



MASTERQUÍMICA XVII

Facultat de Química

Jornades de presentació de treballs experimentals
de màster de la Facultat de Química

24-26 de maig de 2022

LLIBRE DE RESUMS

Comissió de Dinamització Lingüística



Organització del Masterquímica

Comissió de Dinamització Lingüística
Facultat de Química

Membres de la Comissió de Dinamització Lingüística

Dolors Velasco Castrillo, secretària de la Facultat i presidenta de la Comissió
Joaquim Crusats Aliguer, representant del professorat de la secció de Química Orgànica
Joan Dosta Parras, representant del professorat de la secció d'Enginyeria Química
Joan Formosa Mitjans, representant del professorat de la secció de Ciència i Enginyeria dels Materials
Elisabet Fuguet Jordà, representant del professorat de la secció de Química Analítica
Xavier Vendrell Villafruela, representant del professorat de la secció de Química Inorgànica
Eudald Vilaseca Font, representant del professorat de la secció de Química Física
Glòria Durany Boixadós, cap de la Secretaria d'Estudiants i Docència
Núria Castells Quintana, representant dels Serveis Lingüístics de la UB

Amb la col·laboració dels Serveis Lingüístics a la Facultat de Química, i el suport de Mariona Soler Bover i Maria Òdena Blanch, becàries dels Serveis Lingüístics de la Universitat de Barcelona.

Il·lustració de la portada

Mosaic de la rectoria de la Universitat de Lisboa, Portugal

MASTERQUÍMICA XVII

Facultat de Química

Jornades de presentació de treballs experimentals
de màster de la Facultat de Química

24-26 de maig de 2022

Comissió de Dinamització Lingüística



Presentació

Des del seu inici, l'any 2005, el Masterquímica ha sigut, i és, sinònim de recerca i divulgació en català. La Comissió de Dinamització Lingüística de Facultat de Química de la Universitat de Barcelona, any rere any, ha fet un esforç perquè la recerca en català no quedi relegada a ambients concrets i poc divulgatius. La ciència és en si mateixa un idioma que pren, sovint, la mateixa forma, l'anglès, però des de la Facultat de Química ha quedat palès, amb l'edició d'enguany, que la ciència també pot prendre la forma del català i ser expressada en una llengua diferent de l'anglès.

El Masterquímica té com a principal objectiu que els estudiants dels màsters universitaris que s'ofereixen a la Facultat de Química exposin el seu treball de recerca en forma de pòster i en un resum, que es publica en aquest recull. Per a la majoria, és la primera vegada que formen part d'un grup de recerca de la Facultat i que s'involucren en una recerca que va més enllà del que han estudiat i après durant el grau. Els estudiants han de saber explicar de manera clara, entenedora i rigorosa la recerca que estan duent a terme en forma de resums i pòsters. Alhora, els pòsters romanen exposats durant una setmana en els espais de la facultat per difondre els seus treballs, i així es converteix en un espai d'intercanvi i trobada que permet compartir coneixements entre totes les persones involucrades en la facultat. D'aquesta manera, el principal objectiu del Masterquímica esdevé triple: científic, docent i divulgatiu.

La jornada del Masterquímica d'enguany, la dissetena, va tenir lloc entre el 24 i el 26 de maig de 2022 i, amb 44 participants, ha estat amb escreix la més nombrosa des del seu inici, cosa que va superar indubtablement les expectatives de la Comissió de Dinamització Lingüística de la Facultat.

Aquesta és la segona edició en què el llibre de resums es publica en format digital obert en el Dipòsit Digital de la UB i, per tant, tots els treballs presentats disposen d'un identificador digital i són a l'abast de qualsevol persona. D'aquesta manera la UB reforça una demanda aclamada per la comunitat científica i la societat: la necessitat d'una ciència oberta i disponible per a tothom.

Des de la Comissió de Dinamització Lingüística volem agrair l'elevada participació i la dedicació no només dels estudiants de màster que han participat en el Masterquímica d'enguany, sinó també de tot el professorat, personal d'administració i serveis, i equip deganal de la Facultat que han ajudat que el Masterquímica s'hagi consolidat com una activitat acadèmica d'interès científic i docent de primer ordre.

Comissió de Dinamització Lingüística
Facultat de Química

ÍNDIX DE RESUMS

Eduardo Antoñanzas ; Estela Giménez; Victòria Sanz <i>Determinació de glicans biomarcadors de càncer per MALDI-MS i CapLC-ESI-MS</i>	1	Mònica Canal ; Pedro Güixens; Jaume Garcia; Dolores Velasco <i>Disseny i síntesi de rotors BODIPY com a mecanosensors elastomèrics</i>	6	Jordi Duran Riu ; Xavier Companyó <i>Alquilació al·lilica asimètrica de fluorurs de Morita-Baylis-Hillman amb èters silícics d'enol catalitzada per una base de Lewis quiral</i>	11
Iris Ayas ; Georgios Magkanas; Jose F. García <i>La relació entre la composició de les pintures murals i el tipus de vil·la en diferents jaciments romans de Catalunya</i>	2	Laura Casanovas ; Xavier Subirats; Martí Rosés <i>Variació de la retenció cromatogràfica amb el pH de la fase mòbil en cromatografia de líquids d'interacció hidròfila (HILIC)</i>	7	Celia Escriche ; Sandra Codony; Santiago Vázquez <i>Síntesi del nucli benzohomoadamantà per al disseny, la síntesi i l'avaluació farmacològica de nous inhibidors de l'epòxid hidrolasa soluble (sEHI)</i>	12
Yasmina Bem Hammou Abboud ; Andreu Serra-Toro; Sergi Astals; Francesc Mas; Joan Dosta <i>Recuperació de nitrogen amoniacal en purins de porc utilitzant una membrana permeable al gas</i>	3	Eisuke Comas ; Arnau Calbó; Rosa Griera; Mercedes Amat <i>Síntesi de decahidroquinolines enantiopures amb un estereocentre quaternari a la posició C-4a</i>	8	Sara Espinosa ; Alex Tarancón; Héctor Bagán <i>Desenvolupament d'una PSresin per a mesures ràpides de ²¹⁰Pb en aigua de consum</i>	13
Gabriela Benedito ; Oriol Galeote; Pedro Romea; Fèlix Urpí <i>Addicions de Michael directes, catalítiques i enantioselectives sobre aldehids α,β-insaturats</i>	4	Alejandro Díaz Moreno ; Marina Pedrola; Ouldouz Ghashghaei; Rodolfo Lavilla Grífols <i>Síntesi d'indololocarbazoles substituïts mitjançant reaccions multicomponent</i>	9	Sheila Flores Corts ; Alex Taracón; Anna Rigol <i>Desenvolupament d'un mètode per a la quantificació de coeficients de distribució sòlid-líquid de poloni en sòls</i>	14
Mar Canal Bigard ; Anna M. Costa Arnau; Jaume Vilarrasa Llorens <i>Síntesi de fragments de l'amfidinolida B₂</i>	5	Andreu A. de Donato Pérez ; Stefan T. Bromley <i>D'espectre IR a estructura molecular: aprenentatge automàtic aplicat a silicats</i>	10	Clara García-Mateos ; Pep Rojo; Antoni Riera; Xavier Verdager <i>Síntesi de compostos nitrogenats bioactius mitjançant catàlisi asimètrica</i>	15

Javier González Díaz; Jordi García; Paul Lloyd-Williams <i>Síntesi d'un lligand quirals per a la formació de metal·lohelicats</i>	16	Alejandro Martín; Pol Barcelona; Elena Xuriguera <i>Millora de propietats mecàniques de materials impresos en 3D per estereolitografia</i>	21	David Naranjo; Pablo M. Blanco; J. L. Garcés; F. Mas; S. Madurga <i>Modelització computacional d'una solució d'àcids húmics</i>	26
Lidia de Gregorio Perpiñá; James D. Nicholas; Alessandro Sorrenti <i>Autoassemblatge dissipatiu de materials supramoleculars porosos formats per gàbies metal·loorgàniques (MOCs)</i>	17	Albert Martínez i Segura; Jaume Granell; Arnald Grabulosa <i>Reducció de cetones per transferència d'hidrogen catalitzada per compostos ciclometal·lats de ruteni</i>	22	Ainhoa Navarro-Abril; Javier Saurina; Sònia Sentellas <i>Determinació d'amines biògenes i aminoàcids per cromatografia de líquids amb i sense derivatització precolumna. Aplicació a la caracterització de vi i cava per mètodes quimiomètrics</i>	27
D. Gutiérrez-Martin; R. Gil-Solsona; A. Pons-Escoda; S. Díez; E. Restrepo-Montes; N. Vidal-Sarro; J. Bruna; P. Dadvand; C. Majós; P. Gago-Ferrero <i>L'exposoma químic en el glioma difús: un estudi exploratori</i>	18	Yaiza Martínez; Anton Vidal-Ferran; Arnald Grabulosa <i>Hidrogenació catalítica asimètrica mitjançant complexos de rodi(II) amb difosfans de pont de metilè</i>	23	Carlos Mario Olaya; Joan Dosta; Ricard Torres; Sergi Astals <i>Estudi de la biodegradabilitat de polímers biodegradables</i>	28
Leiyong Hu; Rodrigo Rocha de Oliveira; Adrián Gómez-Sánchez; Anna de Juan <i>Estudi del potencial de la fusió d'imatges hiperespectrals d'infraroig proper (NIR) i de color (RGB)</i>	19	Roger Morales; Albert Figuerola <i>Síntesi i caracterització de Bi2S3 nanoestructurat i compostos ternaris derivats per intercanvi catiònic</i>	24	Dana Orlando-Véliz; Manuel García-Vara; Miren López de Alda <i>Identificació de contaminants orgànics potencialment perillosos presents en aigües residuals regenerades per al reg agrícola</i>	29
Josep Marco Gibert; Narcís Homs Martí; Xavier Vendrell Villafruela <i>Aproximació a la síntesi hidrotermal de MXens del grup 5 (V, Nb, Ta)</i>	20	Martí Molera Janer; Teresa Andreu Arbella <i>Fotooxidació selectiva del glicerol</i>	25	Sergi Peña-Picola; Noemi Perez-Esteban; Sergi Astals; Joan Dosta <i>Producció biològica de polihidroxialcanoats aplicant l'alimentació per separat d'àcids grassos volàtils i nitrogen amoniacal</i>	30

Ana Piera Santacruz; Núria López Vinent; Alberto Cruz Alcalde <i>Eliminació de microcontaminants mitjançant aiguamolls construïts i processos d'oxidació avançada</i>	31	Luis R. Rodríguez-Javier; Xavier Ariza; Jordi Garcia; Pau Guillamon; Andrea Mancinelli <i>Síntesi de tetrahidroisoquinolines mitjançant activació C—H</i>	36	Guillem Sanz Liarte; Federica Rulli; Pol Roca; Nina Martinez; Raimon Puig de la Bellacasa; Ana B. Cuenca; Alexandr Shafir <i>Noves rutes cap a naftalens dopats amb el fragment BN</i>	41
Marina Piña; Susana Amézqueta; Elisabet Fuguet <i>Determinació de la permeabilitat a través de la pell de productes cosmètics utilitzant membranes artificials i mesures cromatogràfiques</i>	32	Albert Sales Alba; Bernardí Bayarri Ferrer <i>Eliminació de microcontaminants d'aigües residuals mitjançant biocarbó de closca d'arròs: síntesi, caracterització i capacitat d'adsorció</i>	37	Andrea Suárez-Herrera; Miquel Mellado-Hidalgo; Pedro Romea; Fèlix Urpí <i>Reaccions directes i enantioselectives de N-(2-azidoacetil) tioimides amb acetals dimetílics aromàtics catalitzades per complexos quirals de Ni(II)</i>	42
Judith Ramos; Clara Ràfols; Elisabet Fuguet <i>Estudi de l'efecte de diferents excipients en la solubilitat d'un fàrmac àcid-base</i>	33	Èric Sanahuja Rosich; Jessica Giró-Paloma; Anna Alfocea Roig; Joan Formosa Mitjans <i>Optimització i formació d'ettringita sintètica</i>	38	Júlia Vergés Oms; Pedro Güixens Gallardo; Jaume García Amorós; Dolors Velasco Castrillo <i>Síntesi i estudi d'un parell de fluoròfors per a elastòmers amb doble luminescència</i>	43
Sandra Rasero López; Anna Rigol Parera; Miquel Vidal Espinar <i>Avaluació de l'eficiència de biocarbons com a sorbents per a la descontaminació d'aigües</i>	34	Adrià Sànchez Ruiz; Lourdes Mestres Vila; Pilar Ramirez de la Piscina <i>Síntesi de MXens mitjançant l'aplicació d'ultrasons per a la catàlisi d'hidrogenació de CO₂</i>	39	Òscar Vidal; Qinghua Liao; Carme Rovira <i>Ús d'AlphaFold i altres mètodes computacionals en la predicció d'A4GALT i el seu estudi</i>	44
Marta Real; Joan Albert <i>Síntesi d'imines ciclopal·ladades endocícliques en un únic medi de reacció</i>	35	Neus Santiago i Domínguez; Paul Lloyd-Williams; Jordi García <i>Síntesi de lligands per complexar amb ions metàl·lics. Estudi dels complexos resultants</i>	40		

Determinació de glicans biomarcadors de càncer per MALDI-MS i CapZIC-ESI-MS

Eduardo Antoñanzas; Estela Giménez; Victòria Sanz

Departament d'Enginyeria Química i Química Analítica. Secció de Química Analítica

Comissió de Dinamització Lingüística

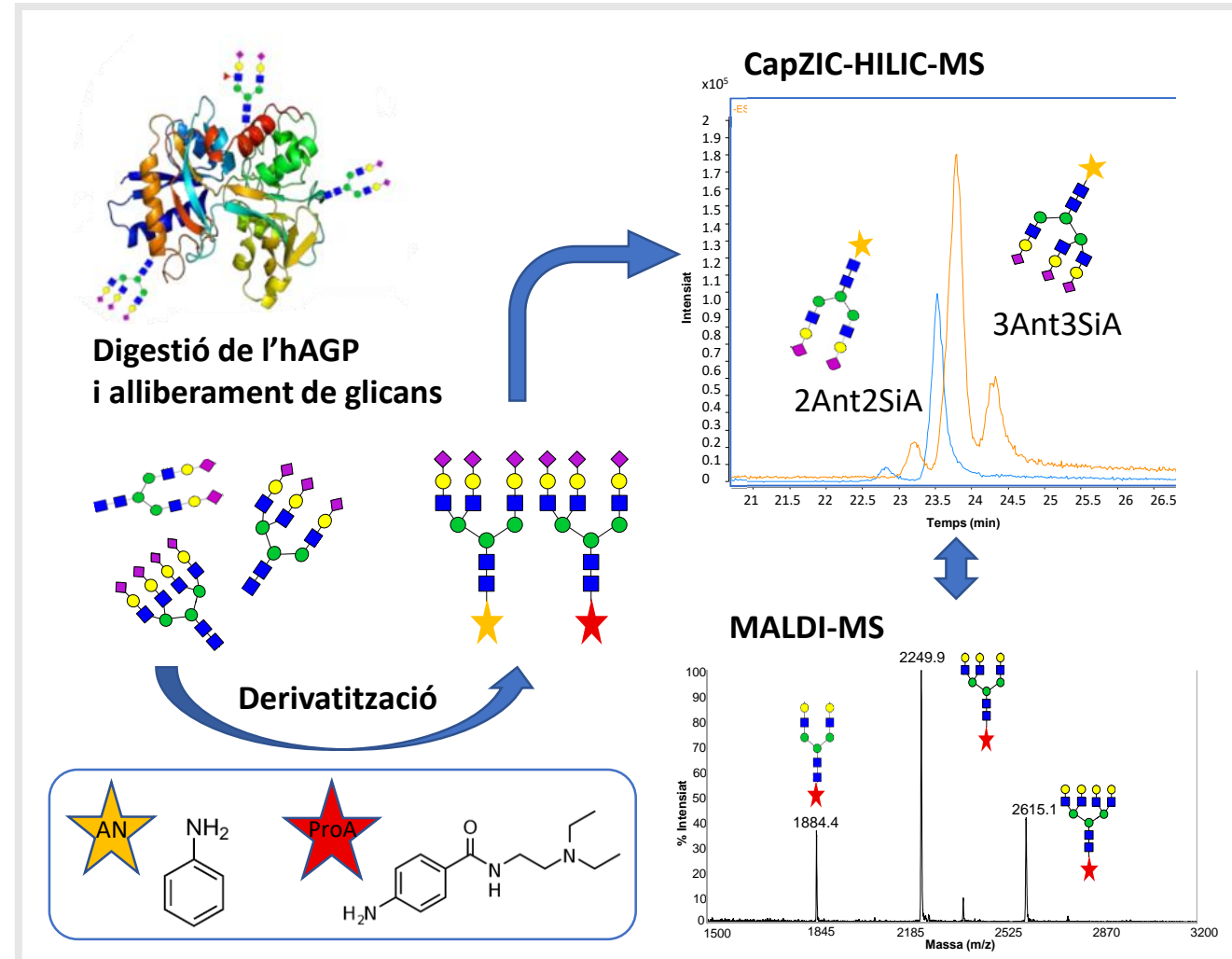


Facultat de Química



Les glicoproteïnes contenen oligosacàrids, anomenats *glicans*, units covalentment a certs residus de la cadena peptídica. Els glicans tenen un paper fonamental en molts processos biològics i també poden alterar-se en presència d'algunes patologies. Així, s'han descrit alteracions dels glicans de l'alfa-1-glicoproteïna humana (hAGP) en malalties com ara la pancreatitis crònica i el càncer de pàncrees (PDAC).

L'objectiu d'aquest treball ha estat analitzar els glicans de l'hAGP per MALDI-MS i CapZIC-HILIC-MS, un cop alliberats de la glicoproteïna intacta mitjançant la digestió enzimàtica i derivatitzats amb anilina (AN) i procaïnàmid (ProA). La comparació dels resultats obtinguts ha demostrat que la derivatització amb procaïnàmid ofereix una millor sensibilitat. El mètode establert combinat amb una estratègia de marcatge isotòpic permetrà, en un futur, caracteritzar i quantificar de manera relativa els glicans de l'hAGP en sèrums de pacients amb PDAC i grups control i, així, confirmar el potencial d'aquesta glicoproteïna com a biomarcadora de càncer de pàncrees.



La relació entre la composició de les pintures murals i el tipus de vil·la en diferents jaciments romans de Catalunya

Comissió de Dinamització Lingüística

UNIVERSITAT DE
BARCELONA
Facultat de Química

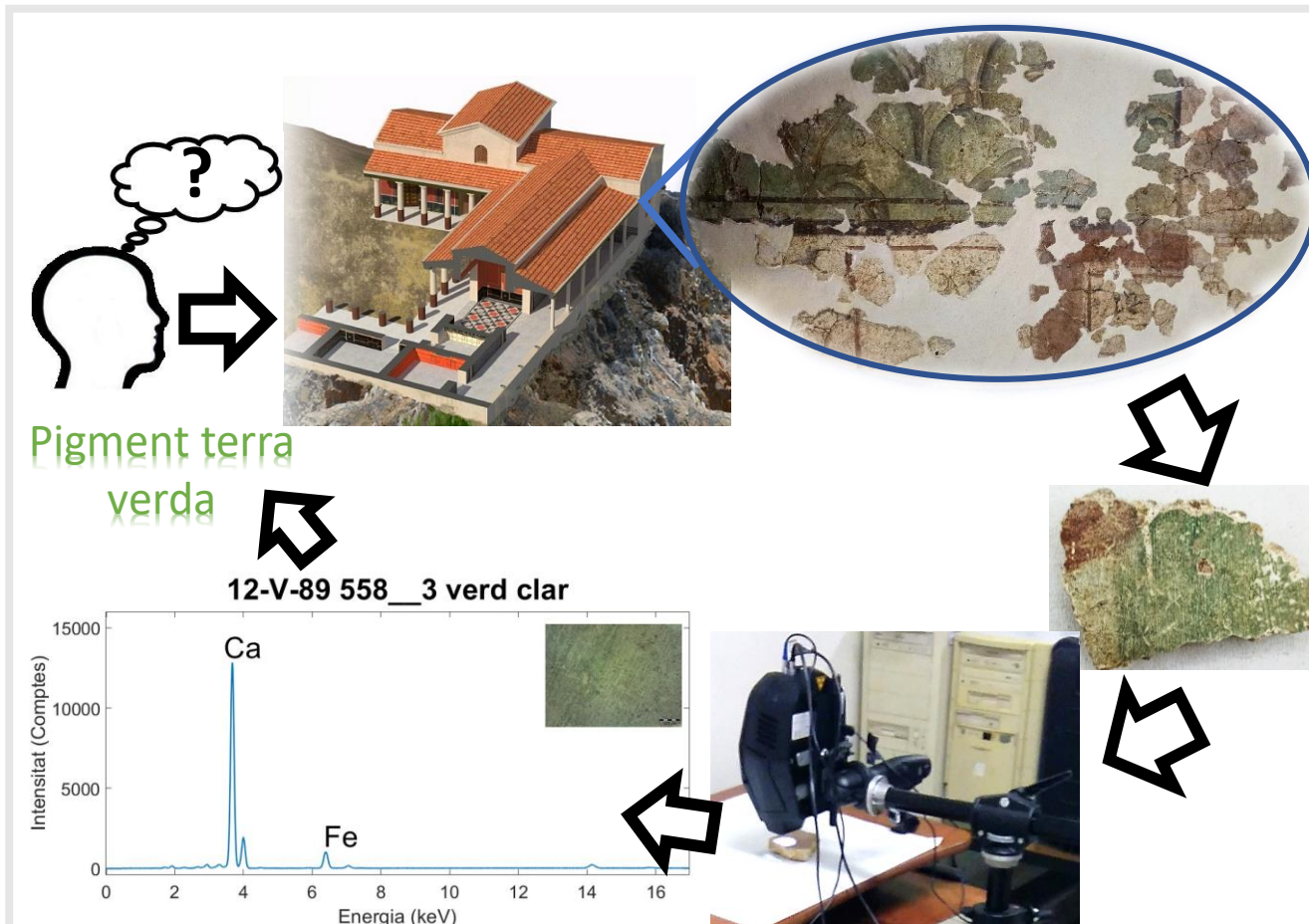


Iris Ayas; Georgios Magkanas; Jose F. García

¹ Departament d'Enginyeria Química i Química Analítica. Secció de Química Analítica

Les restes arqueològiques són testimonis de les activitats desenvolupades per les societats que les generen. L'imperi romà va establir-se a diferents indrets de la Mediterrània, entre ells Catalunya. Un element d'aquests establiments eren les vil·les, que tenien estructures diferents en funció del seu ús: marítimes, suburbanes i rústiques. L'objectiu d'aquest estudi és determinar la composició de les pintures murals de diferents vil·les representatives de la regió de Girona. Les vil·les són les següents: Collet de Calonge i Ametllers (vil·les marítimes), Pla de l'Horta i Tolegassos (vil·les suburbanes), Can Ring i Vilauba (vil·les rústiques) i Mas Gusó (emplaçament militar).

