principales tecnologías de mejora o upgrading del biogás, analizando su viabilidad desde los puntos de vista técnico, económico y ambiental. El estudio abarca la comparación de diferentes métodos de purificación —como la absorción química, la adsorción física, la separación por membranas y la criogenia— con el fin de determinar las opciones más sostenibles y eficientes para la producción de biometano.

Además, se valorarán los costes de inversión y operación, la eficiencia energética, las emisiones asociadas y el impacto ambiental global de cada alternativa utilizando herramientas de simulación de procesos cuando sea posible, así como de metodología de análisis de ciclo de vida. Se espera que los resultados permitirán identificar la tecnología más adecuada según distintos contextos de aplicación, contribuyendo así al desarrollo de soluciones sostenibles en el ámbito de las energías renovables y la economía circular.

Direcció: Dr. Daniel Vazquez Vazquez



## **20. Electrochemical reactions in flow chemistry.**

Flow Chemistry is acquiring a key importance in the Fine Chemistry and Specialties industry. It allows, among other advantages, to automate processes, increase quality, minimize safety problems, reduce development times and lower investment in facilities. In addition, it is perfectly in line with the philosophy of the concept "Quality by design" which is the present and the future of manufacturing in the pharmaceutical field. The present work will focus on performing electrochemical organic synthesis reactions both in batch and in flow. Variables such as the concentration of reagents and electrolyte, intensity and electrical charge will be studied and optimized. Furthermore, a scope will be prepared, where other molecules of the same family will be synthesized using the developed methodology.

Direcció: Dr. Xavier Berzosa Rodríguez

## **21. Study of the Steps to Obtain the My Green Lab Certification for the Chemical Process Engineering Laboratory at CTPTI.**

The My Green Lab Certification is an internationally recognized certification program that evaluates the sustainability of a laboratory according to various criteria (energy, water, waste, purchasing, culture of sustainability, etc.). It is considered the global standard for sustainable laboratories.

This Final Degree Project aims to study the shortcomings and requirements of the Chemical Process Engineering Laboratory at CTPTI and determine the actions to be taken in order to obtain this accreditation.

Direcció: Dr. Xavier Berzosa Rodríguez i Dr. Cristina Alonso Alija

## **22. Síntesis y caracterización de óxidos de hierro mixtos: influencia de los parámetros de preparación en sus propiedades estructurales.**

Se propone un trabajo final de grado dedicado al análisis riguroso de la síntesis de óxidos de hierro mixtos, con especial atención a la influencia de los parámetros de preparación sobre su composición, morfología y propiedades magnéticas. El estudio abordará de forma metódica la variación de factores como la relación  $\text{Fe}^{2+}/\text{Fe}^{3+}$ , el control de pH, las condiciones de nucleación y crecimiento, así como los tratamientos posteriores al precipitado. el propósito es establecer correlaciones claras entre las condiciones experimentales y la calidad del material obtenido, proporcionando una base sólida para la optimización de procesos de obtención de óxidos de hierro de alta pureza y comportamiento reproducible.

Este TFG es experimental y supone trabajar más del 75 % del tiempo en el laboratorio.

Direcció: Dr. Manuel David Abad Roldán

## **ENGINYERIA QUÍMICA I CIÈNCIA DE MATERIALS / DEPARTAMENT BIOENGINYERIA**

### **23. Development of electrochemical and bio-electrochemical sensors for qualitative and quantitative analysis of glucose.**

El presente TFG aborda la síntesis y caracterización electroquímica de un biosensor electroquímico de glucosa, con el objetivo de desarrollar un biosensor económico y versátil que puede desarrollarse en un futuro próximo para distintas áreas de conocimiento como la ingeniería ambiental, ingeniería química, la biotecnología y las ciencias biomédicas. La investigación se centrará en la funcionalización de electrodos de trabajo, explorando la inmovilización de la enzima Glucosa Oxidasa (GOx) o la deposición de nanomateriales para facilitar la oxidación de la glucosa. Mediante el uso de voltamperometría cíclica y amperometría a potencial fijo, se optimizarán las variables experimentales —incluyendo el pH del electrolito y la densidad de corriente— para alcanzar una respuesta amperométrica estable y robusta. El resultado fundamental será la validación analítica del prototipo, determinando la sensibilidad, y el límite de detección (LOD).

