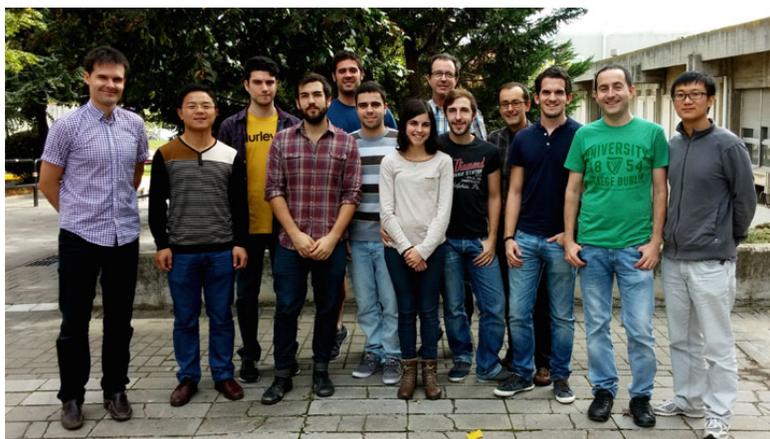


# UABDIVULGA

BARCELONA RECERCA | INNOVACIÓ

09/03/2016

## Grupo de Investigación Catálisis de Oxidación Selectiva (SelOxCat)



La demanda energética de las sociedades actuales es cada vez más elevada, mientras que las reservas de combustibles de origen no renovable, las más utilizadas, van disminuyendo. En esta situación, la búsqueda de fuentes de energía renovables adquiere una importancia relevante. El grupo de investigación SelOxCat (Catálisis de Oxidación Selectiva) utiliza una amplia gama de técnicas para estudiar, comprender y desarrollar las reacciones principales para la producción de combustibles renovables a partir de agua y luz solar.

El grupo de investigación SelOxCat (Catálisis de Oxidación Selectiva) centra su atención en el diseño y preparación de sistemas moleculares o coloidales basados en metales de transición y materiales híbridos para ser aplicados como catalizadores en reacciones de oxidación-reducción. En particular, el grupo está interesado en el estudio, la comprensión y el desarrollo de las reacciones principales para la producción de combustibles renovables a partir de agua y luz solar, tales como la oxidación del agua a oxígeno gas y la reducción de protones a hidrógeno gaseoso o la reducción de dióxido de carbono a metanol o gas metano. Utiliza una amplia gama de técnicas, incluyendo la espectroscopia, la electroquímica, la microscopía electrónica y la cristalografía de rayos X, para entender estos procesos a nivel molecular o atómico.

El grupo nació en 2011 dentro del Departamento de Química de la UAB. Actualmente está

dirigido por los profesores del área de Química Inorgánica Xavier Sala, Jordi García-Antón, Roger Bofill y Luis Escriche, y cuenta con cinco estudiantes de doctorado (Rosa González, Jonathan De Tovar, Marcos Gil, Jordi Creus, Bing Jiang), un estudiante de máster (Lluís Solà) y cuatro estudiantes de Trabajo de Fin de Grado.

### Líneas de investigación

La investigación del grupo SelOxCat se reparte entre tres grandes líneas:

**Transformaciones oxidativas selectivas y sostenibles.** Entre los productos oxigenados, los epóxidos (moléculas orgánicas formadas por un anillo de 3 átomos que contienen un átomo de oxígeno) tienen una importancia central en la síntesis orgánica ya que proporcionan acceso a moléculas muy diversas mediante transformaciones posteriores. Además, sus derivados quirales (moléculas que presentan la propiedad de no ser superponibles con su imagen en el espejo) constituyen productos intermedios versátiles para la síntesis de numerosos productos naturales y sustancias biológicamente activas. Sin embargo, la mayor parte de los métodos habituales de preparación aún se basan en el uso de oxidantes muy caros o bien altamente tóxicos. Nuestra investigación se centra en el desarrollo de metodologías selectivas y enantioselectivas (es decir, que permiten distinguir entre una molécula quiral y su enantiómero, que es otra molécula ya que es la imagen especular no superponible de la primera) sostenibles para la preparación de epóxidos.

**Nuevos esquemas de conversión de energía. Fotosíntesis artificial.** La disociación del agua por la luz solar es una alternativa atractiva a la fotosíntesis, ya que es una reacción muy limpia y simple desde un punto de vista químico. Este proceso, llamado fotosíntesis artificial, se basa en el uso de catalizadores sintéticos no proteicos para la oxidación del agua a oxígeno molecular y la reducción de los protones del agua a hidrógeno gas (combustible de alto rendimiento) o bien del CO<sub>2</sub> atmosférico a productos energéticamente o sintéticamente útiles (gas metano, metanol, formaldehído, etc.). El objetivo general del grupo consiste en generar energía limpia a partir de agua y luz solar por medio de reacciones catalíticas armónicamente combinadas en una celda fotoelectroquímica.

**Uso de nanopartículas en catálisis. Química de superficies.** Los procesos descritos en los puntos anteriores también se pueden llevar a cabo mediante materiales de tamaño nanométrico (coloides, generalmente de metales de transición) estabilizados por moléculas adheridas a su superficie (llamadas ligandos). El objetivo de investigación de esta línea se basa en la caracterización molecular de las interacciones ligando-nanopartícula a escala molecular mediante técnicas espectroscópicas (esencialmente RMN) durante las transformaciones oxidativas antes descritas.

### Selección de publicaciones de los últimos tres años

AGUILÓ, J.; FRANCÀS, 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 edition*. 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 HpbL 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**

Grupo de Investigación SelOxCat

Departamento de Química

[Roger.Bofill@uab.cat](mailto:Roger.Bofill@uab.cat), [Xavier.Sala@uab.cat](mailto:Xavier.Sala@uab.cat), [Jordi.GarciaAnton@uab.cat](mailto:Jordi.GarciaAnton@uab.cat),

[Lluis.Escriche@uab.cat](mailto:Lluis.Escriche@uab.cat)

[View low-bandwidth version](#)