Per a l'anàlisi s'ha emprat una tècnica elemental i no destructiva: la fluorescència de raigs X. S'han analitzat diferents mostres representatives dels diferents colors; els principals pigments identificats han estat terres vermelles i terres verdes. Mitjançant aquests resultats s'avaluarà la relació entre la paleta de colors i les diferents activitats econòmiques de les vil·les.



Referències

[1] Lluís Palahí, Marc Prat. *Memòria arqueològica de la vil·la romana del Collet*, 2017, 99.

Recuperació de nitrogen amoniacal en purins de porc utilitzant una membrana permeable al gas

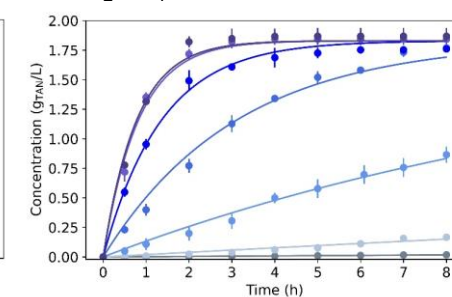
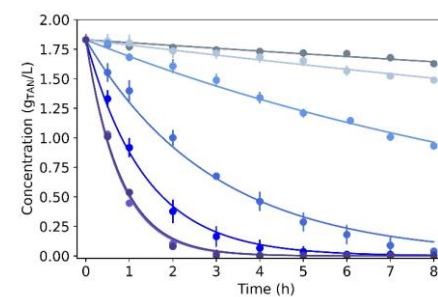
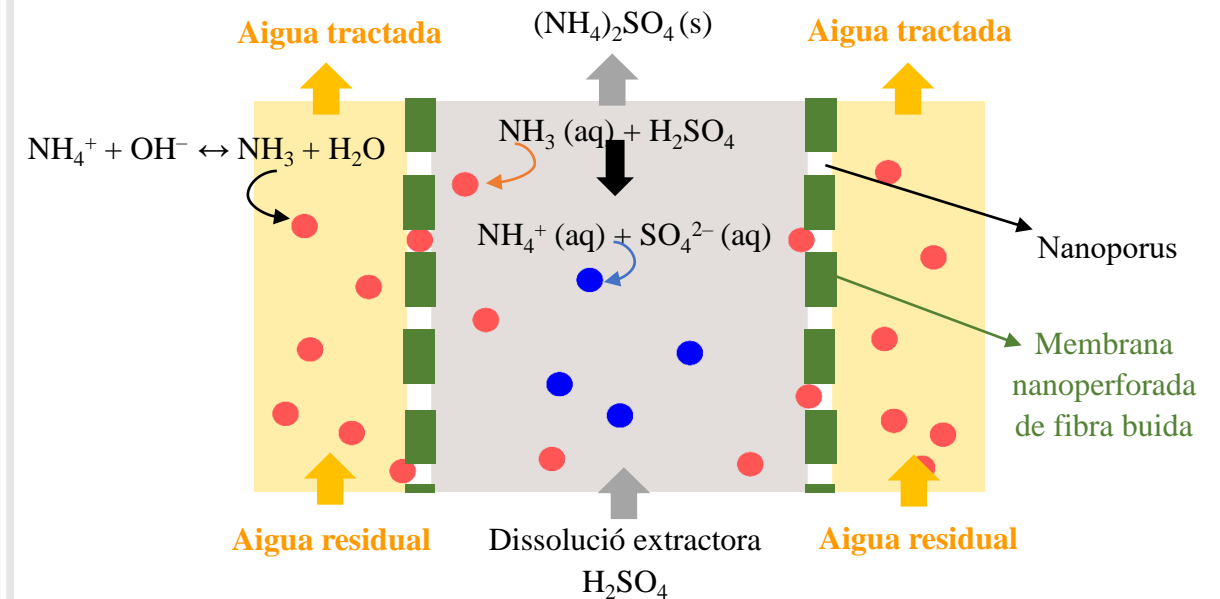


Yasmina Ben Hammou Abboud;¹ Andreu Serra-Toro;¹ Sergi Astals;¹ Francesc Mas;² Joan Dosta¹

¹ Departament d'Enginyeria Química i Química Analítica. Secció d'Enginyeria Química

² Departament de Ciència de Materials i Química Física. Secció de Química Física

El nitrogen amoniacal present a les dejeccions ramaderes representa un recurs valuós que es pot recuperar per generar fertilitzants mitjançant la utilització de membranes hidrofòbiques, les quals han guanyat un interès creixent per la seva eficàcia i el seu baix cost. En aquest estudi, s'ha analitzat el funcionament d'una membrana de fibra buida permeable a l'amoníac per recuperar el nitrogen present en una dissolució sintètica i en purí filtrat. El seu principi de funcionament es basa en la transferència d'amoníac (NH_3) des de l'aigua a tractar cap a una dissolució extractora àcida gràcies a la diferència de concentracions d'amoníac, afavorida pel control de pH. Per als experiments amb aliment sintètic a valors de pH superiors a 9, es va recuperar més del 98 % d'amoníac (1,8 g N/L) en 8 h a 25 °C (volums iguals d'aliment i dissolució extractora). Per als assaigs amb purí es van obtenir recuperacions superiors al 99 %, amb un volum de dissolució extractora deu vegades inferior a la d'aliment i sota les condicions mencionades prèviament.



Addicions de Michael directes, catalítiques i enantioselectives sobre aldehyds α,β -insaturats



Gabriela Benedito; Oriol Galeote; Pedro Romea; Fèlix Urpí

Departament de Química Inorgànica i Orgànica. Secció de Química Orgànica

Les reaccions de formació d'enllaços C—C enantioselectives són clau en la síntesi orgànica [1]. Per això, transformacions clàssiques com la reacció aldòlica o de Michael continuen a l'avantguarda dels mètodes sintètics. No obstant, degut al fet que l'abast de moltes d'elles és escàs, és imprescindible la recerca contínua de nous mètodes més eficients i sostenibles [2].

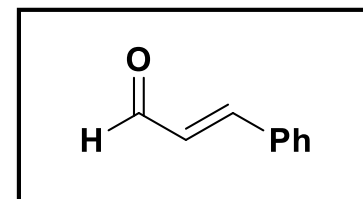
En aquest context, es coneixen ben pocs exemples d'addicions de Michael d'enolats metàl·lics sobre aldehyds α,β -insaturats. Ara bé, el nostre grup va identificar recentment que reaccions d'*N*-propanoil-1,3-tiazinona-2-tiona amb aldehyds α,β -insaturats donen lloc a les configuracions anti i sin amb enantioselectivitat elevada en funció del catalitzador quiral de Ni(II) emprat.

En el present treball intentem avaluar l'impacte en aquesta reacció del grup R en α en el grup acil.

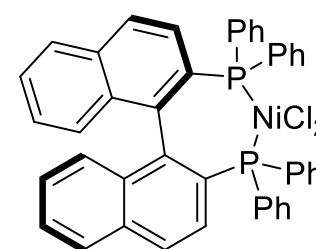
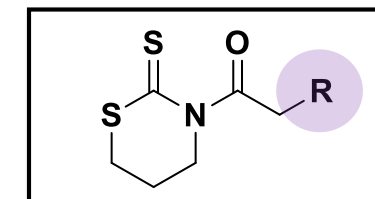
Referències

[1] E. M. Carreira, L. Kvaerno. *Classics in Stereoselective Synthesis*, Wiley-VCH, Weinheim, 2009.

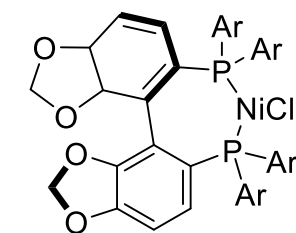
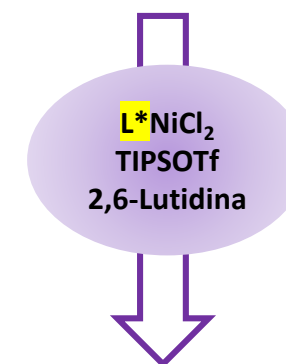
[2] P. J. Walsh, M. C. Kozlowski. *Fundamentals of Asymmetric Synthesis*, University Science Books, Sausalito, 2009.



+

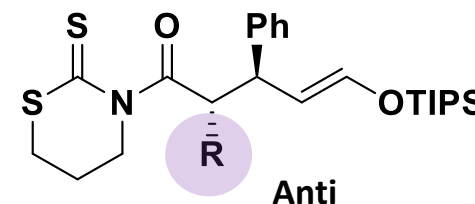


[(R)-BINAP] NiCl₂

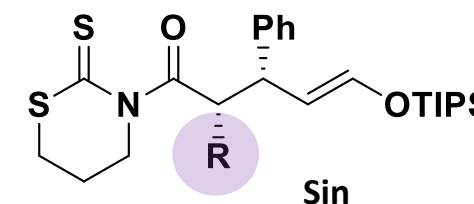


[(R)-DTBM-SEGPHOS] NiCl₂

Ar = 3,5-^tBu₂-4-MeOPh



Anti



Sin

Síntesi de fragments de l'amfidinolida B₂

Mar Canal Bigard;¹ Anna Maria Costa Arnau;² Jaume Vilarrasa Llorens¹

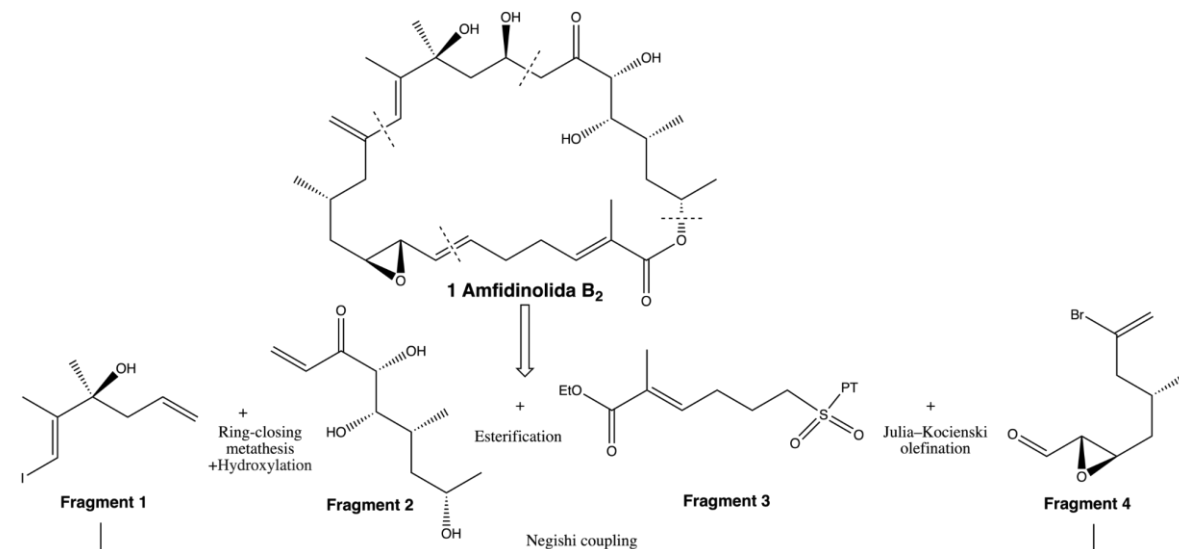
¹ Departament de Química Inorgànica i Orgànica. Secció de Química Orgànica

² Departament de Química Inorgànica i Orgànica. Secció de Química Inorgànica

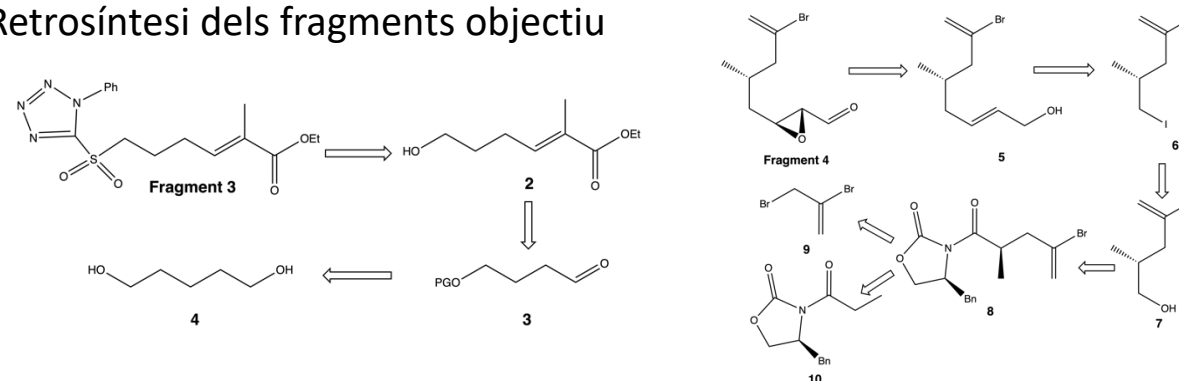


Els químics orgànics sintètics estan molt interessats en els microorganismes marins, ja que molts d'aquests microorganismes produeixen metabòlits bioactius que poden ser el punt de partida per al desenvolupament de fàrmacs per al tractament de malalties com el càncer. En aquest cas concret, el treball se centrarà en la síntesi de l'amfidinolida B₂, un macròlid citotòxic que es va aïllar del dinoflagel·lat *Amphidinium* sp. a Okinawa, una illa de l'oceà Pacífic, i que presenta activitat citotòxica contra diverses línies tumorals, per exemple de leucèmia.

Per poder dur a terme la síntesi d'aquest macròlid de 26 membres, en el nostre grup de recerca s'ha proposat una retrosíntesi que divideix la molècula en quatre fragments. L'objectiu d'aquest treball és la síntesi de dos dels quatre fragments de l'amfidinolida B₂, el fragment 3 i 4, i avaluar reaccions o rutes alternatives que podrien fer més eficient la síntesi total del macròlid.



Retrosíntesi dels fragments objectiu



Disseny i síntesi de rotors BODIPY com a mecanosensors elastomèrics

Mònica Canal; Pedro Güixens; Jaume Garcia; Dolors Velasco

Departament de Química Inorgànica i Orgànica. Secció de Química Orgànica

Comissió de Dinamització Lingüística

UNIVERSITAT DE
BARCELONA
Facultat de Química

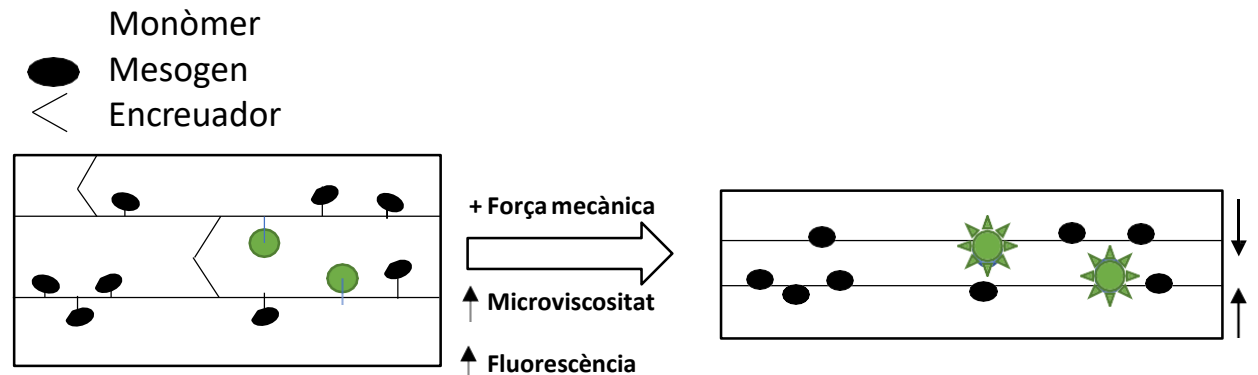
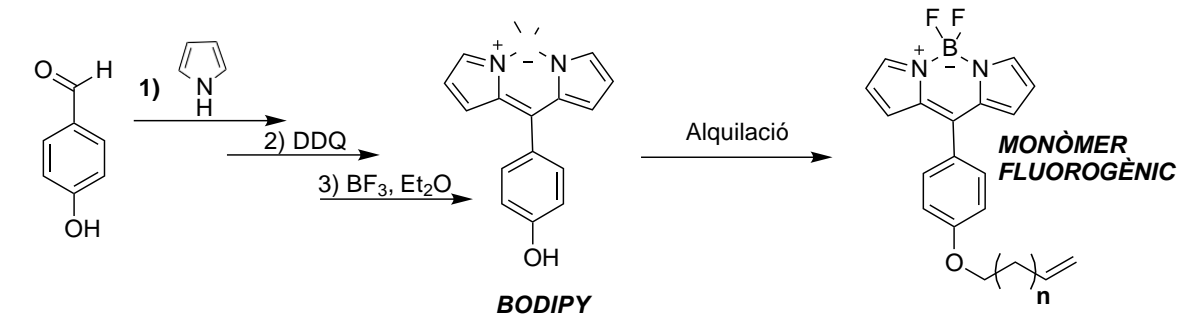


El BODIPY (borodipirrolometè) forma part d'una família de fluoròfors amb propietats fisicoquímiques molt versàtils, generalment caracteritzats per ser robustos tant fotoquímicament com tèrmicament.

Els derivats *meso*-aril-BODIPY presenten una dependència del rendiment quàntic positiu en augmentar la microviscositat [1].

En aquest treball es presenta la síntesi d'un monòmer aril-BODIPY que conté una cadena alifàtica amb un alquè terminal. Aquest monòmer fluorogènic s'enllaçarà posteriorment a un elastòmer líquid cristal·lí monodomini (LSCE, *líquid single-crystal elastomer*).

Sobre els LSCE s'aplicaran forces mecàniques per analitzar la dependència de la fluorescència del material en funció de l'anisotropia induïda mecànicament. Els LSCE són uns nous materials amb un comportament mecanosensor atractiu per a la futura indústria tecnològica.



Referències

[1] W. Miao, C. Yu, E. Hao, L. Jiao (2019), Functionalized BODIPYs as Fluorescent Molecular Rotors for Viscosity Detection, *Front. Chem.* 7:825. doi: 10.3389/fchem.2019.00825

Variació de la retenció cromatogràfica amb el pH de la fase mòbil en cromatografia de líquids d'interacció hidròfila (HILIC)

Comissió de Dinamització Lingüística

UNIVERSITAT DE BARCELONA
Facultat de Química



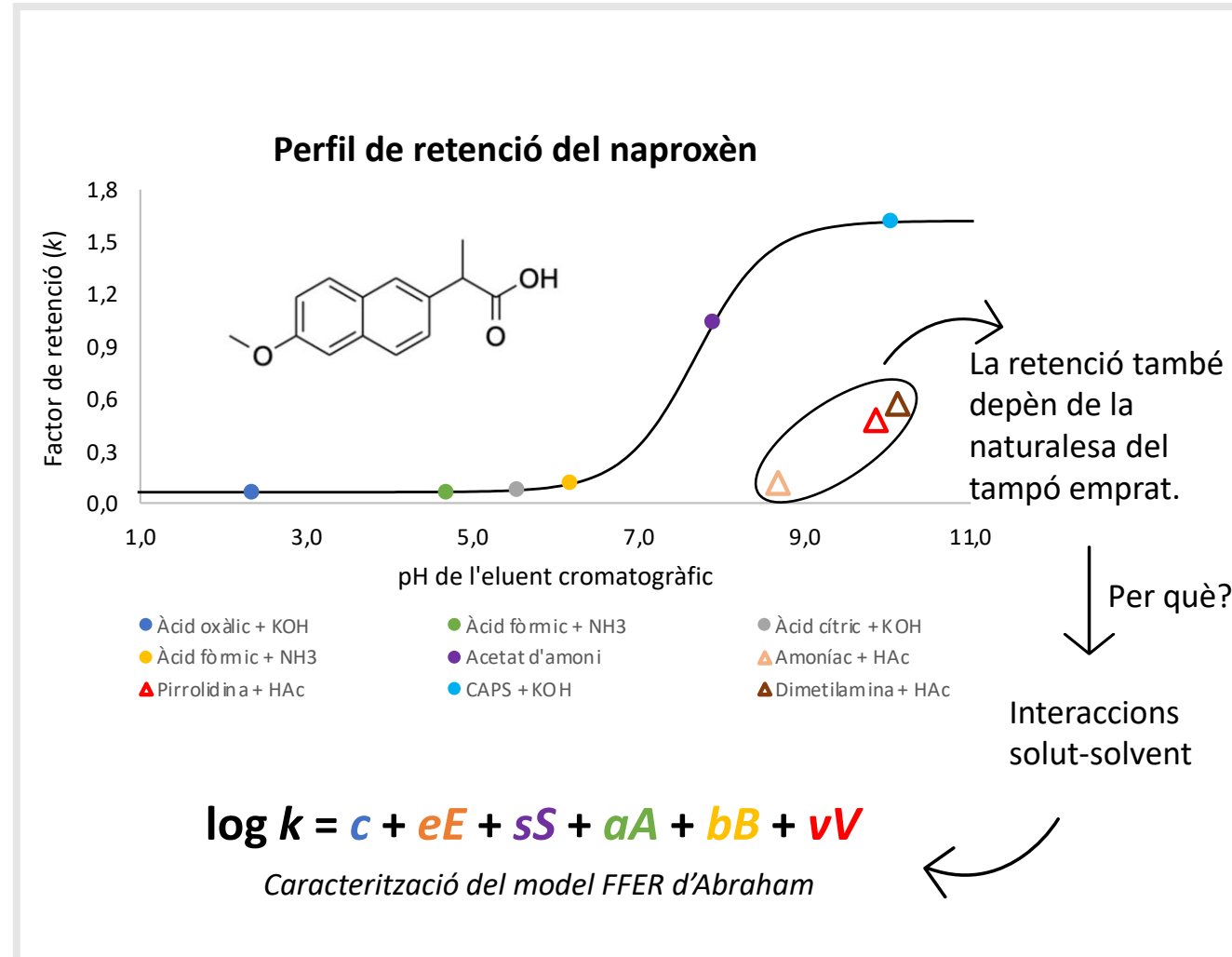
Laura Casanovas; Xavier Subirats; Martí Rosés

Departament d'Enginyeria Química i Química Analítica. Secció de Química Analítica

La cromatografia líquida d'interacció hidròfila (HILIC) està prenent protagonisme en l'anàlisi biomèdica, ambiental i farmacèutica gràcies a la seva major capacitat de separació de compostos ionitzables i polars d'interès biològic.