**Importante:** El TFG es experimental y supone más de un 70% de trabajo en el laboratorio.

Direcció: Dr. Yeray Asensio Ramírez i Dra. Patricia González Sáenz

### **24. Adapting OM-PBAE synthesis protocols to Flow Chemistry for the production and characterization of polymeric nanoparticles.**

Flow Chemistry is acquiring a key importance in the Fine Chemistry and Specialties industry. It allows, among other advantages, to automate processes, increase quality, minimize safety problems, reduce development times and lower investment in facilities. The focus of this project is to investigate the adaptation of the oligo( $\beta$ -amino ester) (OM-PBAE) polymer synthesis protocol to continuous flow chemistry, aiming to enhance the efficiency and reproducibility of polymer production. The focus is on synthesizing different types of OM-PBAEs using flow chemistry and subsequently using these polymers to produce polymeric nanoparticles.

Direcció: Dr. Xavier Berzosa Rodríguez i Dr. Marta Guerra Rebollo

## **DEPARTAMENT QUÍMICA ANALÍTICA I APLICADA**

### **25. Modelatge d'elements ceràmics conductors de protó mitjançant impressió 3D per extrusió.**

L'objectiu del Projecte ITER és demostrar la viabilitat de la fusió nuclear, la qual requereix el desenvolupament d'eines capaces de determinar els diferents isòtops de l'hidrogen en temps

real. El Laboratori de Mètodes Electromètrics ha desenvolupat sensors electroquímics d'hidrogen utilitzant l'electròlit sòlid  $\text{BaCe}_{0.6}\text{Zr}_{0.3}\text{Y}_{0.1}\text{O}_{3-\delta}$  capaços de funcionar en condicions extremes, com les de ITER. Actualment, aquests elements ceràmics es conformen per pressió uniaxial, però cal explorar noves geometries amb major àrea activa mitjançant la impressió 3D per millorar-ne la resposta.

Aquest projecte es centrarà en el desenvolupament de la pasta ceràmica (barbotina) per a la impressió 3D d'aquest electròlit. Les peces obtingudes, es sinteritzaran i es caracteritzaran (DRX, SEM-EDS, porositat). Finalment, es construiran sensors amb les peces impreses en 3D per avaluar-ne la seva resposta electroquímica.

Direcció: Dr. Sergi Colominas Fuster i Dr. Jordi Abellà Iglesias

## **26. Modelatge d'elements ceràmics conductors de liti mitjançant impressió 3D per extrusió.**

El projecte ITER té com a objectiu demostrar la viabilitat d'una reacció de fusió nuclear entre el deuteri i el triti com a futura font d'energia. Atès que el triti és un element que no es troba a la natura, s'ha de generar in situ. Una de les propostes per generar triti és a partir del  $^6\text{Li}$ , el qual es trobarà en un aliatge fos de Pb-Li en la seva composició eutèctica. En aquest context, ja que el liti es consumirà durant el funcionament del reactor, es requereix el desenvolupament d'eines capaces de quantificar el liti en l'aliatge fos de plom-liti. Amb aquesta finalitat, el Laboratori de Mètodes Electroquímics ha desenvolupat sensors de liti utilitzant electròlits d'estat sòlid, per exemple  $\text{Li}_6\text{BaLa}_2\text{Ta}_2\text{O}_{12}$  (LBLTO) and  $\text{Li}_6\text{La}_3\text{Ta}_{1.5}\text{Y}_{0.5}\text{O}_{12}$  (LLTYO).

