

ANEXO I PROPOSTA DE PROXECTOS DE INVESTIGACIÓN STEMbach

Coordinación STEMbach na Facultade/Escola UVigo:	
Nome: Marta Teixeira Bautista	
Enderezo electrónico: gomaca@uvigo.es	Teléfono: 986 812 280
Dirección do proxecto	
Nome: Olalla Nieto Faza	
Enderezo electrónico: faza@uvigo.es	Teléfono: 986812632
Co-dirección do proxecto	
Nome: Carlos Silva López	
Enderezo electrónico: csilva@uvigo.es	Teléfono: 986812632
Bienio	2022-2024
Número de participantes (máx. 4)	1-4

Título

Diseño computacional de catalizadores para o aproveitamento da biomasa

Resumo

A biomasa é un recurso renovable e accesible que podemos aproveitar en substitución do petróleo como fonte de enerxía e de materias primas. Neste proxecto preténdese converter a fracción lignocelulósica de residuos agroforestais en especies químicas de alto valor engadido para a industria química. Para iso, estudaranse computacionalmente os mecanismos de reacción de fragmentación das cadeas de lignina, para deseñar complexos de molibdeno e vanadio que catalicen eficientemente eses procesos.

Obxectivo

Búscase un achegamento do alumnado ó impacto da modelización en ciencia, articulado a través dun problema real de química computacional aplicada con impacto no medio ambiente, na industria e o avance do coñecemento sobre os mecanismos das reaccións orgánicas/inorgánicas. O alumnado recibirá formación básica no uso de software científico e infraestruturas de computación de altas prestacións e estará en contacto con grupos de investigación computacional e experimental, participando nalgunhas das súas actividades cotiás. Asemade, traballará competencias relacionadas coa elaboración de hipóteses, deseño, execución e interpretación de experimentos e comunicación en diversos formatos.

Plan de traballo

1. Análise da bibliografía
2. Selección das reaccións que se van investigar
3. Uso dunha variedade de técnicas de modelización molecular para conseguir información sobre o mecanismo destas reaccións
4. Aplicación da información mecanística ó deseño de novos catalizadores que melloren estes procesos
5. Comunicación dos resultados do proxecto