En cromatografia de fase invertida, està ben modelada la variació de la retenció cromatogràfica en funció del pH de la fase mòbil, que és pràcticament independent de la naturalesa de les espècies amortidores del pH. En HILIC, però, es poden establir interaccions específiques entre els anàlits, el tampó i la fase enllaçada que donin lloc a diferents temps de retenció per a un mateix valor de pH de la fase mòbil depenent del tampó.

L'objectiu d'aquest treball és la caracterització de la retenció cromatogràfica per una columna HILIC de fase enllaçada zwitteriònica en un interval ampli de valors de pH mitjançant el model de relacions lineals d'energia lliure proposat per Abraham, utilitzant substàncies amb diferents propietats àcid/base i diversos sistemes amortidors del pH.



Síntesi de decahidroquinolines enantiopures amb un estereocentre quaternari a la posició C-4a



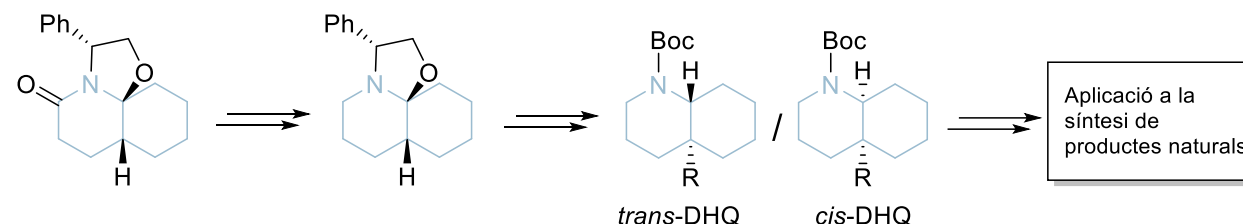
Eisuke Comas; Arnau Calbó; Rosa Griera; Mercedes Amat

Departament Farmacologia, Toxicologia i Química Terapèutica. Facultat de Farmàcia i Ciències de l'Alimentació

Des de l'antiguitat, els productes naturals han estat la principal font de molts principis actius. La química d'aquestes substàncies és important a causa de la seva presència en molts camps, per exemple, la farmacologia, on la investigació de productes naturals en possibles components bioactius podria conduir al desenvolupament comercial en compostos principals de cara a la producció de fàrmacs.

Els inconvenients d'aquests productes són l'accés, el cost o l'extinció de diferents espècies. Com a conseqüència, aquest tipus de recursos són inviables avui dia, per la qual cosa la solució que s'està duent a terme consisteix a sintetitzar aquells productes naturals, o apropar-se a derivats mitjançant procediments sintètics.

L'objectiu principal d'aquest treball és fer un estudi metodològic sobre la substitució en la posició C-4a en una amina tricíclica amb diferents tipus d'electròfils amb què s'obtenen intermedis avançats de manera enantiopura en la síntesi d'alcaloides tipus fawcettimina [1].



Electròfils (R)	Productes		
	Metil Vinil Cetona	Fenil Vinil Sulfona	Para-Formaldehid
Trans			
Cis			

Referències

[1] Pan, G.; Williams, R. M., *J. Org. Chem.*, **2012**, 77, 4801-4811.

Síntesi d'indolocarbazoles substituïts mitjançant reaccions multicomponent



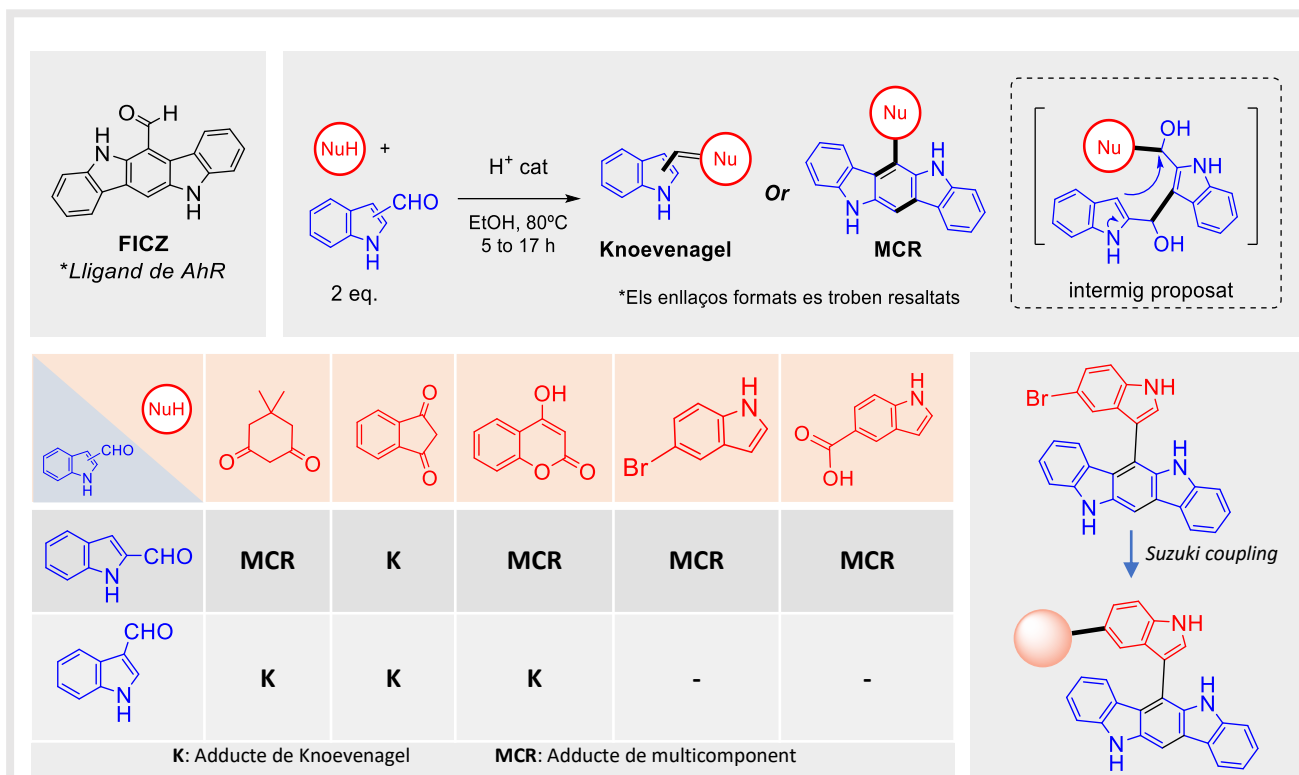
Alejandro Díaz Moreno; Marina Pedrola; Ouldouz Ghashghaei; Rodolfo Lavilla Grífols

Laboratori de Química Farmacèutica. Facultat de Farmàcia

El compost FICZ és un important lligand d'*aryl hydrocarbon receptor* (AhR) amb una síntesi complexa que en dificulta l'estudi [1]. L'objectiu d'aquest treball és aprofitar els descobriments del grup [2] en els quals s'obtenen indolocarbazoles substituïts en una única reacció per augmentar la disponibilitat química d'aquests compostos.

Per aconseguir aquest objectiu, es van fer reaccionar un seguit de nucleòfils en les condicions en què s'aconsegueix el producte multicomponent. S'han definit alguns casos en què s'obté el producte desitjat i d'altres que donen l'adducte de Knoevenagel, el producte d'una deshidratació prematura. A més, els nucleòfils reversibles poden eliminar-se, de manera que donen lloc a productes complexos de tipus polimèric.

Per acabar, un dels productes bromats va ser l'objectiu d'estudi de reaccions d'acoblament catalitzades per metalls de transició per determinar si la incorporació d'aquests nous *building blocks* dona lloc a *hits* modificats amb activitats biològiques millorades enfront de l'AhR.



Referències

- [1] C. Zhang, K. L. Creech, W. J. Zuercher, T. M. Willson, *Sci. Rep.*, **2019**, 9(1), 1.
 [2] O. Ghashghaei, M. Pedrola, F. Seghetti, V. V. Martin, R. Zavarce, M. Babiak, J. Novacek, F. Hartung, K. M. Rolfes, T. Haarmann-Stemmann, R. Lavilla, *Angew. Chem.*, **2020**, 133(5), 2635.

D'espectre IR a estructura molecular: aprenentatge automàtic aplicat a silicats

Andreu A. de Donato Pérez; Stefan T. Bromley

Departament de Ciència de Materials i Química Física. Secció de Química Física

Comissió de Dinamització Lingüística

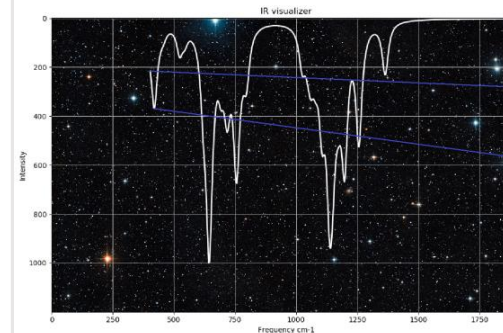
UNIVERSITAT DE
BARCELONA
Facultat de Química



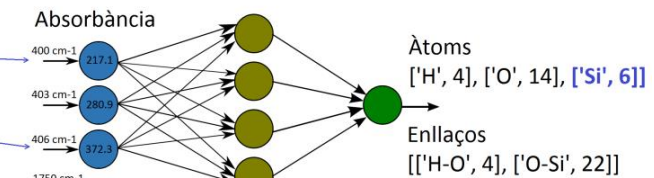
Els silicats constitueixen la major part dels components sòlids de l'univers, presents tant en minerals terrestres com en la pols estel·lar. Els astrònoms estudien aquesta pols amb l'ajut de telescopis infrarojos com per exemple el Hubble i el recent James Webb Space.

L'espectre IR d'un determinat compost proporciona informació sobre els tipus d'enllaços i la seva simetria. En el cas dels nanoclústers de sílice hidroxilats, pràcticament només hi ha enllaços H—O i O—Si, a part de ser estructures amb grups puntuals de molt baixa simetria. Entrenant una xarxa neuronal (un mètode d'aprenentatge automàtic), és possible predir altres propietats estructurals, com el nombre i tipus d'àtoms o el grau d'hidroxilació dels silicats, i també com s'enllacen entre ells. Amb aquesta informació es construeixen grafos: una representació matemàtica de les molècules, formats per nodes (àtoms) i arestes (enllaços). Mitjançant un algoritme [1] s'obté l'estructura molecular corresponent al graf.

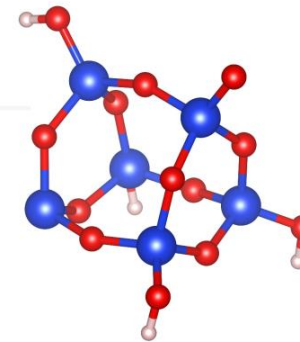
1. ESPECTRE IR



2. XARXA NEURONAL



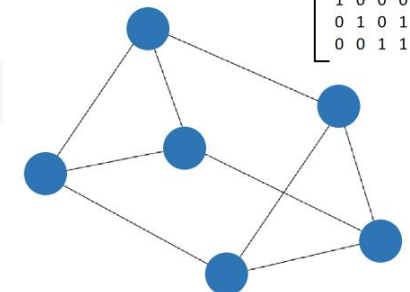
4. ESTRUCTURA MOLECULAR



Potencial de Buckingham

$$\Phi_{12}(r) = A \exp(-Br) - \frac{C}{r^6}$$

3. GRAF



Referències

[1] E. Flikkema, Stefan T. Bromley, *Phys. Rev. B*, **2009**, *80*, 035402.

Alquilació al·lílica asimètrica de fluorurs de Morita-Baylis-Hillman amb èters silícics d'enol catalitzada per una base de Lewis quirals

Jordi Duran Riu; Xavier Companyó

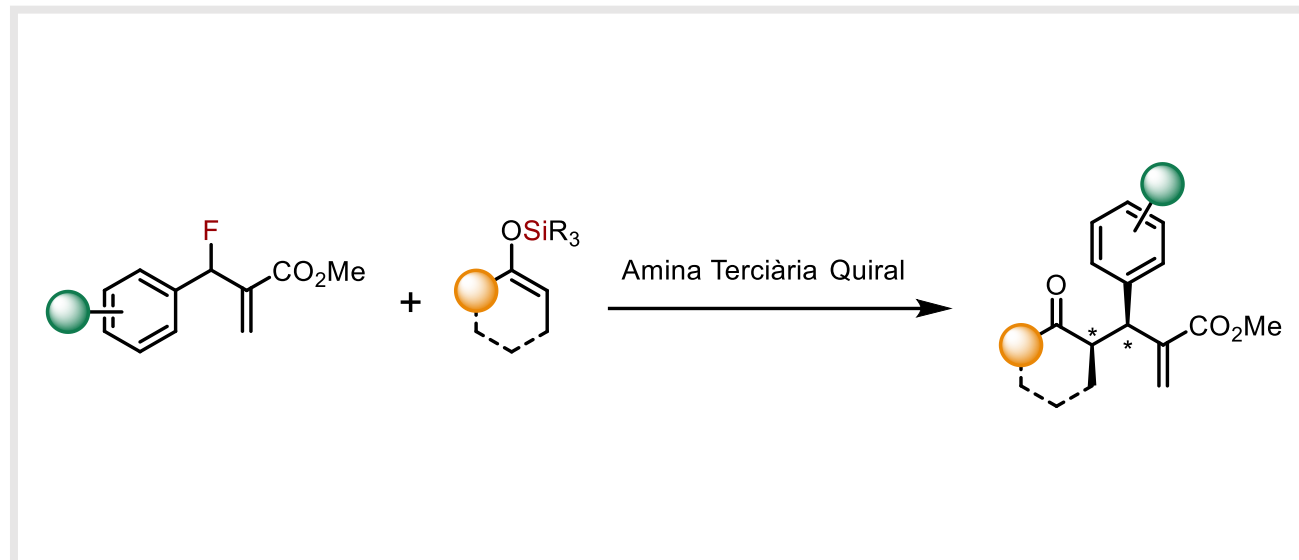
Departament de Química Inorgànica i Orgànica, Secció de Química Orgànica

Comissió de Dinamització Lingüística

UNIVERSITAT DE
BARCELONA
Facultat de Química



Les alquilacions al·líliques asimètriques (AAA) són una eina molt potent per a la formació estereoselectiva de nous enllaços C—C. En els darrers anys, els carbonats i acetats de Morita-Baylis-Hillman (MBH) han estat àmpliament emprats en AAA organocatalítiques [1]. No obstant, la reactivitat dels fluorurs d'MBH ha estat molt menys estudiada. L'objectiu principal d'aquest treball final de màster és desenvolupar una nova reacció d'AAA entre fluorurs d'MBH i èters silícics d'enol catalitzada per una base de Lewis quirals i basada en una reacció de defluorinació [2]. La formació intermolecular d'una interacció Si-F possibilita l'activació catalítica de l'enllaç C—F i alhora governa la diastereoselectivitat de la formació del nou enllaç C—C.



Referències

- [1] X. Companyó, A. Calcatelli, A. Cherubini-Celli, E. Carletti, Unconventional Transformations of Morita-Baylis-Hillman Adducts, *Synthesis*, **2020**.
- [2] A. Hazari, V. Gouverneur, J. M. Brown, Palladium-Catalyzed Substitution of Allylic Fluorides. *Angewandte Chemie International Edition*, **2009**, 48 (7), 1296-1299.

Síntesi del nucli benzohomoadamantà per al disseny, la síntesi i l'avaluació farmacològica de nous inhibidors de l'epòxid hidrolasa soluble (sEHI)

Celia Escriche; Sandra Codony; Santiago Vázquez

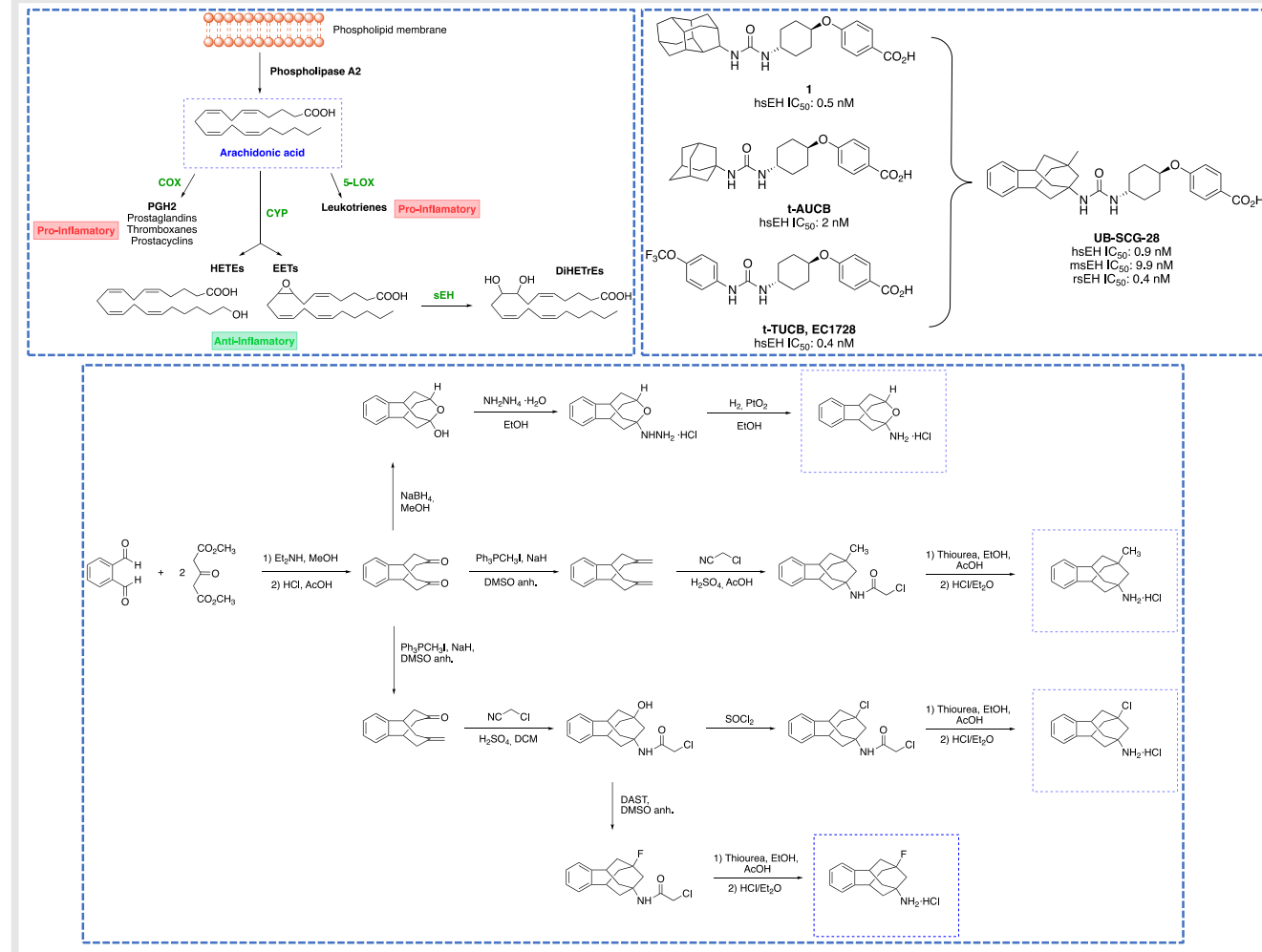
Laboratori de Química Farmacèutica, Facultat de Farmàcia i Ciències de l'Alimentació i IBUB

Comissió de Dinamització Lingüística

UNIVERSITAT DE BARCELONA
Facultat de Química



Els àcids epoxieicosatrienoics (EETs) són mediadors químics derivats de l'àcid araquidònic que presenten efectes antiinflamatoris, antihipertensius, analgèsics i antinociceptius. L'epòxid hidrolasa soluble (sEH) metabolitza els EETs alterant-ne els efectes beneficiosos i, per tant, s'ha proposat que la seva inhibició pot tenir efectes terapèutics en diverses malalties. Com que el centre catalític de la sEH té caràcter lipofílic, s'han desenvolupat diversos inhibidors de la sEH (sEHI) basats en el nucli adamantà i benzè, que compleixen aquests requisits (t-AUCB i t-TUCB). El grup del Dr. Santiago Vázquez ha estudiat l'afinitat de diferents nuclis, com ara el diamantà i el benzohomoadamantà; aquest últim és el més prometedor. Amb l'objectiu de millorar la solubilitat i les propietats farmacocinètiques dels compostos ja descrits, s'ha sintetitzat i avaluat una nova família de sEHIs amb el nucli benzohomodiamantà, cosa que ha donat bons resultats en models *in vivo*. En el present treball s'han sintetitzat nuclis benzohomoadamantànics per continuar estudiant aquesta família de sEHI.