Aquest projecte es centrarà en el desenvolupament de la pasta ceràmica (barbotina) per a la impressió 3D d'aquest electròlit. Les peces obtingudes, es sinteritzaran i es caracteritzaran (DRX, SEM-EDS, porositat). Finalment, es construiran sensors amb les peces impreses en 3D per avaluar-ne la seva resposta electroquímica

Direcció: Dr. Jordi Abellà Iglesias i Dr. Sergi Colominas Fuster

## **27. Densificació del conductor iònic de liti $\text{Li}_{6.45}\text{Al}_{0.25}\text{La}_{2.8}\text{Sr}_{0.2}\text{Zr}_2\text{O}_{12}$ per a la construcció de sensors electroquímics.**

El liti és un element clau en les tecnologies de fusió per la generació de triti en els embolcalls regeneradors d'aquest isòtop (Tritium Breeding Modules - TBM). En aquest context, és necessari el desenvolupament de sensors que permetin la seva quantificació. Els sensors electroquímics de liti basats en l'ús d'electròlits sòlids amb conducció iònica de Li tenen bones propietats per poder dur a terme aquesta monitorització.

En aquest treball es proposa l'ús de l'electròlit en estat sòlid  $\text{Li}_{6.45}\text{Al}_{0.25}\text{La}_{2.8}\text{Sr}_{0.2}\text{Zr}_2\text{O}_{12}$  per a la construcció de sensors electroquímics de liti. En treballs previs, s'ha observat la dificultat del procés de sinterització, ja que la densificació obtinguda n'és insuficient. Així doncs, en el present treball es proposa l'ús d'ajudants de sinterització, com ZnO o NiO, per a tal de millorar

aquest paràmetre sense comprometre la seva estructura cristal·lina. Finalment, es construiran sensors amb les peces densificades per avaluar-ne la seva resposta electroquímica.

Direcció: Dr. Sergi Colominas Fuster i Dr. Jordi Abellà Iglesias

## **28.Reutilización de productos sintetizados en prácticas de química general: evaluación de pureza y aplicación en nuevas síntesis como estrategia de economía circular en el laboratorio docente.**

Este Trabajo de Fin de Grado pretende estudiar la viabilidad de reutilizar productos obtenidos por estudiantes en prácticas de química general e inorgánica, evaluando su pureza y aplicabilidad como reactivos en nuevas síntesis. El objetivo es fomentar la economía circular en el laboratorio docente, reducir la generación de residuos y optimizar el uso de recursos. Se estudiará cómo afecta la pureza de dichos productos cuando se utilizan como reactivos de partida para nuevas reacciones, y se diseñarán nuevas prácticas que incorporen estos productos reciclados. El estudio incluirá una comparación entre productos comerciales y reciclados en términos de rendimiento y calidad de los resultados.

Tiene los siguientes objetivos específicos: i) Clasificar y caracterizar los productos almacenados según tipo de compuesto y posible uso; ii) Determinar la pureza de los productos mediante técnicas accesibles en laboratorio docente; iii) Comparar los resultados obtenidos con reactivos reciclados frente a reactivos comerciales; iv) Diseñar y probar nuevas prácticas que incorporen estos productos como reactivos de partida; v) Proponer estrategias para implementar la economía circular en laboratorios de docencia química.

Direcció: Dra. Judith Báguena Polo i Dra. M<sup>a</sup> Victoria Codera Pastor

## **29.Exploring Optical Binding Between Heterogeneous Metallic Nanoparticles: Analogies with Chemical Bonding.**

Optical binding refers to the phenomenon where particles experience mutual forces due to the interference of light scattered by each particle. This effect is particularly significant at the nanoscale, where metallic nanoparticles interact strongly with electromagnetic fields through plasmonic resonances. Understanding these interactions is crucial for applications in nanophotonics, optical trapping, and self-assembly of nanostructures. Interestingly, optical binding shares conceptual similarities with chemical bonding: both involve attractive and repulsive forces that depend on distance, orientation, and energy exchange. While chemical bonds arise from electron sharing or transfer, optical binding originates from electromagnetic field coupling. Drawing parallels between these two phenomena can provide new insights into designing optically controlled nanostructures.

In this work, the student will: (i) Study the optical binding forces between two different metallic nanoparticles (e.g., gold and silver) under laser illumination; (ii): Analyze how particle size, shape, and material properties influence the strength and nature of optical binding; and (iii):

Establish analogies with chemical bonding, comparing parameters such as bond strength, equilibrium distance, and energy landscapes.

