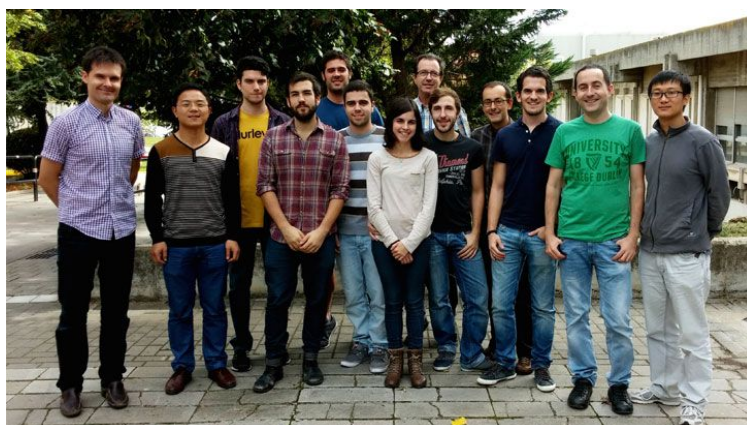


09/03/2016

Grup de Recerca Catàlisi d'Oxidació Selectiva (SelOxCat)



La demanda energètica de les societats actuals és cada vegada més elevada, mentre que les reserves de combustibles d'origen no renovable, les més utilitzades, van minvant. En aquesta situació, la recerca de fonts d'energia renovables adquireix una importància rellevant. El grup de recerca SelOxCat (Catàlisi d'Oxidació Selectiva) utilitza una àmplia gamma de tècniques per tal d'estudiar, comprendre i desenvolupar les reaccions principals per a la producció de combustibles renovables a partir d'aigua i llum solar.

El grup de recerca SelOxCat (Catàlisi d'Oxidació Selectiva) centra la seva atenció en el disseny i preparació de sistemes moleculars o col·loïdals basats en metalls de transició i materials híbrids per a ser aplicats com a catalitzadors en reaccions d'oxidació-reducció. En particular, el grup està interessat en l'estudi, la comprensió i el desenvolupament de les reaccions principals per a la producció de combustibles renovables a partir d'aigua i llum solar, com ara l'oxidació de l'aigua a oxigen gas i la reducció de protons a hidrogen gasós o la reducció de diòxid de carboni a metanol o gas metà. Utilitza una àmplia gamma de

tècniques, incloent l'espectroscòpia, l'electroquímica, la microscòpia electrònica i la cristal·lografia de raigs X, per tal d'entendre aquests processos a nivell molecular o atòmic.

El grup va néixer l'any 2011 dins del Departament de Química de la UAB. Actualment està dirigit pels professors de l'àrea de Química Inorgànica Xavier Sala, Jordi García-Antón, Roger Bofill i Lluís Escriche, i compta amb cinc estudiants de doctorat (Rosa González, Jonathan De Tovar, Marcos Gil, Jordi Creus, Bing Jiang), un estudiant de màster (Lluís Solà) i quatre estudiants de Treball de Final de Grau.

Línies de recerca

La recerca del grup SelOxCat es reparteix entre tres grans línies:

Transformacions oxidatives selectives i sostenibles. Entre els productes oxigenats, els epòxids (molècules orgàniques formades per un anell de 3 àtoms que contenen un àtom d'oxigen) tenen una importància central en la síntesi orgànica ja que proporcionen accés a molècules molt diverses per mitjà de transformacions posteriors. A més, els seus derivats quirals (molècules que presenten la propietat de no ser superposables amb la seva imatge en el mirall) constitueixen productes intermedis versàtils per a la síntesi de nombrosos productes naturals i substàncies biològicament actives. No obstant això, la major part dels mètodes habituals de preparació encara es basen en l'ús d'oxidants molt cars o bé altament tòxics. La nostra recerca se centra en el desenvolupament de metodologies selectives i enantioselectives (és a dir, que permeten distingir entre una molècula quirals i el seu enantiòmer, que és una altra molècula ja que és la imatge especular no superposable de la primera) sostenibles per a la preparació d'epòxids.

Nous esquemes de conversió d'energia. Fotosíntesi artificial. La dissociació de l'aigua per la llum solar és una alternativa atractiva a la fotosíntesi, ja que és una reacció molt neta i simple des d'un punt de vista químic. Aquest procés, anomenat fotosíntesi artificial, es basa en l'ús de catalitzadors sintètics no proteics per a l'oxidació de l'aigua a oxigen molecular i la reducció dels protons de l'aigua a hidrogen gas (combustible d'alt rendiment) o bé del CO₂ atmosfèric a productes energèticament o sintèticament útils (gas metà, metanol, formaldehid, etc.). L'objectiu general del grup consisteix en generar energia neta a partir d'aigua i llum solar per mitjà de reaccions catalítiques harmònicament combinades en una cel·la fotoelectroquímica.