Desenvolupament d'una PSresin per a mesures ràpides de ^{210}Pb en aigua de consum

Sara Espinosa; Alex Tarancón; Héctor Bagán

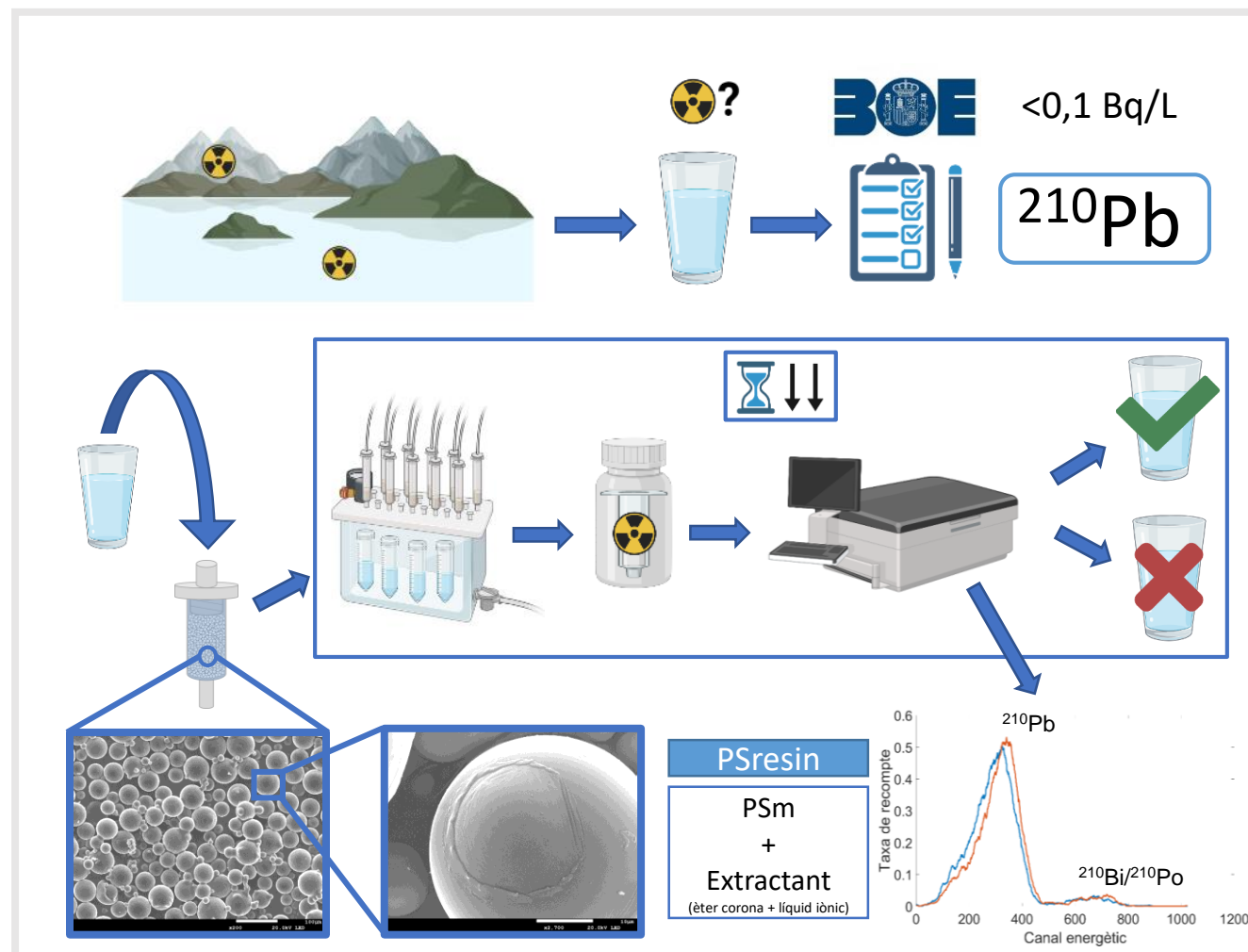
Departament d'Enginyeria Química i Química Analítica. Secció de Química Analítica

Comissió de Dinamització Lingüística

UNIVERSITAT DE
BARCELONA
Facultat de Química



El ^{210}Pb és un isòtop radioactiu d'origen natural membre de la cadena de desintegració del ^{238}U , potencialment present a l'aigua que consumim. Això el converteix en un isòtop d'interès per a la protecció radiològica. Utilitzant resines d'escintil·lació plàstica (PSresin) es pot dur a terme la seva anàlisi de manera més eficient, reduint el temps, els materials i els residus generats durant el procés. En aquest treball s'ha desenvolupat una nova PSresin i se n'han avaluat diferents suports, proporcions d'extractant, mètodes d'immobilització i medis de separació per obtenir les condicions òptimes i aconseguir una retenció elevada de ^{210}Pb , amb una separació completa dels seus descendents, ^{210}Bi i ^{210}Po . S'han definit com a condicions òptimes de preparació de les PSresin una proporció 10:1,1 PSm:extractant, immobilitzat en redissolucions successives. En un medi de separació de HNO_3 1M s'ha assolit un 95(1) % de retenció i 85(2) % d'eficiència de detecció sense la presència d'interferents.



Desenvolupament d'un mètode per a la quantificació de coeficients de distribució sòlid-líquid de poloni en sòls

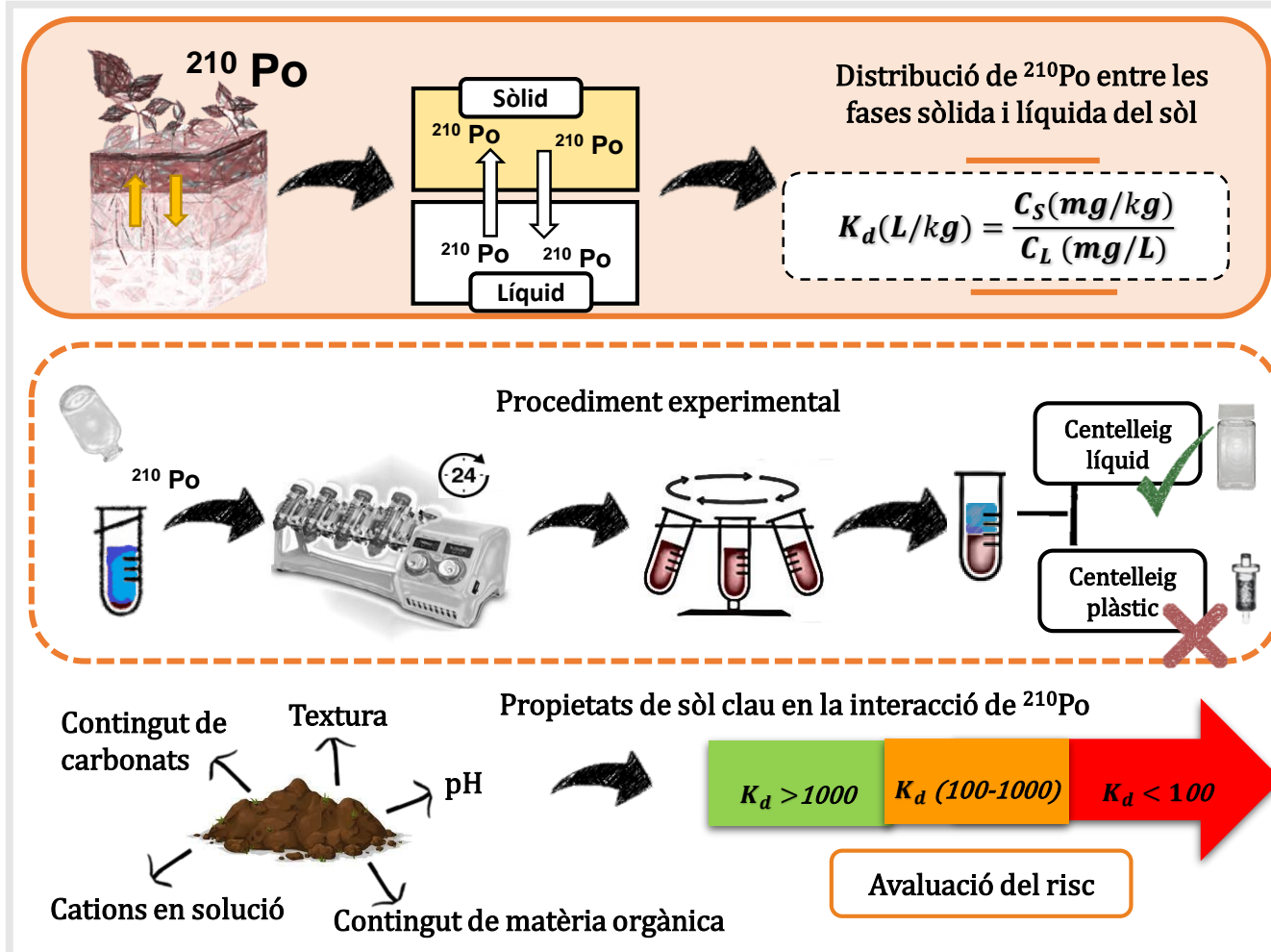


Sheila Flores Corts; Alex Tarancón; Anna Rigol

Departament d'Enginyeria Química i Química Analítica. Secció de Química Analítica

Els materials derivats de les pràctiques industrials que impliquen l'explotació de sòls que contenen radionúclids d'origen natural (*naturally occurring radionuclide materials*, NORM), poden suposar un risc per a la salut humana i els ecosistemes. Els radionúclids que s'alliberen provenen majoritàriament de la cadena de desintegració de l'urani i és important conèixer-ne la interacció amb el sòl, a partir del coeficient de distribució sòlid-líquid (K_d).

En aquest treball s'han determinat valors de K_d de ^{210}Po en una col·lecció de sòls amb propietats edàfiques contrastades. En el mètode desenvolupat s'equilibra el sòl amb una solució de ^{210}Po d'activitat coneguda, es determina l'activitat de ^{210}Po en el sobrenedant resultant i es calcula el valor de K_d . Per a la mesura del ^{210}Po s'ha avaluat el centelleig plàstic i el centelleig líquid i el darrer és el més adequat. Finalment, s'han avaluat les propietats de sòl clau en la interacció de ^{210}Po en sòls.



Síntesi de compostos nitrogenats bioactius mitjançant catàlisi asimètrica



Clara García-Mateos;¹ Pep Rojo;¹ Antoni Riera;^{1,2} Xavier Verdaguer^{1,2}

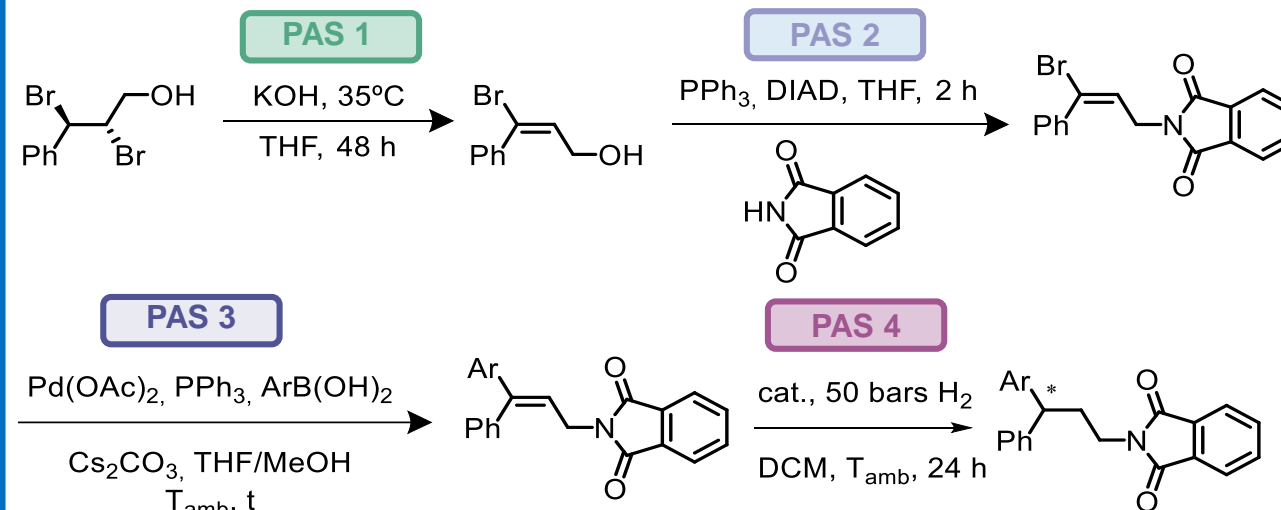
¹ Institut de Recerca Biomèdica (IRB Barcelona), Institut de Ciència i Tecnologia de Barcelona

² Departament de Química Inorgànica i Orgànica. Secció de Química Orgànica

La síntesi d'amines quirals és vital en el camp de la química orgànica, ja que són presents en un gran nombre de productes naturals i fàrmacs. Tanmateix, la seva obtenció enantioselectiva a partir de compostos proquirals continua sent un repte. Així doncs, l'estudi de la síntesi asimètrica d'amines enantiopures és objecte de gran interès.

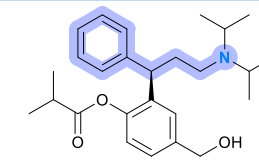
En aquest projecte s'ha desenvolupat una nova metodologia per a la síntesi enantioselectiva de 3,3-diaril propil amines quirals, que són una estructura present en molts fàrmacs. Aquesta nova síntesi permet preparar diversos compostos amb diferents grups aril, a partir d'una reacció de Suzuki que els uneix a un doble enllaç. Posteriorment, és reduït mitjançant hidrogenació asimètrica i proporciona un únic enantiòmer. D'aquesta manera s'han pogut sintetitzar fins a dotze substrats amb èxit, i la seva hidrogenació amb el catalitzador UbaPHOX està donant excessos enantiomèrics excel·lents.

Ruta sintètica

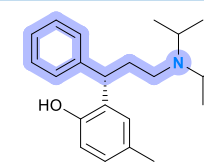


Aplicació

Síntesi de 3,3-diaril propil amines com a compostos bioactius



Fesoterodina



Tolterodina

Síntesi d'un lligand quiral per a la formació de metal·lohelicats

Javier González Díaz; Jordi García; Paul Lloyd-Williams

Departament de Química Inorgànica i Orgànica. Secció de Química Orgànica

Comissió de Dinamització Lingüística

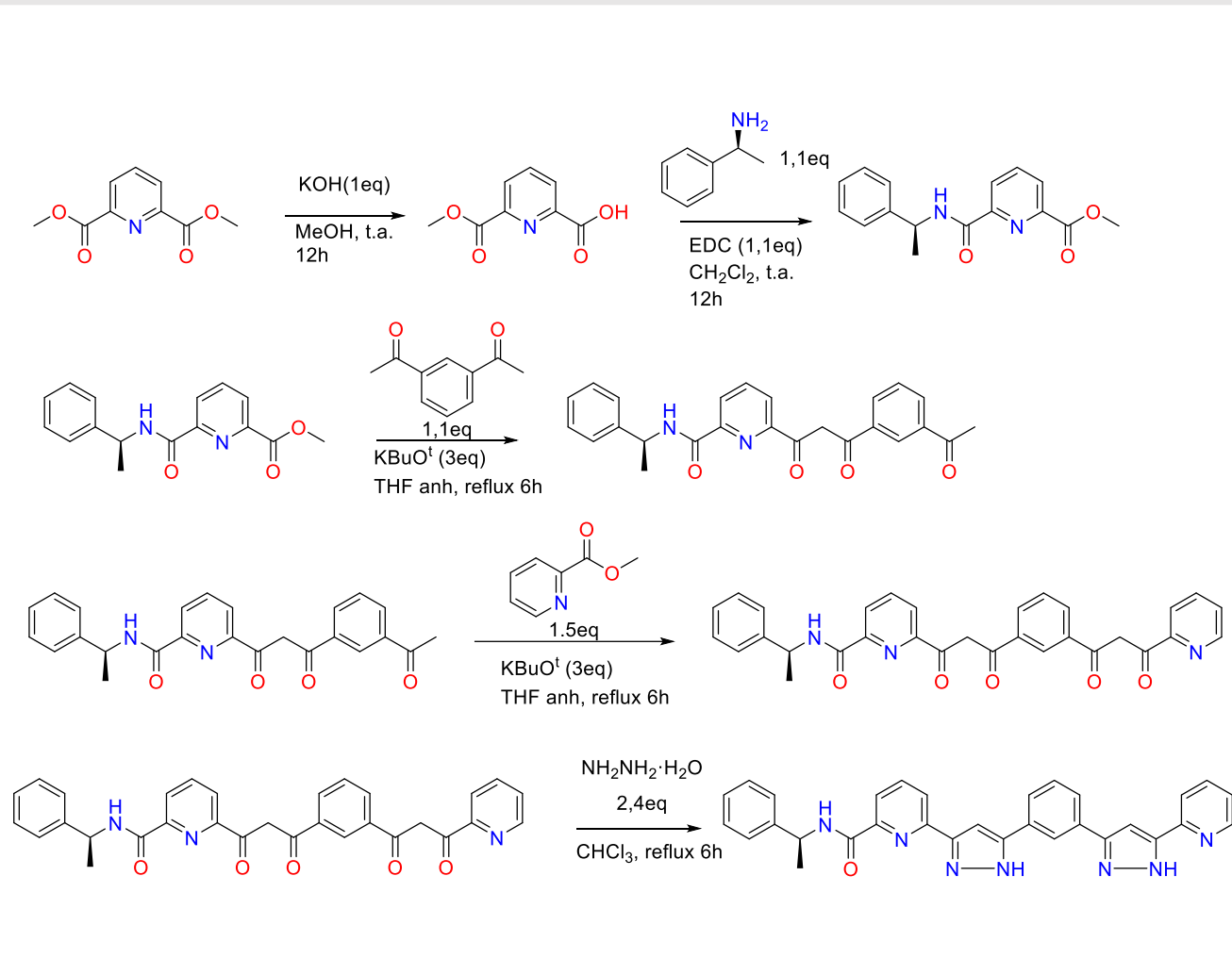
UNIVERSITAT DE
BARCELONA
Facultat de Química



Aquest treball descriu la síntesi per etapes i la caracterització d'un nou lligand tetradentat enantiomèricament pur d'estructura piridin-pirazòlica. Treballs previs del Grup de Magnetisme i Molècules Funcionals (GMMF) en el nostre departament ens fan confiar que el nou lligand es podrà coordinar a cations Fe(II) per formar estructures complexes d'helicats, tant en fase sòlida com en solució, amb propietats magnètiques interessants.

Així, aquests helicats metàl·lics poden experimentar el fenomen de transició d'espín (SCO) entre estats paramagnètics i diamagnètics. El canvi d'espín es pot induir amb estímuls externs, cosa que pot ser la base de potencials dispositius funcionals nanoscòpics.

La síntesi del lligand s'ha basat en dues condensacions de Claisen successives de l'1,3-diacetilbenzè amb dos 2-piridincarboxilats de metil diferents (un d'ells enantiomèricament pur). La condensació del compost pentacarbonílic resultant amb hidrat d'hidrazina va proporcionar el lligand buscat. Val a dir que els intents d'obtenir un lligand simètric anàleg per doble condensació amb el piridincarboxilat quiral han fracassat.



Autoassemblatge dissipatiu de materials supramoleculars porosos formats per gàbies metal·loorgàniques (MOCs)

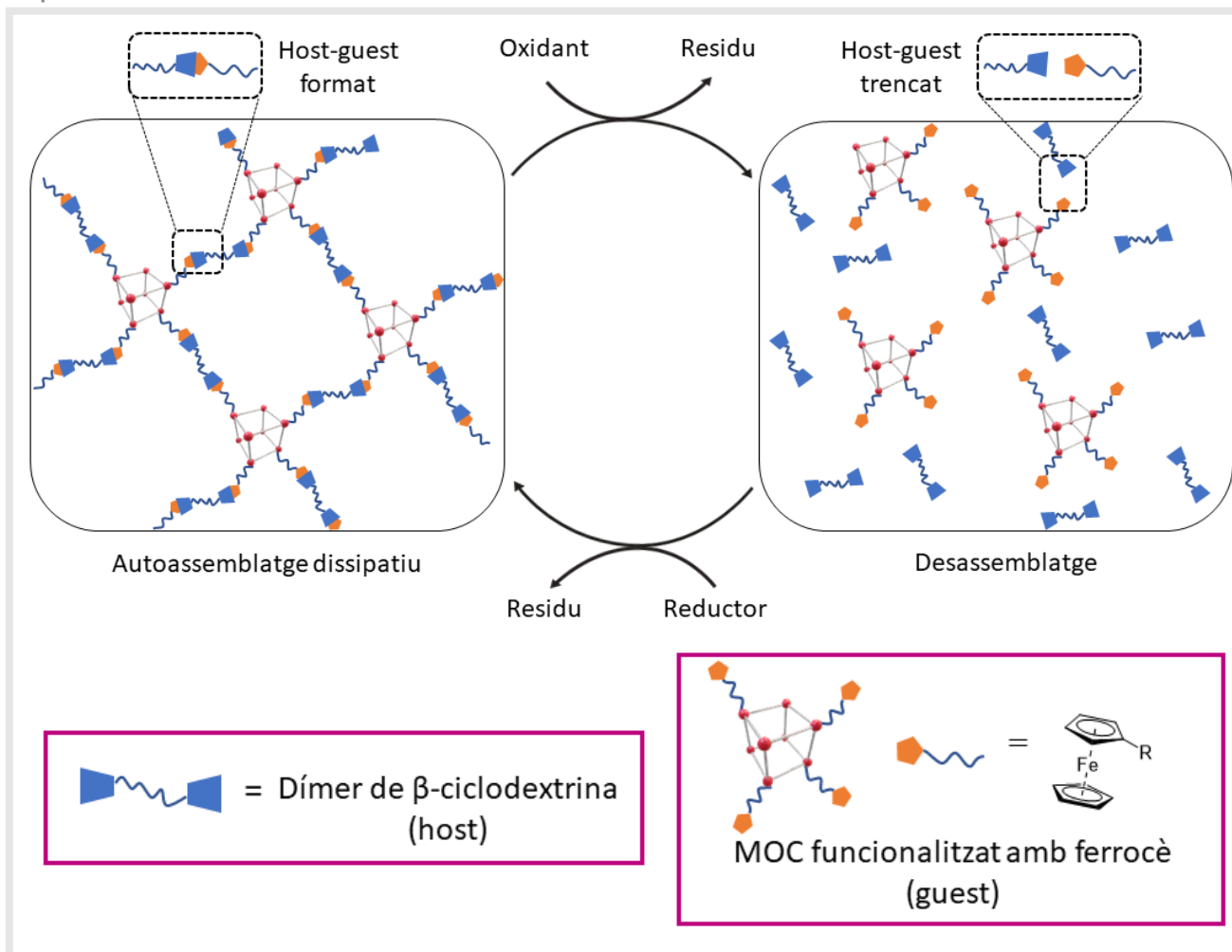


Lídia de Gregorio Perpiñá;¹ James D. Nicholas;² Alessandro Sorrenti¹

¹ Dept. de Química Inorgànica i Orgànica. Secció de Química Orgànica ² Dept. de Ciència de Materials i Química Física. Secció de Química Física

En els darrers anys hi ha hagut un interès important en la utilització de gàbies metal·loorgàniques (MOCs) com a blocs de construcció per a la preparació de materials tous porosos, mitjançant autoassemblatge jeràrquic. D'altra banda, els sistemes vius utilitzen l'autoassemblatge dissipatiu per mantenir les estructures i els materials supramoleculars allunyats de l'equilibri termodinàmic consumint, per exemple, combustibles químics.

L'objectiu d'aquest treball és estudiar la formació de materials supramoleculars porosos basats en interaccions amfitrió-hoste (*host-guest*) entre un MOC funcionalitzat amb ferrocè (hoste) i un dímer de β -ciclodextrina (amfitrió ditòpic). Aquestes interaccions, i, per tant, l'autoassemblatge es poden controlar mitjançant processos redox utilitzant reductors i oxidants com a combustibles químics. Per aconseguir aquest objectiu, han sigut necessàries diverses etapes sintètiques, tant per obtenir la gàbia com el dímer de β -ciclodextrina. A més, es van estudiar diferents oxidants i reductors com a possibles combustibles químics, i es van dur a terme estudis d'autoassemblatge dissipatiu.