The student will get valuable experience in material characterization and optical microscopy in the framework of an international consortium with members from Spain, and Belgium. Exist the possibility to extend this project with a MSc and/or PhD thesis with short research stays in their laboratories.

Direcció: Dr. Roger Bresolí Obach i Dr. Santi Nonell Marrugat

### **30. Development of a Phototheragnostic Medical Device for Tumor Imaging and Photodynamic Therapy.**

**Introduction:** Photodynamic Therapy (PDT) is rapidly gaining attention as a powerful approach for combined diagnosis and treatment (phototheragnostics) in oncology. This project aims to design and develop an innovative medical device capable of delivering controlled light of multiple wavelengths and intensities directly to tumor tissues. The system will integrate real-time optical imaging to guide surgical resection and optimize PDT treatment, ensuring precision and improved patient outcomes.

#### **Key Objectives:**

- **Device Engineering:** Design and prototype a versatile light-delivery system with adjustable wavelength and intensity settings suitable for activating different photosensitizers.
- **Imaging Integration:** Incorporate high-resolution optical imaging for real-time visualization of tumor margins and treatment monitoring.
- **Therapeutic Optimization:** Develop protocols for combining imaging and PDT to enhance tumor eradication while minimizing damage to healthy tissue.
- **Validation:** Conduct preclinical testing to evaluate device performance, imaging accuracy, and therapeutic efficacy.

Direcció: Dr. Roger Bresolí Obach i Dr. Santi Nonell Marrugat

## **DEPARTAMENT QUÍMICA ANALÍTICA I APLICADA / DEPARTAMENT ENGINYERIA QUÍMICA I CIÈNCIA DE MATERIALS**

### **31. Mineralización de PFAS en aguas residuales mediante estrategias electroquímicas.**

El TFG aborda la problemática ambiental causada por las sustancias perfluoroalquiladas y polifluoroalquiladas (PFAS) conocidos como “químicos eternos” debido a la gran estabilidad del enlace carbono-flúor que les otorga una gran persistencia en el medio ambiente. El trabajo

propuesto propone estrategias electroquímicas basadas en la oxidación avanzada de estos compuestos hasta su mineralización total. Se explorará la oxidación directa de los contaminantes, y la oxidación medida mediante la producción de radicales de alta eficiencia como por ejemplo el radical superóxido e hidroxilo.

**Importante:** El TFG es experimental y supone más de un 70% de trabajo en el laboratorio.

Direcció: Dr. Cristian Gómez Canela i Dr. Yeray Asensio Ramírez

## **DEPARTAMENT QUÍMICA ORGÀNICA I FARMACÈUTICA**

### **32. Development of Covalent Inhibitors for Understudied Protein Kinases.**

Although many successful and historical drugs such as aspirin, penicillin and omeprazole act inhibiting covalently their molecular targets, for a long time the design of drugs with a covalent mechanism of action has been avoided by pharmaceutical industries due to concerns about safety and selectivity. However, with the advent of structure-based approaches and the “omics” era, pharma-companies and academic labs have recently revival the design of covalent inhibitors in a rational manner, with outstanding results demonstrated by recent approvals of covalent drugs exemplified by Sotorasib, a mutant-KRASG12C inhibitor, and Nirmatrelvir, a SARS-CoV2 Mpro inhibitor. Protein kinases are among the most important human drug targets, being responsible for regulating cellular cycle and many others crucial physiological events. Overexpression of these proteins implies several diseases, such as different types of cancers. Currently, we have 88 approved drugs as protein kinase inhibitors, however, there is still a substantial fraction of the so-called “kinome” with an unknown biological function, which is an enormous potential source for the developing of new drugs (see <https://doi.org/10.1021/acs.jmedchem.1c00980>).

Here we are looking for very motivated students to work in a synthetic organic chemistry lab to generate covalent inhibitors for understudied protein kinases.