Ús de nanopartícules en catalísi. Química de superfícies. Els processos descrits en els punts anteriors també es poden dur a terme mitjançant materials de mida nanomètrica (col·loides, generalment de metalls de transició) estabilitzats per molècules adherides a la seva superfície (anomenades lligands). L'objectiu de recerca d'aquesta línia es basa en la caracterització molecular de les interaccions lligand-nanopartícula a escala molecular mitjançant tècniques espectroscòpiques (essencialment RMN) durant les transformacions oxidatives abans descrites.

Selecció de publicacions dels darrers tres anys

AGUILÓ, J.; FRANÇÀS, L.; BOFILL, R.; GIL-SEPULCRE, M.; GARCÍA-ANTÓN, J.; POATER, A.; LLOBET, A.; ESCRICHE, L.; MEYER, F.; SALA, X. Powerful Bis-facially Pyrazolate-Bridged Dinuclear Ruthenium Epoxidation Catalysts. *Inorganic Chemistry*. 2015, vol. 54, num. 14, p. 6782-6791. doi: 10.1021/acs.inorgchem.5b00641.

AGUILÓ, J.; FRANCÀS, L.; LIU, H.; BOFILL, R.; GARCÍA-ANTÓN, J.; BENET-BUCHHOLZ, J.; LLOBET, A.; SALA, X. Characterization and Performance of Electrostatically adsorbed Ru-Hbpp Water Oxidation Catalysts. *Catalysis Science and Technology*. 2014, vol. 4, 190-199. doi: 10.1039/C3CY00643C.

BOFILL, R.; GARCÍA-ANTÓN, J.; ESCRICHE, L.; SALA, X. Chemical, Electrochemical and Photochemical Molecular Water Oxidation Catalysts. *Journal of Photochemistry and Photobiology B: Biology*. 2015, vol. 152, part A, p. 71-81. doi: 10.1016/j.jphotobiol.2014.10.022.

BOFILL, R.; GARCÍA-ANTÓN, J.; ESCRICHE, L.; SALA, X.; LLOBET, A. Water Oxidation. REEDIJK, J.; POEPELMEIER, K. (eds). *Comprehensive Inorganic Chemistry II 2nd editon*. Elsevier, 2013, vol. 8, chapter 8.13, p. 505-523. doi: 10.1016/B978-0-08-097774-4.00821-4.

FRANCÀS, L.; BOFILL, R.; GARCÍA-ANTÓN, J.; ESCRICHE, L.; SALA, X.; LLOBET, A. Ru-based Water Oxidation Catalysts. LLOBET, A. (ed). *Molecular Water Oxidation Catalysts: A Key Topic for New Sustainable Energy Conversion Schemes*. John Wiley & Sons, Ltd., 2014, p. 29-50. doi: 10.1002/9781118698648.ch3.

FRANCÀS, L.; GARCIA-GIL, R. M.; MOYANO, D.; BENET-BUCHHOLZ, J.; GARCÍA-ANTÓN, J.; ESCRICHE, L.; LLOBET, A.; SALA, X. Dinuclear Ruthenium Complexes Containing the HpbI Ligand: Synthesis, Characterization, Linkage Isomerism, and Epoxidation Catalysis. *Inorganic Chemistry*. 2014, vol. 53, num. 19, p. 10394-10402. doi: 10.1021/ic501483s.

GARCÍA-ANTÓN, J.; BOFILL, R.; ESCRICHE, L.; LLOBET, A.; SALA, X. Transition metal complexes containing the dinucleating tetra-N dentate Hbpp ligand: a robust scaffold for multiple applications including the catalytic oxidation of water to dioxygen. *European Journal of Inorganic Chemistry*. 2012, num. 30, p. 4775-4789. doi: 10.1002/ejic.201200661.

MATHEU, R.; ERTEM, M. Z.; BENET-BUCHHOLZ, J.; CORONADO, E.; BATISTA, V. S.; SALA, X.; LLOBET, A. Intramolecular proton transfer boosts water oxidation catalyzed by a Ru complex. *Journal of American Chemical Society*. 2015, vol. 137, num. 33, p. 10786-10795. doi: 10.1021/jacs.5b06541.

MATHEU, R.; FRANCÀS, L.; CHERNEV, P.; ERTEM, M. Z.; BATISTA, V. S.; HAUMANN, M.; SALA, X.; LLOBET, A. Behavior of the Ru-bda Water Oxidation Catalyst Covalently Anchored on Glassy Carbon Electrodes. *ACS Catalysis*. 2015, vol. 5, num. 6, p. 3422-3429. doi: 10.1021/acscatal.5b00132.

SALA, X.; MAJI, S.; BOFILL, R.; GARCÍA-ANTÓN, J.; ESCRICHE, L.; LLOBET, A. Molecular Water Oxidation Mechanisms Followed by Transition Metals: State of the Art. *Accounts of Chemical Research*. 2014, vol. 47, num. 2, p. 504-516. doi: 10.1021/ar400169p.

Roger Bofill

Xavier Sala

Jordi Garcia Antón

Lluís Escriche

Grup de Recerca SelOxCat

Departament de Química

Roger.Bofill@uab.cat, Xavier.Sala@uab.cat, Jordi.GarciaAnton@uab.cat,

Lluis.Escriche@uab.cat

[View low-bandwidth version](#)