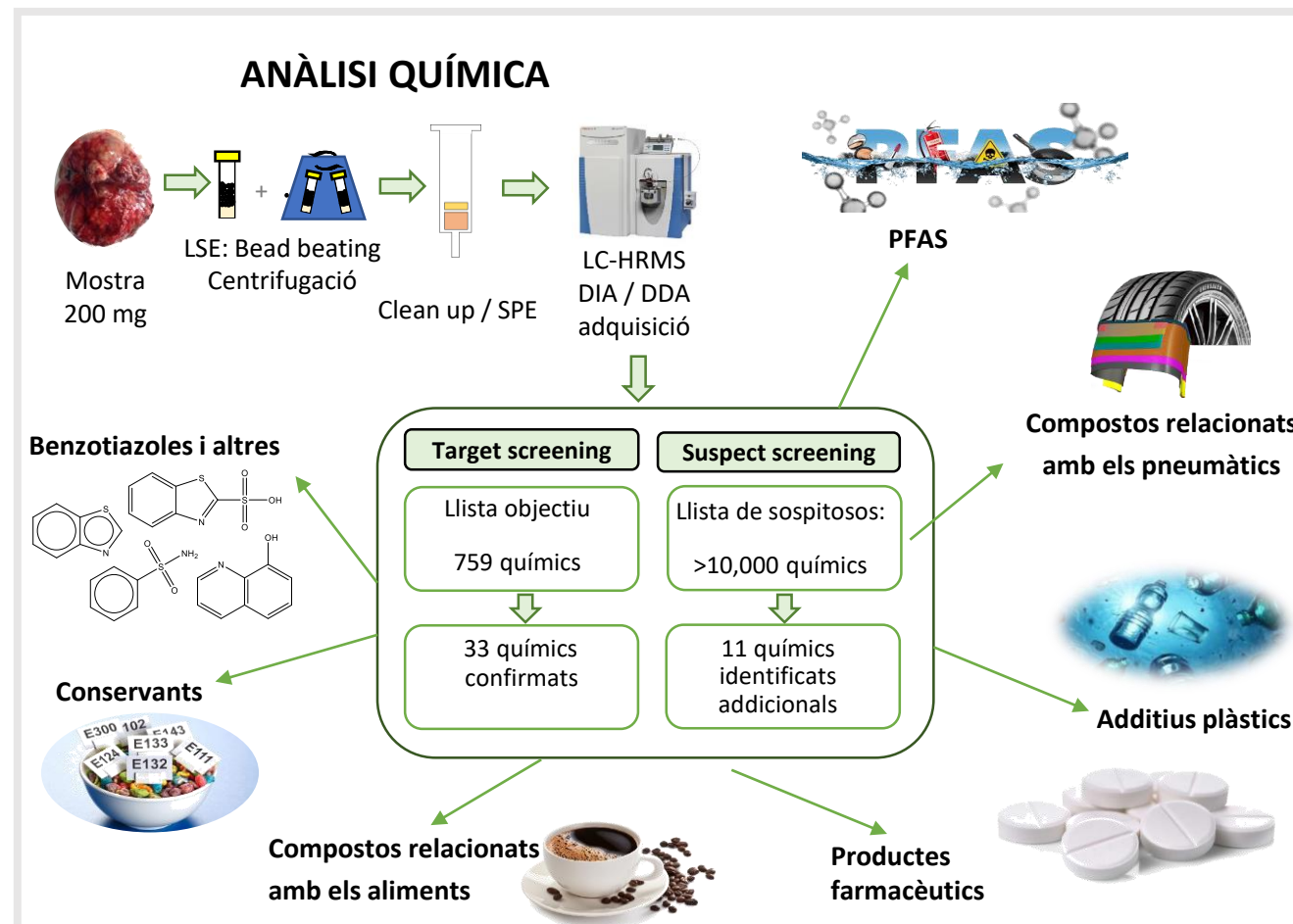
L'exposoma químic en el glioma difús: un estudi exploratori



D. Gutiérrez-Martin;¹ R. Gil-Solsona;² A. Pons-Escoda;¹ S. Díez;¹ E. Restrepo-Montes;² N. Vidal-Sarro;² J. Bruna;³ P. Dadvand;² C. Majós;¹ P. Gago-Ferrero¹

¹ Institut de Diagnosi Ambiental i Estudis de l'Aigua (IDAEA-CSIC) ² Hospital Universitari de Bellvitge – Institut de Recerca Biomèdica de Bellvitge (HUB-IDIBELL) ³ Institut de Salut Global de Barcelona (ISGlobal)

Els gliomes difusos són els tumors cerebrals malignes primaris més freqüents en adults amb pronòstic i supervivència dolents. Una millor comprensió dels factors associats al seu desenvolupament és crucial per millorar-ne el pronòstic i les opcions de tractament. L'exposoma és especialment rellevant per als tumors cerebrals, en què el component ambiental pot tenir un paper important. Comprendre les diferències del tumor i oferir un tractament personalitzat continua sent una necessitat mèdica important. La distinció no invasiva prequirúrgica entre els diferents (sub)tipus de glioma difús de l'OMS encara no s'ha desenvolupat de manera òptima i hi ha una clara necessitat de nous biomarcadors diagnòstics i pronòstics. En aquest sentit, poder avaluar l'estat de metilació del tumor abans de la cirurgia tindria un gran impacte en la gestió del pacient. L'avaluació de l'exosoma intern al teixit tumoral i la seva integració amb 1H-MRS podria conduir al desenvolupament de noves aplicacions pre- i postquirúrgiques amb una influència directa en la gestió i supervivència del pacient.



Estudi del potencial de la fusió d'imatges hiperespectrals d'infraroig proper (NIR) i de color (RGB)



Leiyong Hu, Rodrigo Rocha de Oliveira, Adrián Gómez-Sánchez, Anna de Juan

Departament d'Enginyeria Química i Química Analítica. Secció de Química Analítica

Les imatges hiperespectrals (HSI) són imatges químiques que proporcionen informació espacial i química de les mostres [1]. La tècnica de HSI basada en infraroig proper (NIR) és la més utilitzada en la indústria. Tanmateix, distingir substàncies que tenen un comportament espectral similar és un problema persistent. Per aquest motiu, la incorporació de la imatge de color (RGB) com una informació suplementària pot ser de gran utilitat.

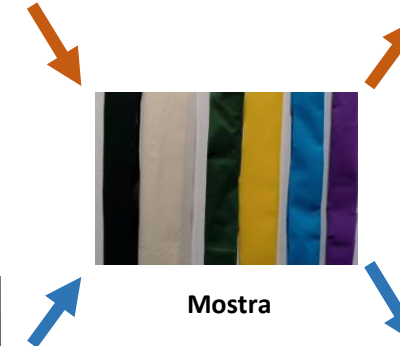
En aquest treball, s'ha dissenyat un sistema de sensor dual acoblant una càmera web a un sistema de càmera NIR. El sistema s'ha utilitzat per obtenir imatges d'una mostra de films de plàstic polimèric de diferents colors i composició, com a imitació d'un problema real de reciclatge de plàstics. Els resultats obtinguts de l'anàlisi quimiomètrica de la fusió de les imatges RGB i NIR-HSI han proporcionat mapes de distribució i empremtes digitals NIR/RGB molt precises per a la distinció dels components dels sistemes estudiats.



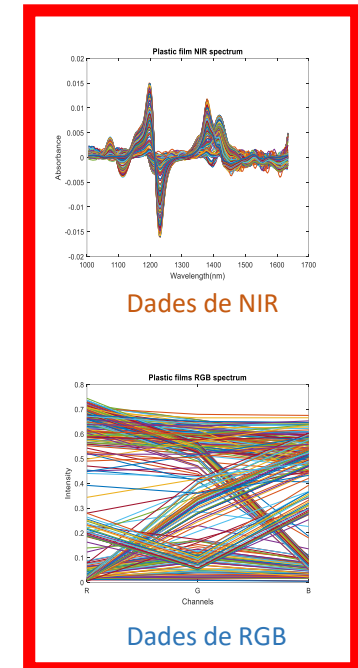
Càmera NIR



Webcam



Mostra



Dades de NIR

Dades de RGB

Dades fusionades

Referències

[1] J. M. Amigo (ed.), *Hyperspectral Imaging. Data Handling in Science and Technology*, vol. 32., Elsevier, 2020.

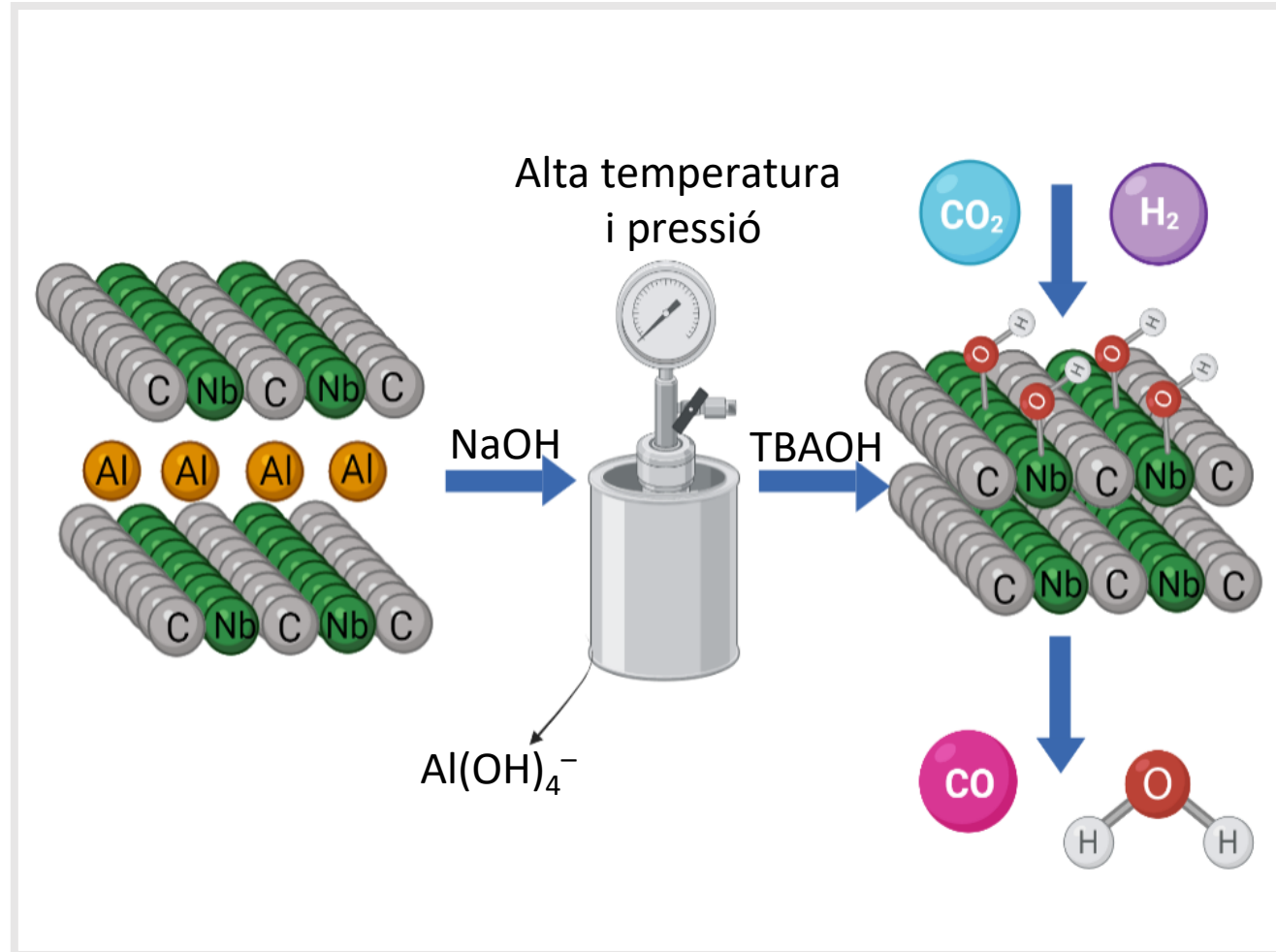
Aproximació a la síntesi hidrotermal de MXens del grup 5 (V, Nb, Ta)

Josep Marco Gibert; Narcís Homs Martí; Xavier Vendrell Villafruela

¹ Departament de Química Inorgànica i Orgànica. Secció de Química Inorgànica

Els MXens són carburs o nitrurs de metalls de transició amb la fórmula química següent: $M_{n+1}X_nT_x$, on M és un metall de transició, X és carboni o nitrogen i T_x són grups terminals que hi ha en la superfície, com OH^- . Aquests materials 2D tenen propietats interessants, ja que són altament conductors i capaços d'emmagatzemar grans quantitats de càrrega. Això n'ha permès l'aplicació en emmagatzematge d'energia, catàlisi o electrònica.

Com a precursors, s'utilitzen les fases MAX ($M_{n+1}AX_n$), on A representa un element del grup 13 o 14, habitualment l'alumini. La síntesi hidrotermal a alta temperatura i pressió permet extreure'n l'alumini. Posteriorment, el compost s'exfolia amb un agent intercalant (TBAOH o DMSO) per obtenir estructures en 2D. Tant les fases MAX com els MXens sintetitzats s'han caracteritzat mitjançant diferents tècniques. També se n'estudiarà el comportament catalític per a la reducció de CO_2 (RWGS).



Millora de propietats mecàniques de materials impresos en 3D per estereolitografia

Alejandro Martín; Pol Barcelona; Elena Xuriguera

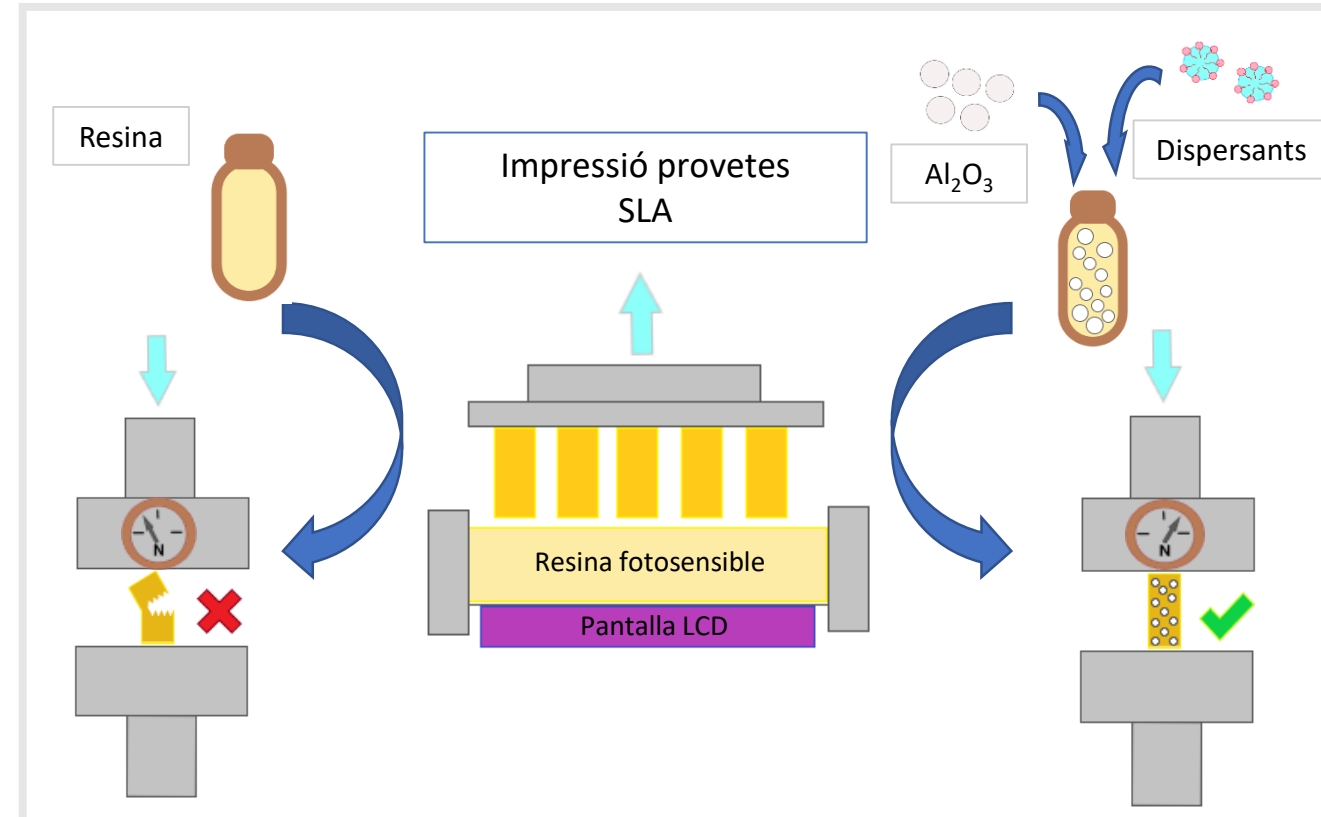
Departament de Ciència de Materials i Química Física. Secció de Ciència i Enginyeria de Materials



Donades les baixes propietats mecàniques dels actuals materials disponibles per a impressió 3D mitjançant estereolitografia (SLA) [1], la recerca actual s'enfoca a millorar aquestes propietats a través de diferents plantejaments. Un d'aquests es basa en l'addició de partícules que actuen com a reforç de la matriu polimèrica.

En aquest treball s'utilitzen partícules de Al_2O_3 de diferent mida de partícula i morfologia, en una proporció no superior al 15 %. L'objectiu és aconseguir una dispersió estable i homogènia que permeti obtenir peces amb un comportament mecànic superior. Per garantir-ho, s'han utilitzat diferents dispersants. Els dispersants estudiats estan basats en un copolímer anhídrid maleic d'estirè, un polièster àcidic, un àcid policarboxílic insaturat i una sal amoniacal d'un copolímer àcidic funcionalitzat amb grup hidroxil.

Els estudis reològics i d'estabilitat conclouen que la millor formulació és una dispersió al 10 % i 2 % de sal amoniacal del copolímer, que en millora les propietats mecàniques.



Referències

- [1] J. Bonada, P. Barcelona, M. Casafont, J. M. Pons, J. A. Padilla, E. Xuriguera, Analysis of the Compression Behaviour of Reinforced Photocurable Materials Used in Additive Manufacturing Processes Based on a Mask Image Projection System, *Materials*, **2021**, *14*, 4605.
<<https://doi.org/10.3390/ma14164605>>

Reducció de cetones per transferència d'hidrogen catalitzada per compostos ciclometal·lats de ruteni



Albert Martínez i Segura;¹ Jaume Granell;¹ Arnald Grabulosa¹

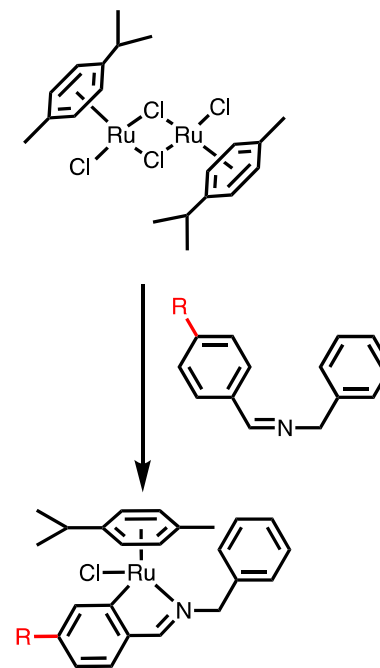
¹ Departament de Química Inorgànica i Orgànica. Secció de Química Inorgànica

Des que fa cinquanta anys Trofimenko va descriure el primer compost ciclometal·lat de pal·ladi [1], la síntesi de complexos d'aquest tipus amb metalls de transició i les aplicacions catalítiques i farmacèutiques que tenen han estat investigades intensament.

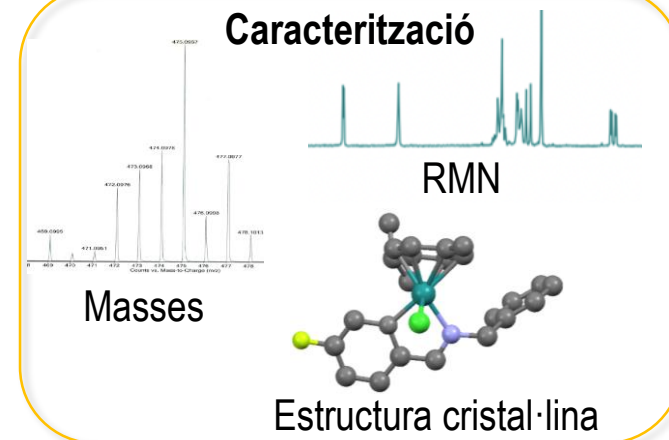
Darrerament, el grup de Catàlisi Homogènia ha desenvolupat compostos ciclorutenats amb fosfines *P*-estereogèniques, que s'han emprat com a catalitzadors en reducció de cetones per transferència d'hidrogen [2], reacció de gran interès tant acadèmic com industrial [3].

En aquesta contribució, s'expandeix aquesta química i es demostra que pot activar-se l'enllaç C–H en posició *orto* de les imines amb la formació de nous metal·locicles. A més, es descriu que aquests complexos de ruteni(II) són actius en la reducció catalítica per transferència d'hidrogen de cetones.

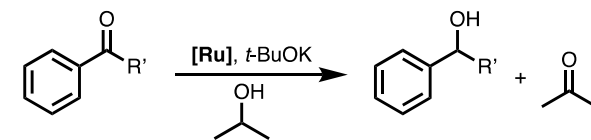
Síntesi



Caracterització



Catàlisi



Referències

- [1] S. Trofimenko, *Inorg. Chem.*, **1973**, 12, 1215–1221.
- [2] A. Grabulosa, J. Granell, M. Font-Bardia, *J. Organomet. Chem.*, **2019**, 896, 51–58.
- [3] D. Wang, D. Astruc, *Chem. Rev.*, **2015**, 115, 6621–6686.