Direcció: Dr. Ricardo A. M. Serafim

## **DEPARTAMENT QUÍMICA ORGÀNICA I FARMACÈUTICA / DEPARTAMENT ENGINYERIA QUÍMICA I CIÈNCIA DE MATERIALS**

### **33. Optimization of a continuous-flow reaction.**

Flow Chemistry is acquiring a key importance in the Fine Chemistry and Specialties industry. It allows, among other advantages, to automate processes, increase quality, minimize safety problems, reduce development times, and lower investment in facilities. In addition, it is perfectly in line with the philosophy of the concept “Quality by design” which is the present and the future of manufacturing in the pharmaceutical field.



The present work consists in the study and the optimization of a chemical reaction employed in the manufacturing of Active Pharmaceutical Ingredients. The optimization will be done mainly employing Design of Experiments and Bayesian Optimization (machine learning). The main variables involved in the reaction (T, residence time, solvent...) will be studied to maximize productivity, minimize costs and reduce the environmental impact.

Direcció: Dr. Xavier Berzosa Rodríguez i Dr. Daniel Vazquez Vazquez

## **DEPARTAMENT BIOENGINYERIA / DEPARTAMENT ENGINYERIA QUÍMICA I CIÈNCIA DE MATERIALS**

### **34. Design and structural characterization of zwitterionic/conjugated copolymer-coated silver nanoparticles for enhanced antibacterial performance.**

Bacterial colonization and biofilm formation on medical surfaces remain a major clinical challenge, especially in contexts where conventional antibiotics fail due to resistance. Antibacterial nanomaterials based on silver are a promising alternative because silver nanoparticles (AgNPs) can disrupt bacterial membranes and interfere with essential metabolic processes. However, uncontrolled release of silver ions and poor interaction of the nanoparticles with bacterial surfaces can limit efficacy and raise cytotoxicity concerns in host tissues.

This project proposes the design and characterization of engineered silver nanoparticles coated with a tailored zwitterionic/conjugated copolymer. The working hypothesis is that the zwitterionic block can tune colloidal stability and interfacial behavior in biological media, while the conjugated block can promote strong interaction with bacterial membranes. By increasing nanoparticle adhesion to bacteria, we aim to (i) improve local contact-mediated killing and (ii) reduce the total silver dose required for bactericidal effect.

The work will focus on three technical axes. First, structural and physicochemical characterization of the zwitterionic/conjugated copolymer (composition, molecular weight, charge distribution, and amphiphilicity), using analytical techniques such as NMR and mass spectrometry. Second, synthesis of silver nanoparticles with controlled size distribution, followed by surface functionalization with the copolymer, and full colloidal characterization (hydrodynamic diameter, zeta potential, morphology, and stability). Third, evaluation of antibacterial performance, including bacterial adhesion assays and bactericidal activity tests against model bacterial strains, comparing coated vs. uncoated AgNPs.

Direcció: Dra. Patricia González Sáenz i Dr. Robert Texidó Bartés



**DEPARTAMENT ENGINYERIA INDUSTRIAL / DEPARTAMENT  
ENGINYERIA QUÍMICA I CIÈNCIA DE MATERIALS**

**35. Modelatge i disseny d'un controlador de nivell a una columna d'absorció.**

Les absorcions i destil·lacions representen dues de les operacions de separació més freqüents a diverses indústries (Química, Farmacèutica, Alimentària...), ambdues aprofitant els equilibris termodinàmics entre corrents líquides i gasoses per aconseguir separar les substàncies desitjades.

Tot i la seva ampla aplicació, aquestes dues unitats s'han de dissenyar tenint en compte la possible inundació interna, on el cabal de gas no deixa fluir el cabal líquid adequadament, fent que s'acumuli el líquid dins la columna i s'inundi.

A aquest projecte es focalitzarà en el desenvolupament d'un model per a descriure la resposta de la inundació d'una columna d'absorció al canvi dels cabals líquid i gas. Amb aquest model, es dissenyarà i proposarà un sistema de control per evitar el règim d'inundació.