Hidrogenació catalítica asimètrica mitjançant complexos de rodi(I) amb difosfans de pont de metilè

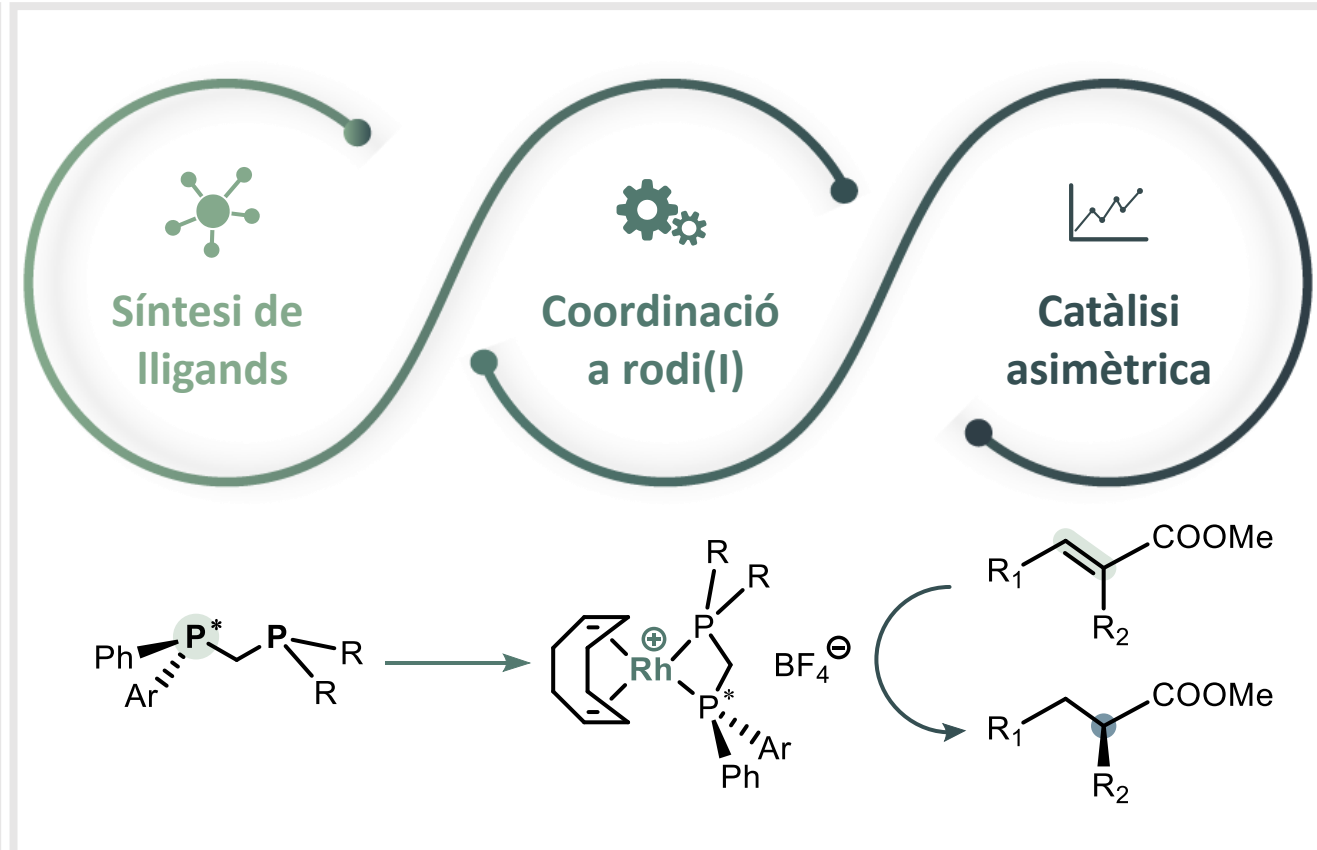


Yaiza Martínez; Anton Vidal-Ferran; Arnald Grabulosa

Departament de Química Inorgànica i Orgànica. Secció de Química Inorgànica

En un món cada dia més preocupat per la sostenibilitat, no es pot concebre un futur sense fer ús de la catàlisi, un dels dotze principis de la química verda [1]. Dins la catàlisi, la hidrogenació enantioselectiva és clau, donat que és el mètode òptim per obtenir compostos quirals òpticament purs, essencials en la indústria farmacèutica i agroalimentària. D'entre els catalitzadors estudiats, els més emprats són els complexos de rodi(I) amb difosfans quirals, els quals són sistemes catalítics excel·lents i objecte d'un gran esforç acadèmic.

En aquest treball es presenta la síntesi i coordinació a rodi(I) de difosfans no simètrics quirals amb un únic àtom de fòsfor estereogènic i un pont de metilè entre ambdós àtoms de fòsfor. Aquest tipus de lligand és poc freqüent i té un gran potencial encara per desenvolupar [2]. S'hi presenten també alguns resultats d'hidrogenació catalítica enantioselectiva de substrats de referència amb els complexos que s'han obtingut.



Referències

- [1] P. Anastas, J. C. Warner, *Green Chemistry: Theory and Practice*, OUP, Nova York, **1998**.
- [2] S. M. Mansell, *Dalton Trans.* **2017**, 46, 15157-15174.

Síntesi i caracterització de Bi_2S_3 nanoestructurat i compostos ternaris derivats per intercanvi catiónic

Roger Morales; Albert Figuerola¹

¹ Departament de Química Inorgànica i Orgànica. Secció de Química Inorgànica

Comissió de Dinamització Lingüística

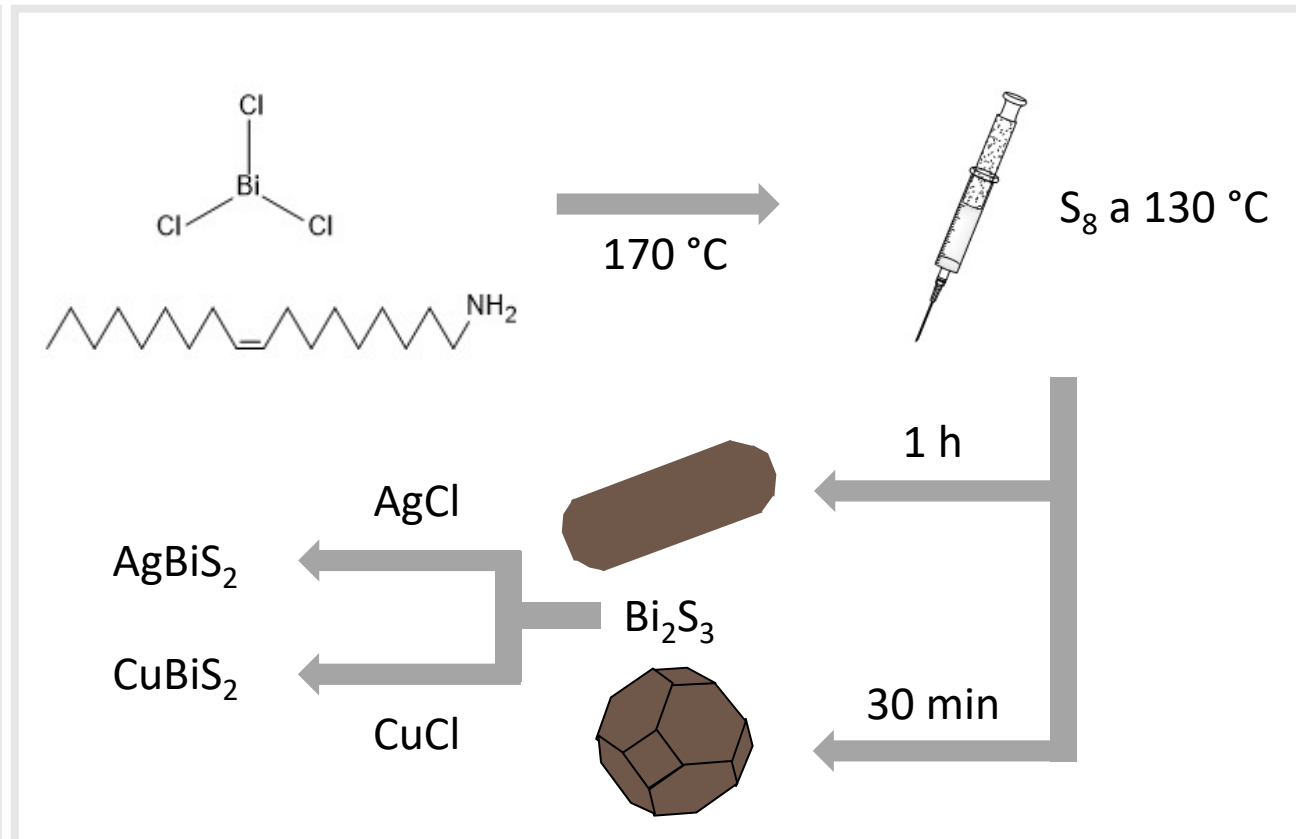
UNIVERSITAT DE
BARCELONA
Facultat de Química



Els nanomaterials han guanyat rellevància gràcies a les noves propietats que ofereixen mitjançant l'augment de la relació superfície-volum i els efectes quàntics. El sulfur de bismut(III) és un material semiconductor no tòxic versàtil, que es pot utilitzar en diverses aplicacions, en cel·les solars, sensors o en fotocatàlisi [1]. Alguns derivats del Bi_2S_3 , com el AgBiS_2 o el CuBiS_2 , formen un compost ternari en afegir cations metàl·lics, de manera que s'obtenen noves propietats termoelèctriques i de conducció tèrmica [2].

La síntesi d'aquests compostos s'ha fet mitjançant mètodes diferents, tant en estat sòlid com col·loidalment. Aquestes últimes són d'especial interès, ja que en treballar amb partícules col·loïdals estabilitzades en dissolució s'obté un major control de la síntesi.

L'objectiu del treball és l'optimització de la síntesi de les nanoestructures, tant nanodots com nanorods, de Bi_2S_3 i la seva utilització posterior en reaccions d'intercanvi catiónic per obtenir els compostos ternaris mitjançant una síntesi col·loïdal.



Referències

[1] T. Wu, X. Zhou, H. Zhang, X. Zhong. *Nano Res.* **2010**, *3*, 379-386.

[2] J. Wang, M. Akgul, Y. Bi, S. Chistodoulou, G. Konstantatos. *J. Mater. Chem. A*, **2017**, *5*, 24621-24625.



Fotooxidació selectiva del glicerol

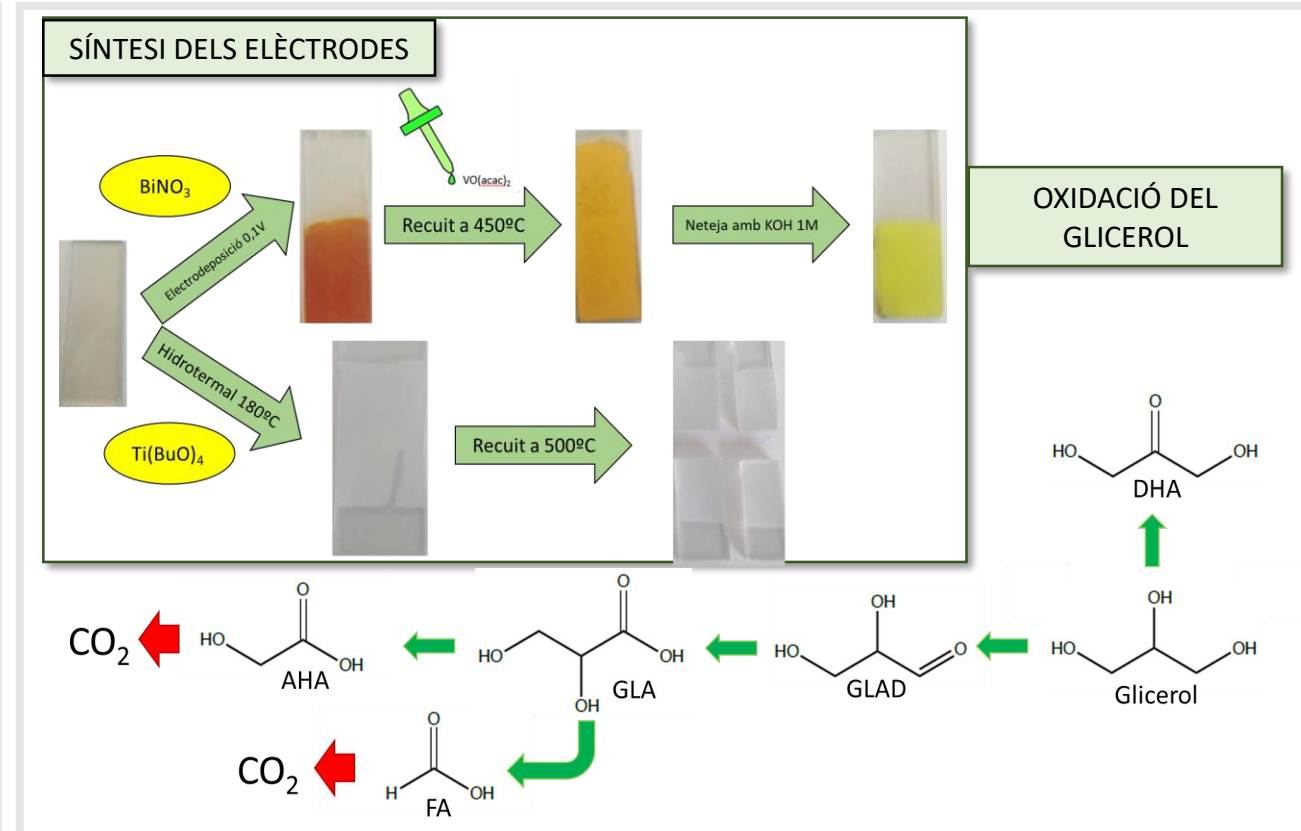
Martí Molera Janer; Teresa Andreu Arbella

Departament de Ciència de Materials i Química Física. Secció de Química Física

Un dels residus principals de la indústria del biodièsel és el glicerol, un compost amb poc valor econòmic degut a la seva sobreproducció. Per aquest motiu, s'estan buscant materials per valoritzar-lo, amb una oxidació selectiva cap a compostos amb un alt valor afegit com ara l'àcid fòrmic o la dihidroxiacetona. En els últims anys, el BiVO_4 ha estat un d'aquests materials, amb la premissa d'emprar llum solar per augmentar-ne l'eficiència [1].

En aquest treball compararem fotoànodes de BiVO_4 i TiO_2 a pH àcid i neutre en un medi de sulfat de sodi 0,5 M, i valorarem l'efecte de la radiació solar en l'eficiència i selectivitat del procés.

S'ha observat que el TiO_2 presenta una alta selectivitat envers l'àcid fòrmic, però afavoreix la mineralització parcial del glicerol obtenint CO_2 . D'altra banda, el BiVO_4 oxida el glicerol en les dues rutes possibles, i la selectivitat varia en funció del pH.



Referències

[1] D. Liu, J. C. Liu, W. Cai, *et al.* Selective photoelectrochemical oxidation of glycerol to high value-added dihydroxyacetone, *Nat Commun*, **2019**, *10*, 1779.

Modelització computacional d'una solució d'àcids húmics

David Naranjo;¹ Pablo M. Blanco;² J. L. Garcés;³ F. Mas;¹ S. Madurga¹

¹ Departament de Ciència de Materials i Química Física. Secció de Química Física

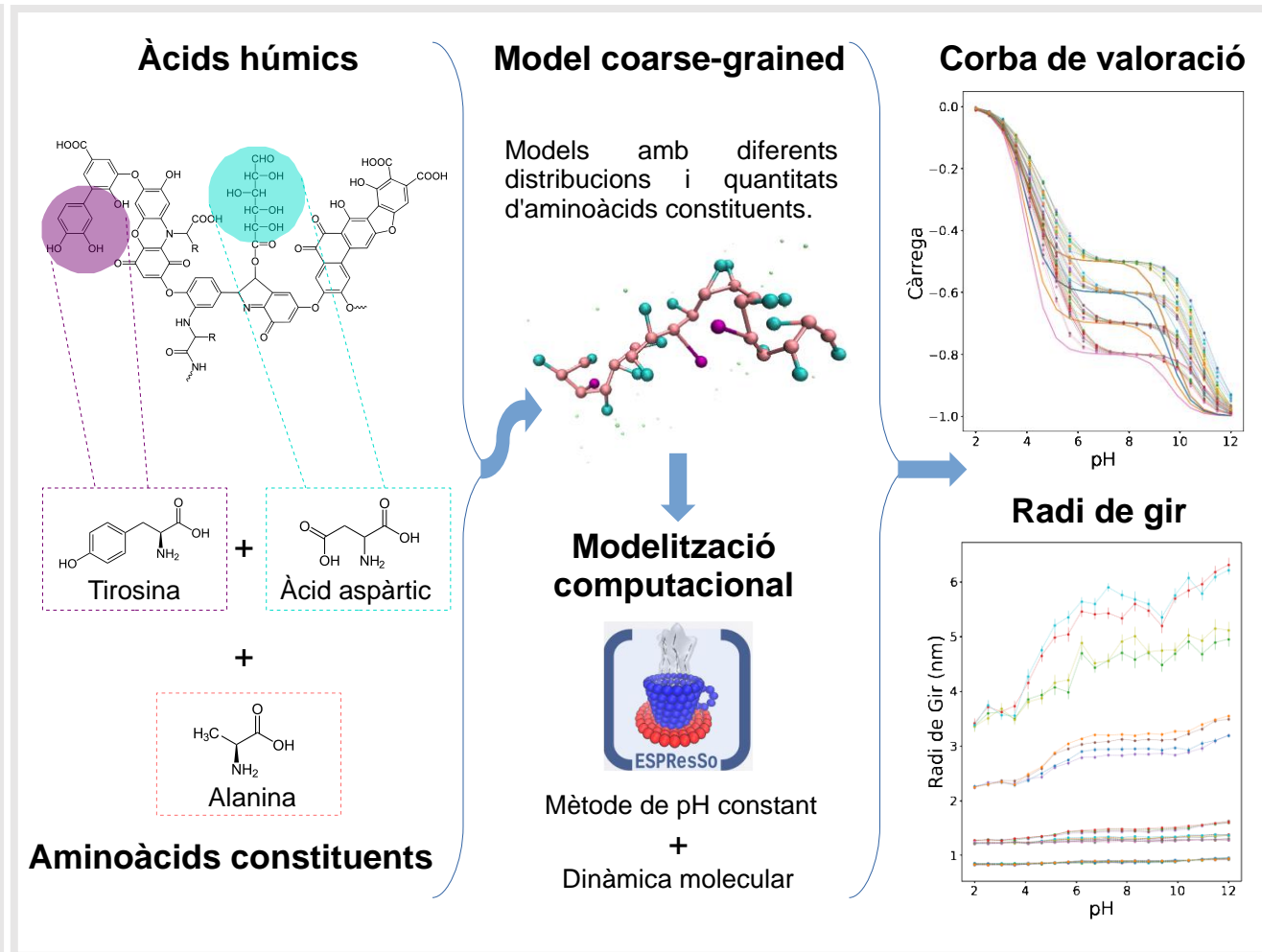
² Departament de Física i Química Macromolecular, Facultat de Ciències, Charles University (Praga, Txèquia)

³ Departament de Química, Escola Tècnica i Superior d'Enginyeria Agrària, Universitat de Lleida



Els àcids húmics (HAs) són mescles heterogènies de matèria orgànica natural que es troben gairebé a tot arreu del medi ambient, i particularment en sòls, sediments i en sistemes aquàtics naturals. Els HAs provenen de la degradació de la matèria orgànica i tenen un paper clau en el destí dels contaminants al medi ambient.

Un dels problemes principals per la seva caracterització experimental és que són macromolècules molt diferents, però amb una composició química semblant. En aquest estudi es vol predir el seu comportament mitjançant simulacions computacionals. S'han generat diferents models d'HAs que permeten determinar l'efecte de la distribució i quantitat de grups funcionals àcid-base sobre les seves propietats finals. En particular, es descriu un protocol computacional efectiu per poder simular les corbes de valoració dels HAs i predir tant la variació del grau de protonació, com del radi de gir dels HAs, en funció del pH.



Determinació d'amines biògenes i aminoàcids per cromatografia de líquids amb i sense derivatització precolumna. Aplicació a la caracterització de vi i cava per mètodes quimiomètrics

Comissió de Dinamització Lingüística

UNIVERSITAT DE
BARCELONA
Facultat de Química



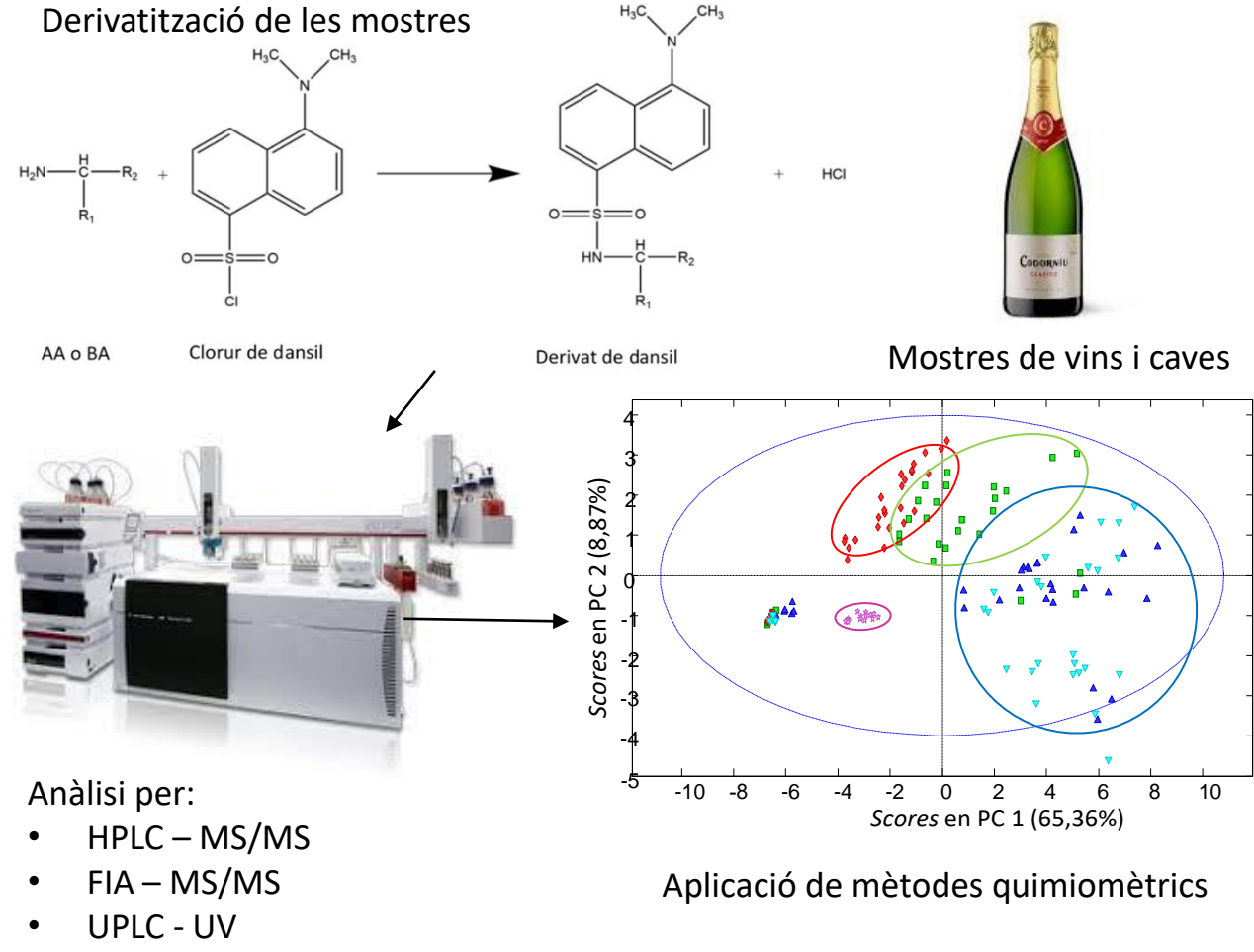
Ainhoa Navarro-Abril;¹ Javier Saurina;^{1,2} Sònia Sentellas^{1,2}

¹ Departament d'Enginyeria Química i Química Analítica. Secció de Química Analítica

² Institut de Recerca en Nutrició i Seguretat Alimentària, Universitat de Barcelona

Les amines biògenes (BA) són compostos nitrogenats de baix pes molecular presents en diferents aliments fermentats, mariscs i vins. Són molècules biològicament actives que participen en vies metabòliques dels éssers vius, com l'estabilització de la sang, la regulació de la temperatura corporal i la millora de la neurotransmissió. Tanmateix, a concentracions elevades de BA, poden aparèixer problemes toxicològics en els organismes, com ara migranyes i efectes sobre el sistema vascular o nerviós. El nivell de BA és un paràmetre important per avaluar la qualitat dels vins ja que pot indicar una producció en males condicions d'higiene. Les BA es generen principalment a partir de la descarboxilació dels seus aminoàcids precursors (AA), però també ho poden fer a partir de reaccions de transaminació i aminació reductores.

L'objectiu d'aquest treball és caracteritzar BA i AA en vins i caves, incloent-hi most, vins base, vins estabilitzats i vins escumosos de criaça de 3 i 7 mesos obtinguts de les varietats de raïm *pinot noir* i xarel·lo. La determinació dels continguts de BA i AA es basa en la cromatografia líquida de fase inversa-espectrometria de masses C18 (HPLC-MS/MS), FIA-MS/MS i UPLC-UV amb derivatització precolumna d'anàlits amb clorur de dansil. Posteriorment, s'han aplicat mètodes quimiomètrics per estudiar el comportament i la classificació de les mostres.





Estudi de la biodegradabilitat de polímers biodegradables

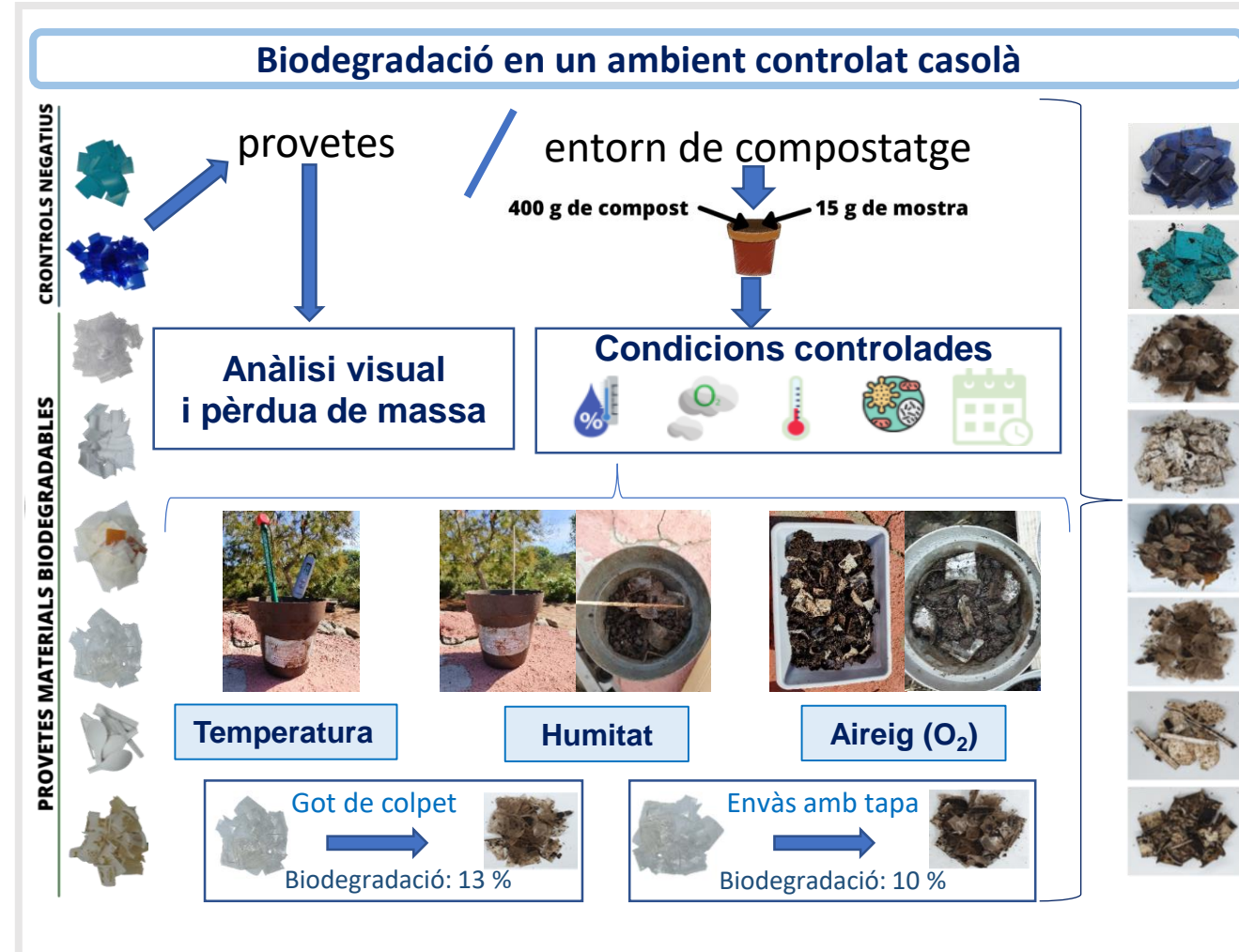
Carlos Mario Olaya; Joan Dosta; Ricard Torres; Sergi Astals

Departament d'Enginyeria Química i Química Analítica. Secció d'Enginyeria Química

L'ús de polímers biodegradables és una de les alternatives per resoldre els problemes ambientals relacionats amb els polímers convencionals. D'aquesta manera, s'espera que puguin ser tractats per compostatge o digestió anaeròbica.

Aquest estudi pretén determinar si els productes biodegradables es degraden en un sistema de compostatge casolà. Així, es van avaluar sis polímers declarats com a «biodegradables» pels seus fabricants, monitorant la pèrdua de pes i l'aspecte visual.

Els resultats experimentals van mostrar pèrdues de massa d'entre el 3 % i el 13 %. En conclusió, el got de colpet i l'envàs amb tapa fabricats amb àcid polilàctic (PLA) presenten una biodegradació més alta (del 13 % i del 10 %, respectivament). Tot i això, la biodegradació dels polímers no havia finalitzat. Els polímers no biodegradables (control negatiu), és a dir, el tereftalat de polietilè (PET) i polietilè d'alta densitat (HDPE), no van patir cap efecte de degradació.



Identificació de contaminants orgànics potencialment perillosos presents en aigües residuals regenerades utilitzades per al reg agrícola

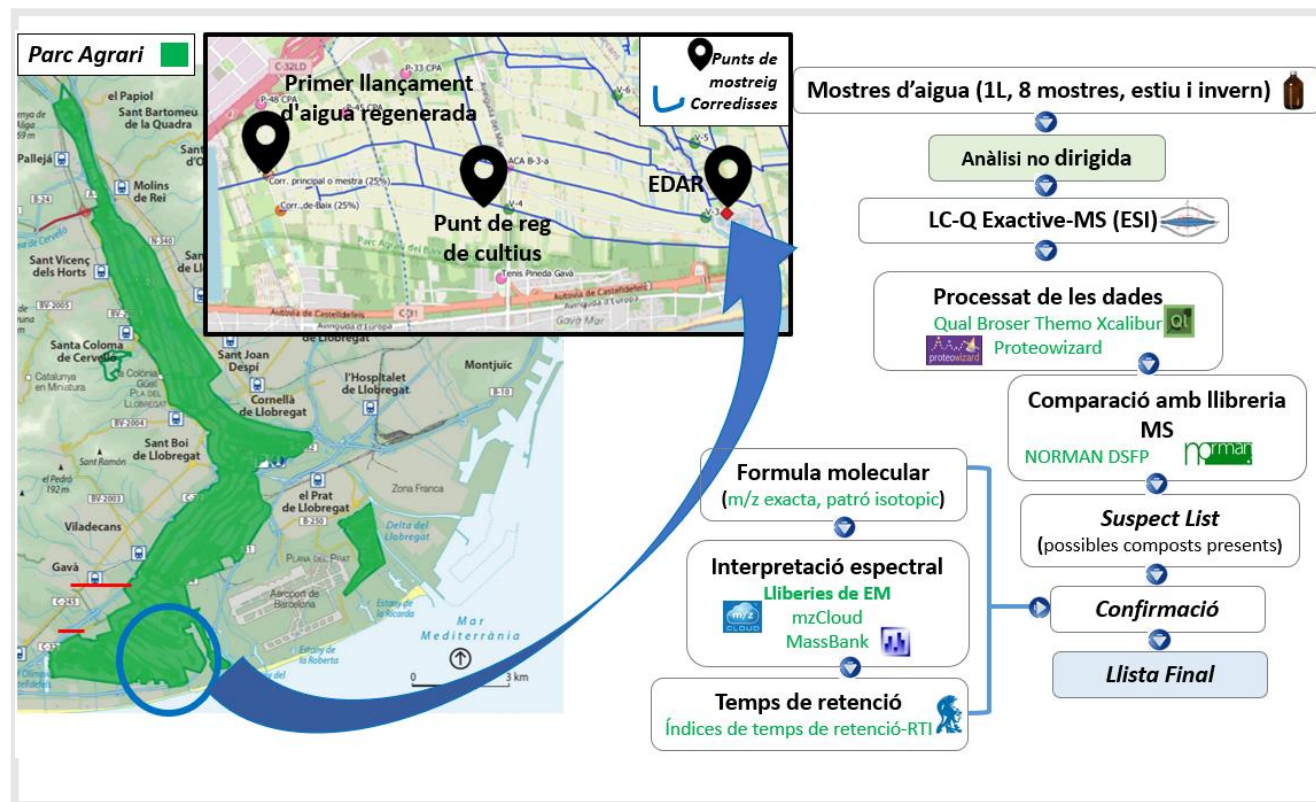
Comissió de Dinamització Lingüística



Dana Orlando-Véliz; Manuel García-Vara; Miren López de Alda

Departament de Química Ambiental, Institut de Diagnosi Ambiental i Estudis de l'Aigua (IDAEA-CSIC)

Davant l'escassetat d'aigua dolça o l'augment de la demanda [1][2], pràctiques com ara la reutilització d'aigües residuals regenerades amb diferents fins, com per exemple el reg agrícola, estan augmentant en diferents països. Tot i això, els tractaments d'aigües aplicats no eliminen una important varietat de contaminants orgànics potencialment perillosos. Per identificar-los, en aquest treball s'ha fet servir un flux de treball avançat que inclou l'anàlisi no dirigida basada en cromatografia de líquids acoblada a espectrometria de masses d'alta resolució en tàndem (LC-HRMS/MS), el contrast de les dades obtingudes amb llibreries d'MS, i nous mètodes d'avaluació del risc. L'aplicació d'aquesta metodologia a diverses mostres reals utilitzades per al reg agrícola en el Parc Agrari del Baix Llobregat ha permès identificar diversos fàrmacs, drogues i pesticides que serien rellevants en termes d'abundància i toxicitat i necessitarien investigació amb més profunditat.



Referències

- [1] F. Pedrero, I. Kalavrouziotis, J. J. Alarcón, *Agric. Water Manag.*, **2010**, 97, 1233-1241.
- [2] A. Wluka, L. Coenen, J. Schwarzbauer, *Water Sci. Technol.*, **2017**, 76.4, 832.

Producció biològica de polihidroxicanoats aplicant l'alimentació per separat d'àcids grassos volàtils i nitrogen amoniacal

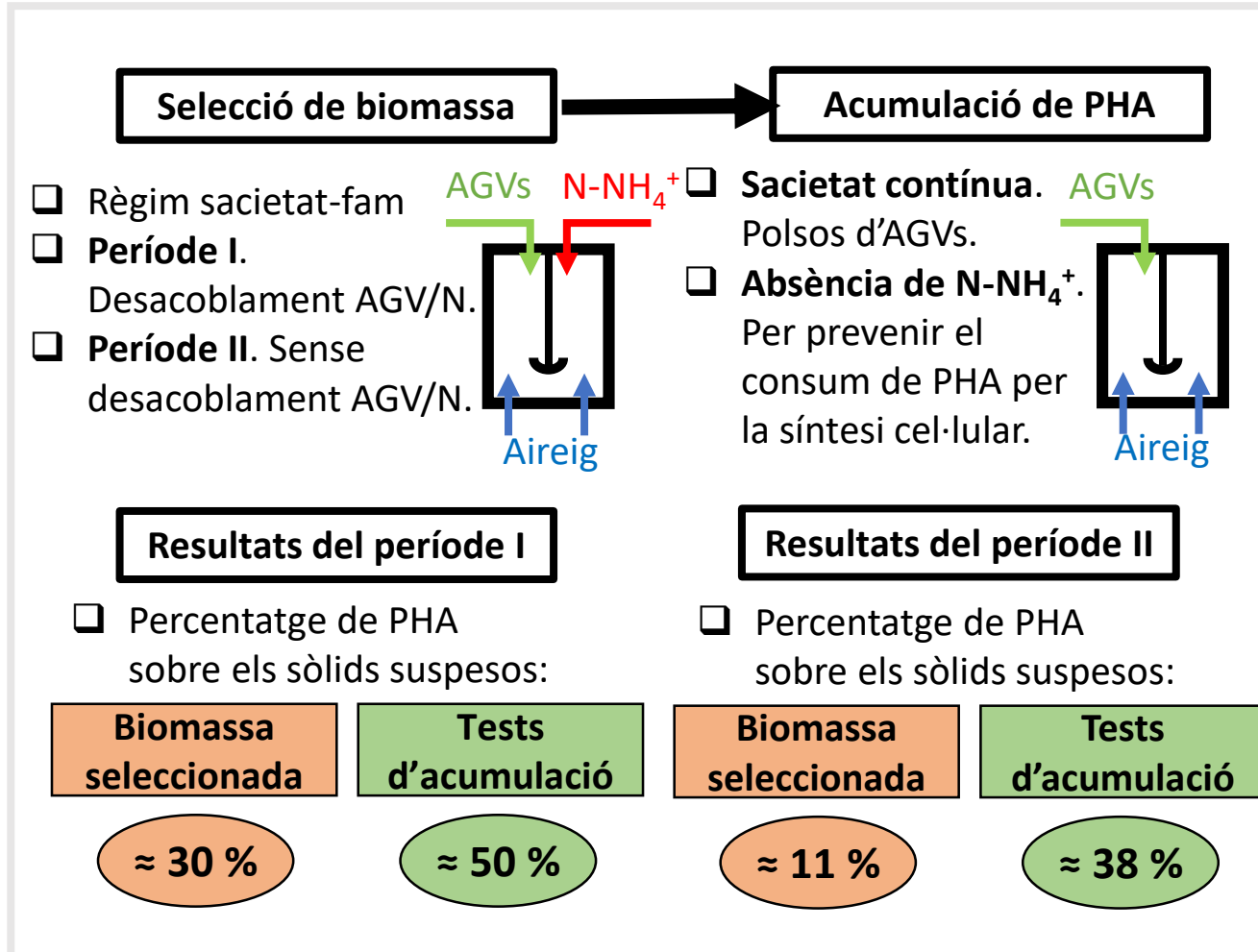


Sergi Peña-Picola; Noemi Perez-Esteban; Sergi Astals; Joan Dosta

Departament d'Enginyeria Química i Química Analítica. Secció d'Enginyeria Química

Els àcids grassos volàtils (AGVs) són productes que es poden generar en estacions depuradores d'aigües residuals i que presenten múltiples aplicacions, entre les quals destaca la producció de bioplàstics en forma de polihidroxicanoats (PHA). Les característiques dels PHA són similars a les de les poliolefines derivades del cru de petroli, amb l'avantatge de ser totalment biodegradables. Aquest bioplàstic es pot obtenir a partir d'AGVs mitjançant dues etapes: la selecció de biomassa productora de PHA i l'acumulació posterior de PHA dins la biomassa seleccionada.

En aquest treball s'ha posat en marxa un reactor biològic aeròbic a 35 °C, amb un temps de retenció hidràulic i cel·lular d'1,1 i 4,2 dies, respectivament, tractant aigua sintètica rica en AGVs (3,5 g DQO/L) per seleccionar biomassa productora de PHA. Els resultats obtinguts han demostrat que el fet d'alimentar per separat els AGVs i el nitrogen amoniacal ($N-NH_4^+$) condueix a un millor enriquiment de biomassa capaç d'acumular PHA i, per tant, a un rendiment de producció d'aquest bioplàstic molt més gran (fins a un 50 % en pes respecte al 38 % obtingut, si no es fa).



Eliminació de microcontaminants mitjançant aiguamolls construïts i processos d'oxidació avançada



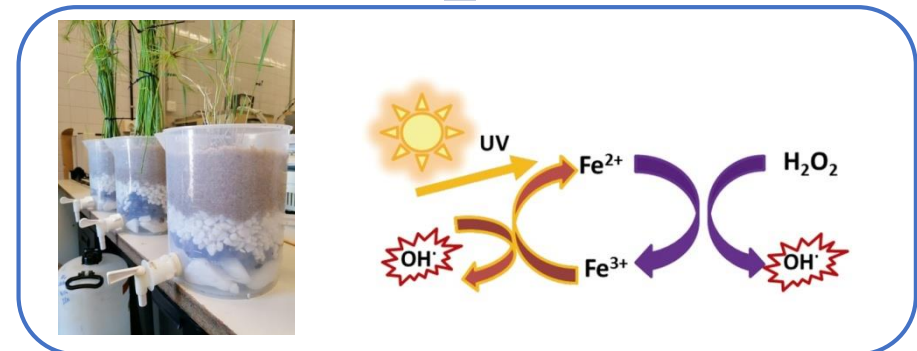
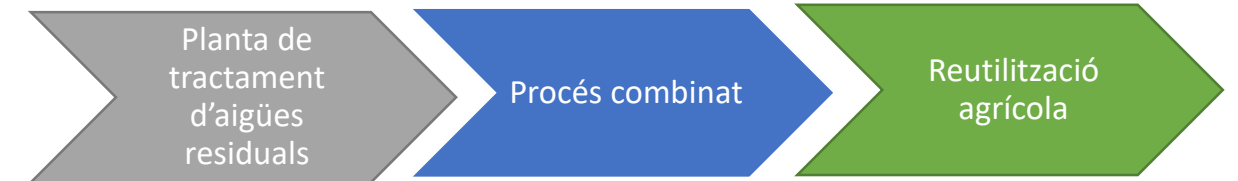
Ana Piera Santacruz;¹ Núria López Vinent;² Alberto Cruz Alcalde¹

¹ Departament d'Enginyeria Química i Química Analítica. Secció d'Enginyeria Química

² Institut de Diagnosi Ambiental i Estudis de l'Aigua (IDAEA-CSIC)

Garantir la qualitat de l'aigua és un dels reptes importants d'aquest segle. D'altra banda, la presència de microcontaminants a l'aigua constitueix un dels problemes més rellevants. Pel seu caràcter biorecalcitrant no s'eliminen de les depuradores, de manera que entren al medi aquàtic i posen en risc els ecosistemes i la salut humana. Per això, cal aplicar tractaments adequats per poder eliminar-los.

Alguns estudis han demostrat l'eficàcia dels aiguamolls a l'hora d'eliminar contaminants: d'una banda, tenen uns costos de funcionament i implementació baixos; de l'altra, necessiten molt d'espai i temps. Referent als processos d'oxidació avançada, un dels més eficaços per eliminar contaminants orgànics i patògens és el procés foto-Fenton. S'ha dut a terme un foto-Fenton a pH neutre, per reutilitzar posteriorment les aigües per a l'agricultura. Per tant, un procés combinat entre els dos processos esmentats podria ser una bona opció per eliminar els microcontaminants i millorar la qualitat d'aigua.