Direcció: Dr. Sauro Yagüe Yagüe i Dr. Raul Calvo Serrano

**DEPARTAMENT MATEMÀTIQUES I ANALÍTICA DE DADES /  
DEPARTAMENT QUÍMICA ANALÍTICA I APLICADA**

**36. Disseny i validació d'una rúbriques per a l'avaluació de TFGs en el Grau en Química.**

Tot sovint l'avaluació en l'ensenyament superior es basa en la valoració de la producció de l'estudiantat, ja es tracti d'un treball, d'un projecte o d'una presentació. Avaluar de forma equitativa i informativa en aquests casos no és fàcil. I encara es complica més quan cada treball té uns requeriments diferents i volem avaluar l'assoliment de diferents competències o resultats d'aprenentatge. En aquests casos, les rúbriques constitueixen una tècnica d'avaluació més objectiva, més clara i més fàcil de justificar. Però crear-les i validar-les no és trivial. En aquest treball, proposem definir una o un conjunt de rúbriques que permetin avaluar la memòria escrita del TFG del Grau en Química, incloent les competències que figuren en el seu disseny curricular. Aquestes es validaran usant una mostra dels treballs presentats en cursos anteriors.

Direcció: Dr. Jordi Cuadros Margarit i Dra. Judith Báguena Polo

**37. Chemical reactions and databases.**

La gestió, tractament i integració d'informació química en un món altament digitalitzat és cada vegada més complexa. Tot i que la gestió de la informació de les substàncies químiques està força resolta i existeixen un bon nombre de bases de dades que podem relacionar, no podem dir el mateix de les reaccions químiques. Aquest treball se centrarà en la descripció dels identificadors existents per a reaccions químiques i les seves característiques. Al mateix temps,

s'exploraran les bases de dades obertes de reaccions químiques i s'estudiaran les possibilitats de relacionar-les.

Direcció: Dr. Jordi Cuadros Margarit i Dr. Roger EstradaTejedor

## **DEPARTAMENT CÀTEDRA ÈTICA I PENSAMENT CRISTIÀ / MATEMÀTIQUES I ANALÍTICA DE DADES**

### **38. Data analytics and digital ethics: estudi de la percepció de les famílies sobre l'adopció de tecnologia smartphone en la població adolescent.**

La irrupció dels smartphones fa aproximadament 15 anys ha comportat una adopció massiva d'aquesta tecnologia entre la població. En els darrers anys, noves evidències científiques posen de manifest l'impacte dels smartphones en la salut mental, l'educació i la convivència entre els menors d'edat. Aquesta situació obre un debat ètic fonamental en el context tecnològic actual: quina és la millor edat per a l'adopció d'aquesta tecnologia? Quins factors impulsen les famílies a proporcionar un smartphone als seus fills ? Per abordar aquestes qüestions, s'utilitzaran dades obtingudes de l'enquesta MobilePressure a més de 500 famílies de Barcelona. A través de l'analítica de dades s'identificaran i analitzaran els factors rellevants vinculats a l'adopció dels smartphones en adolescents i a les percepcions de les famílies sobre aquesta tecnologia. Alhora es durà a terme una anàlisi ètica sobre les implicacions d'aquest fenomen, i es proposaran diverses accions vinculades a l'àmbit de l'educació digital de famílies i adolescents per abordar aquesta problemàtica.

Direcció: Dr. Xavier Casanovas Combalia i Dr. Francesc Martori Adrián

## **DEPARTAMENT ENGINYERIA INDUSTRIAL**

### **39. Study and Deployment of AI Multi-Agent System Workflows for Industrial or Healthcare Applications.**

AI multi-agent systems are among the most disruptive advances in 2025, enabling coordinated interaction between multiple specialized AI agents (e.g., AI co-scientists, Med-Gemini, AlphaEvolve, robotic-AI collaboration).

This project will introduce the student to multi-agent architectures, Large Language Models (LLMs), and MCP (Model Context Protocol) frameworks that allow autonomous AI tools to collaborate and reason.

The student may explore applications ranging from industrial workflow automation (e.g., LLM-driven process analysis) to scientific discovery assistants (e.g., AI co-researchers).

Strong interest in artificial intelligence and systems integration is a must; Python is encouraged but not mandatory.

Direcció: Dr. Antonio Gabino Salazar Martín