Determinació de la permeabilitat a través de la pell de productes cosmètics utilitzant membranes artificials i mesures cromatogràfiques



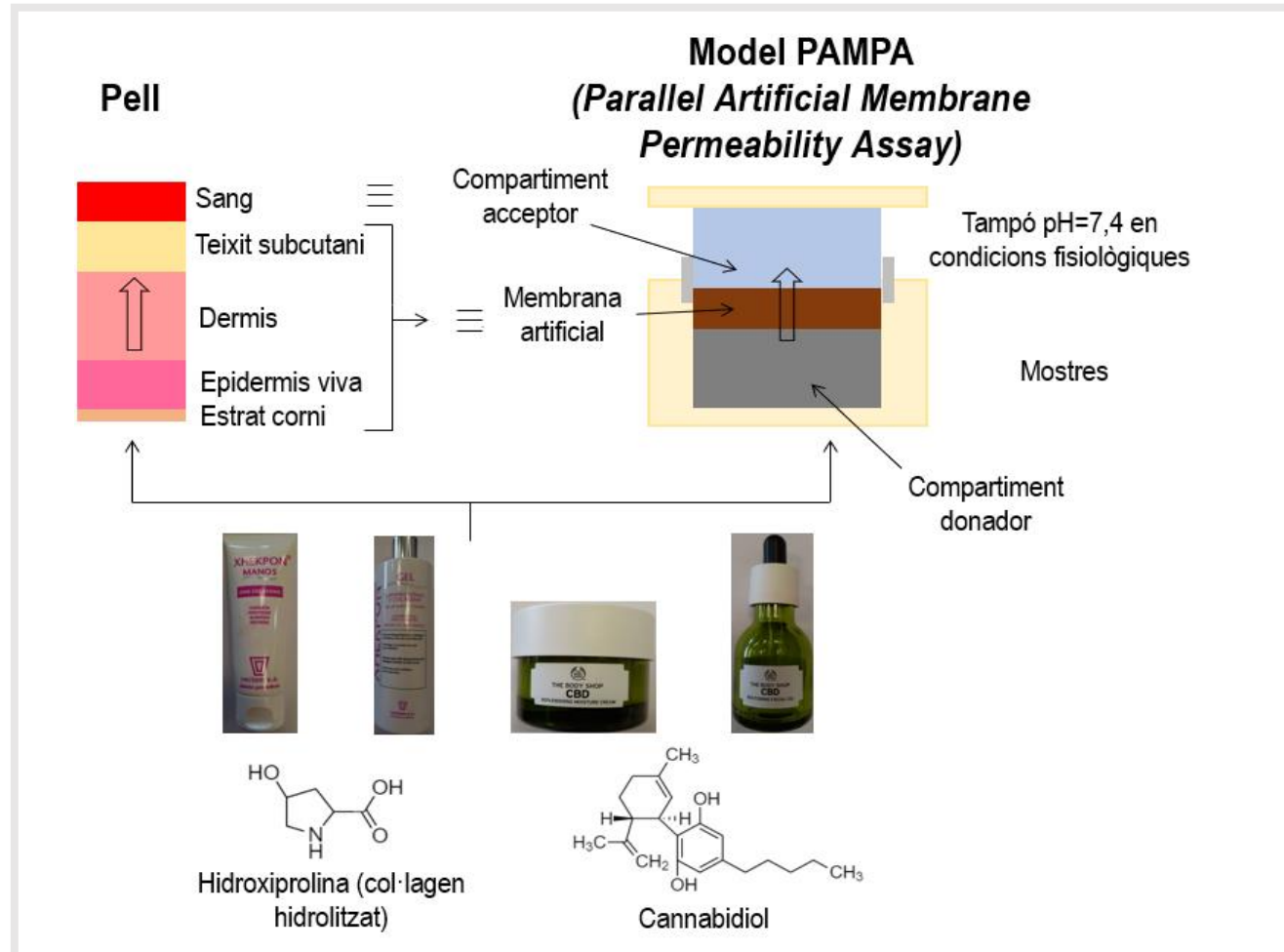
Marina Piña; Susana Amézqueta; Elisabet Fuguet

¹ Departament d'Enginyeria Química i Química Analítica. Secció de Química Analítica

La permeabilitat a través de la pell mesura la velocitat a la qual una substància es mou a través de les diferents capes de la pell fins que arriba al flux sanguini. La indústria avalua aquesta propietat per a la majoria dels components dels seus productes ja que està estretament lligada a l'acció d'aquests.

La permeabilitat pot estimar-se amb un mètode anomenat PAMPA, que es basa en la simulació de la pell utilitzant una membrana artificial de composició similar.

En aquest estudi s'avaluen dos compostos presents en productes cosmètics: el col·lagen i el cannabidiol. En primer lloc, s'han desenvolupat mètodes analítics per quantificar aquests compostos en diferents mostres cosmètiques. A continuació, s'ha fet l'estudi de permeabilitat amb el mètode PAMPA. S'ha observat que un percentatge important dels compostos queda retingut a la membrana, cosa que indica que també són retinguts a la pell i poden manifestar el seu efecte bioactiu.



Estudi de l'efecte de diferents excipients en la solubilitat d'un fàrmac àcid-base

Judith Ramos; Clara Ràfols; Elisabet Fuguet

Departament d'Enginyeria Química i Química Analítica. Secció de Química Analítica

Comissió de Dinamització Lingüística

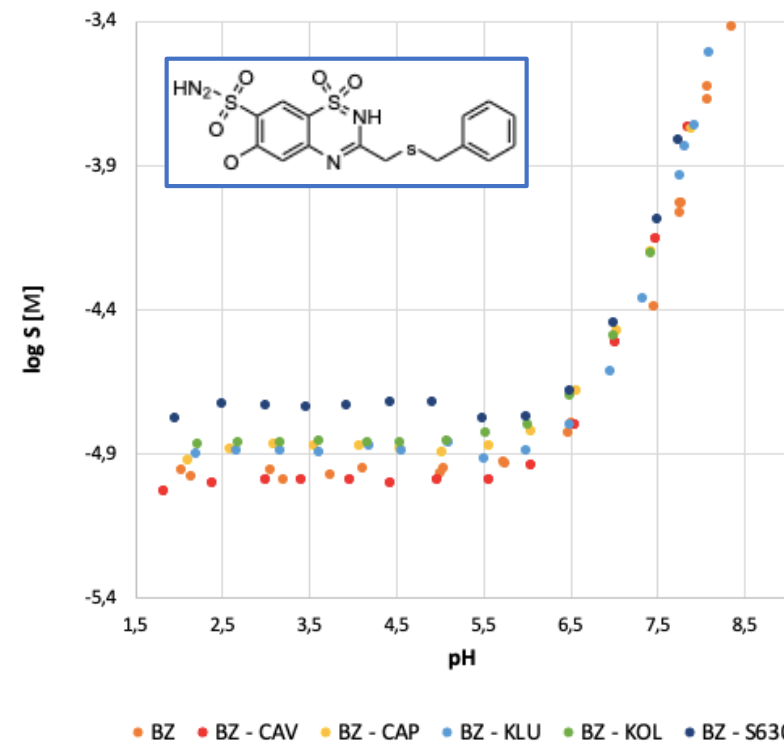
UNIVERSITAT DE
BARCELONA
Facultat de Química



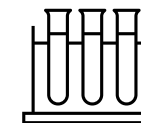
Un dels paràmetres fisicoquímics més importants per determinar en l'àmbit de la indústria farmacèutica és la solubilitat dels fàrmacs d'administració per via oral, perquè està directament relacionada amb la seva capacitat d'absorció al tracte gastrointestinal i, per tant, amb l'efecte que tindrà a l'òrgan o teixit diana. D'altra banda, és una propietat que es pot veure afectada pels excipients que s'utilitzen en la formulació dels medicaments.

En aquest projecte s'ha determinat l'efecte d'alguns excipients (Cavasol, Captisol, Klucel, Kollidon i Plasdon S630) en la solubilitat de la benzotiazida (BZ). Per aconseguir-ho s'han obtingut els perfils de solubilitat del fàrmac sol i amb excipients, mitjançant el mètode *shake-flask*. S'ha pogut comprovar com la majoria dels excipients milloren la solubilitat de la benzotiazida, cosa que fa que sigui més fàcil d'absorbir en el tracte gastrointestinal.

Comparació dels perfils de solubilitat de la benzotiazida

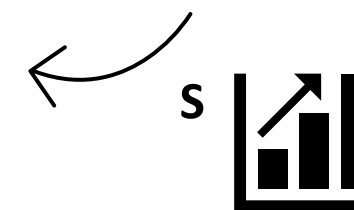


Mètode *shake-flask*



(solubilitat termodinàmica)

Obtenció i comparació dels perfils de solubilitat



Efecte dels excipients

Avaluació de l'eficiència de biocarbons com a sorbents per a la descontaminació d'aigües

Comissió de Dinamització Lingüística

UNIVERSITAT DE
BARCELONA
Facultat de Química

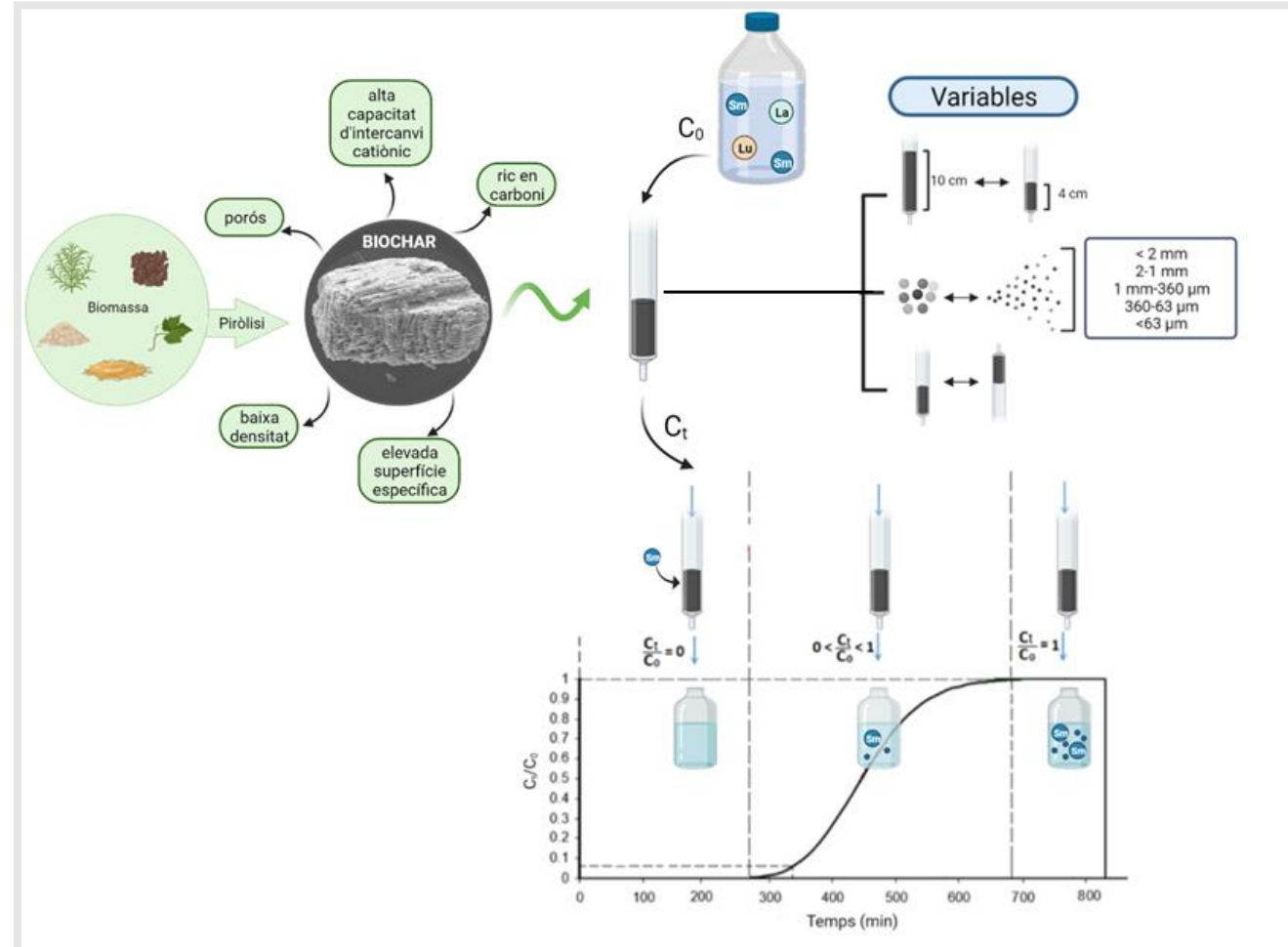


Sandra Rasero López; Anna Rigol Parera; Miquel Vidal Espinar

Departament d'Enginyeria Química i Química Analítica. Secció de Química Analítica

L'augment de l'ús industrial dels lantànids en aplicacions tecnològiques ha comportat un augment de les seves concentracions en el medi. Una opció per mitigar-ne l'impacte és la utilització de materials com els biocarbons, materials sorbents obtinguts a partir de la piròlisi de residus vegetals o animals.

En aquest treball s'han investigat dos biocarbons, procedents de restes de branca de pi (PB) i de jardineria (GAW). S'ha determinat la seva capacitat màxima de sorció mitjançant el procés de sorció en continu, on el material s'empaqueta en una columna per on es passa una solució contaminada. S'ha avaluat l'efecte de la direcció del cabal, l'alçada de la columna i la mida de la partícula. També s'ha estudiat el procés en una matriu real d'aigua de riu, fortificada amb Sm, La i Lu, per avaluar-ne l'efecte matriu i la competència entre lantànids en el procés de sorció.



Síntesi d'imeses ciclopal·ladades endocíclicues en un únic medi de reacció

Marta Real; Joan Albert

Departament de Química Inorgànica i Orgànica. Secció de Química Inorgànica

Comissió de Dinamització Lingüística

UNIVERSITAT DE
BARCELONA
Facultat de Química

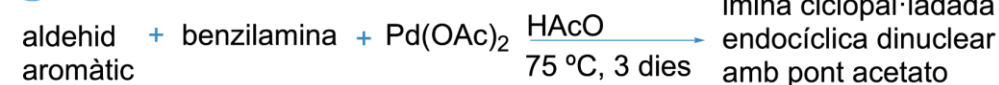


La figura mostra la síntesi d'imeses ciclopal·ladades endocíclicues dinuclears amb pont acetato per reacció entre quantitats equimolars d'un d'aldehid aromàtic, una benzilamina i acetat de pal·ladi(II) en un sol medi de reacció. En alguns casos, els dinuclears amb pont acetato s'han transformat en dinuclears amb pont cloruro o mononuclears amb cloruro terminal i trifenilfosfina per establir correctament la seva l'estructura.

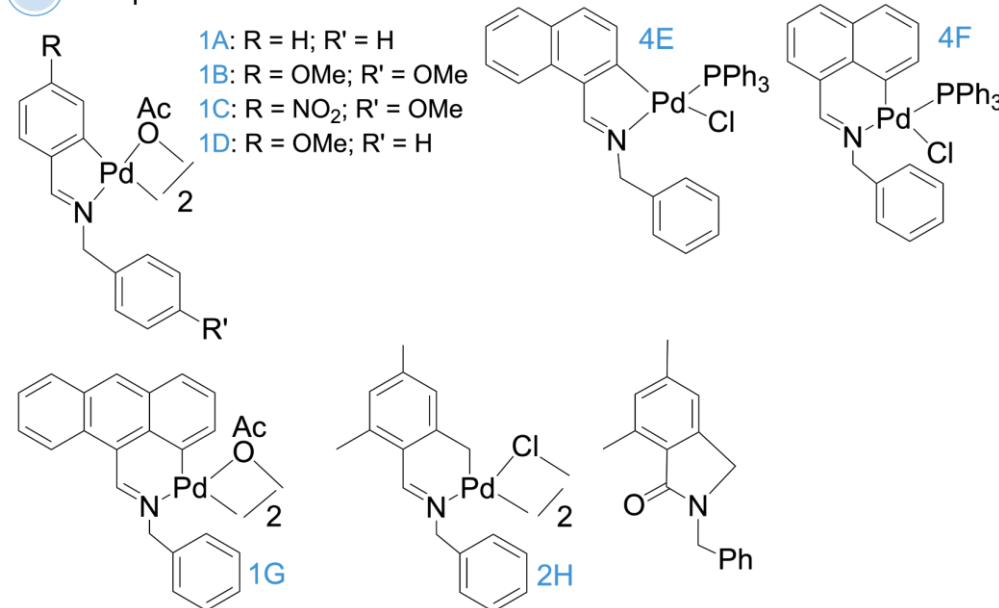
En la reacció entre el 4-nitrobenzaldehyd i la 4-metoxibenzilamina es va detectar 4-metoxibenzaldehyd, i en la reacció entre el 2,4,6-trimetilbenzaldehyd i la benzilamina també es van aïllar petites quantitats de l'amida cíclica de la figura.

Aquests estudis són d'interès en el camp de la funcionalització catalítica d'enllaços C—H, utilitzant imines transitòries com a grups directors i compostos de pal·ladi com a catalitzadors [1].

1- Reacció global



2- Compostos caracteritzats



Referències

[1] J. Higham, J. Bull, *Org. Biomol. Chem.*, **2020**, *16*, 7291-7315.

Síntesi de tetrahidroisoquinolines mitjançant activació C–H

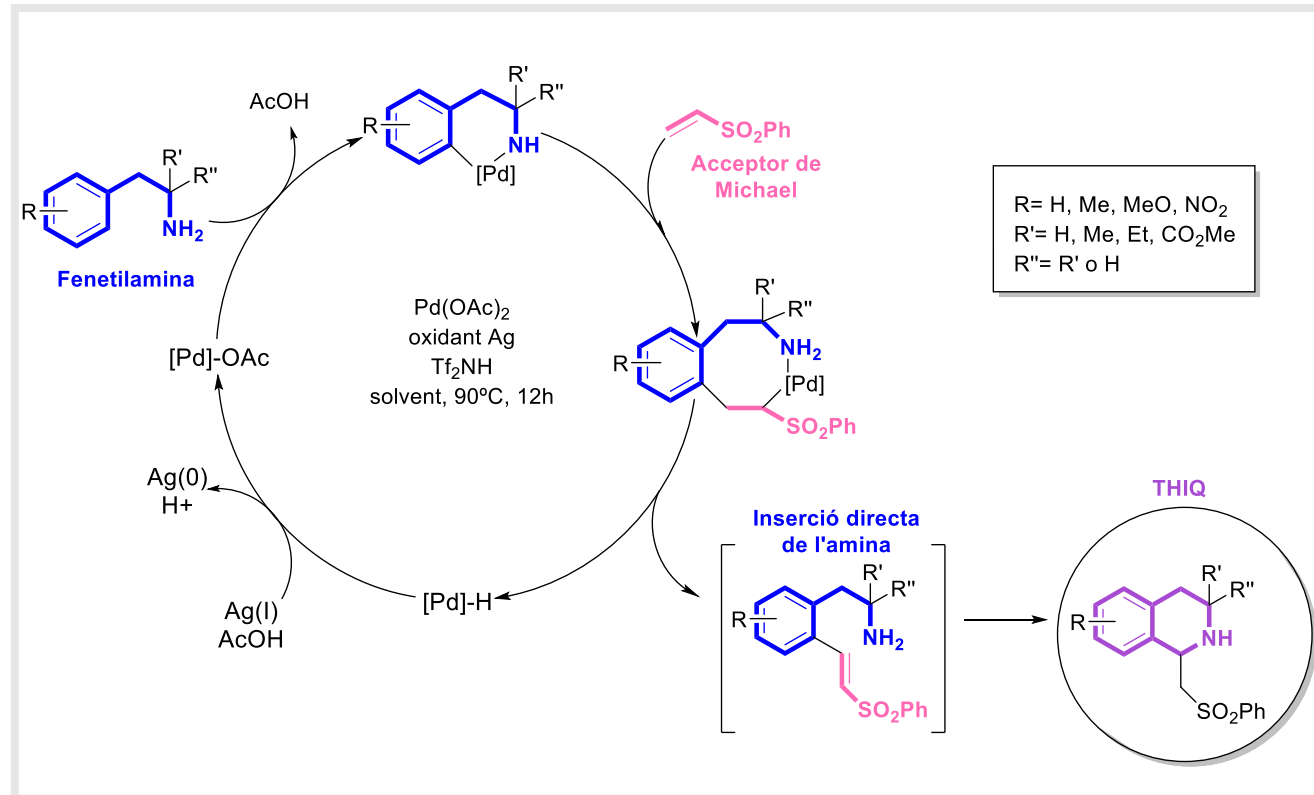


Luis R. Rodríguez-Javier; Xavier Ariza; Jordi Garcia; Pau Guillamon; Andrea Mancinelli

Departament de Química Inorgànica i Orgànica. Secció de Química Orgànica

El desenvolupament de fàrmacs fa necessari el descobriment de mètodes sintètics alternatius que facilitin l'obtenció de noves molècules. Aquest és el cas de la tetrahidroisoquinolina (THIQ), un farmacòfor present en molts compostos biològicament actius que es pot obtenir en un sol pas mitjançant ciclometal·lacions de fenetilamines.

En la reacció proposada, l'amina primària actua com a grup director de l'activació C–H en la posició *orto*, permetent la inserció de l'acceptor de Michael i la subsegüent addició conjugada. L'eliminació reductora del catalitzador dona lloc a les respectives THIQs en una sola etapa [1]. Tot i que aquestes reaccions estan afavorides per l'efecte Thorpe-Ingold d'un carboni quaternari en α respecte a l'amina, s'ha demostrat que la presència d'aquests substituents no és necessària [2]. En aquest treball s'han optimitzat les condicions de reacció per aquesta transformació on l'acceptor de Michael és una sulfona de fenil i vinil.



Referències

- [1] A. Mancinelli, C. Alamillo, J. Albert *et al.*, *Organometallics.*, **2017**, 36, 4, 911–919.
- [2] S. Fan, X. Chen, Y. Ding *et al.*, *J. Org. Chem.*, **2019**, 84, 20, 13003–13012.

Eliminació de microcontaminants d'aigües residuals mitjançant biocarbó de closca d'arròs: síntesi, caracterització i capacitat d'adsorció

Albert Sales Alba; Bernardí Bayarri Ferrer

Departament d'Enginyeria Química i Química Analítica. Secció d'Enginyeria Química



Durant els darrers anys, la preocupació per la contaminació de l'aigua ha accelerat la necessitat de desenvolupar nous mètodes, més efectius i rendibles, que permetin corregir aquesta problemàtica.

El biocarbó (*biochar*) és un material porós i obtingut de la valorització de la biomassa mitjançant la piròlisi en absència d'oxigen. A causa del gran interès que ha generat, per les seves notables propietats com a adsorbent i el seu baix impacte ambiental, el biocarbó es presenta com una alternativa prometedora capaç d'eliminar tant els contaminants convencionals com els emergents de les aigües residuals.

En aquest estudi, s'ha sintetitzat i caracteritzat, químicament i físicament, el biocarbó provinent de la closca d'arròs. D'altra banda, s'han dut a terme un seguit d'experiments en discontinu per poder determinar la capacitat d'adsorció d'aquest material en l'eliminació de tres pesticides (clotianidina, tiacloprid i atrazina), tant en les aigües residuals com en les aigües preparades.

1. Síntesi de biocarbó

Closca d'arròs



Piròlisi/Activació

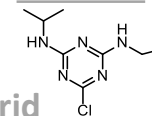


Biocarbó

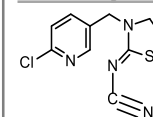


3. Experiments

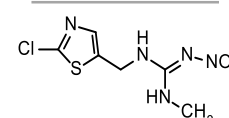
Atrazina



Tiacloprid



Clotianidina



2.



Física

Química





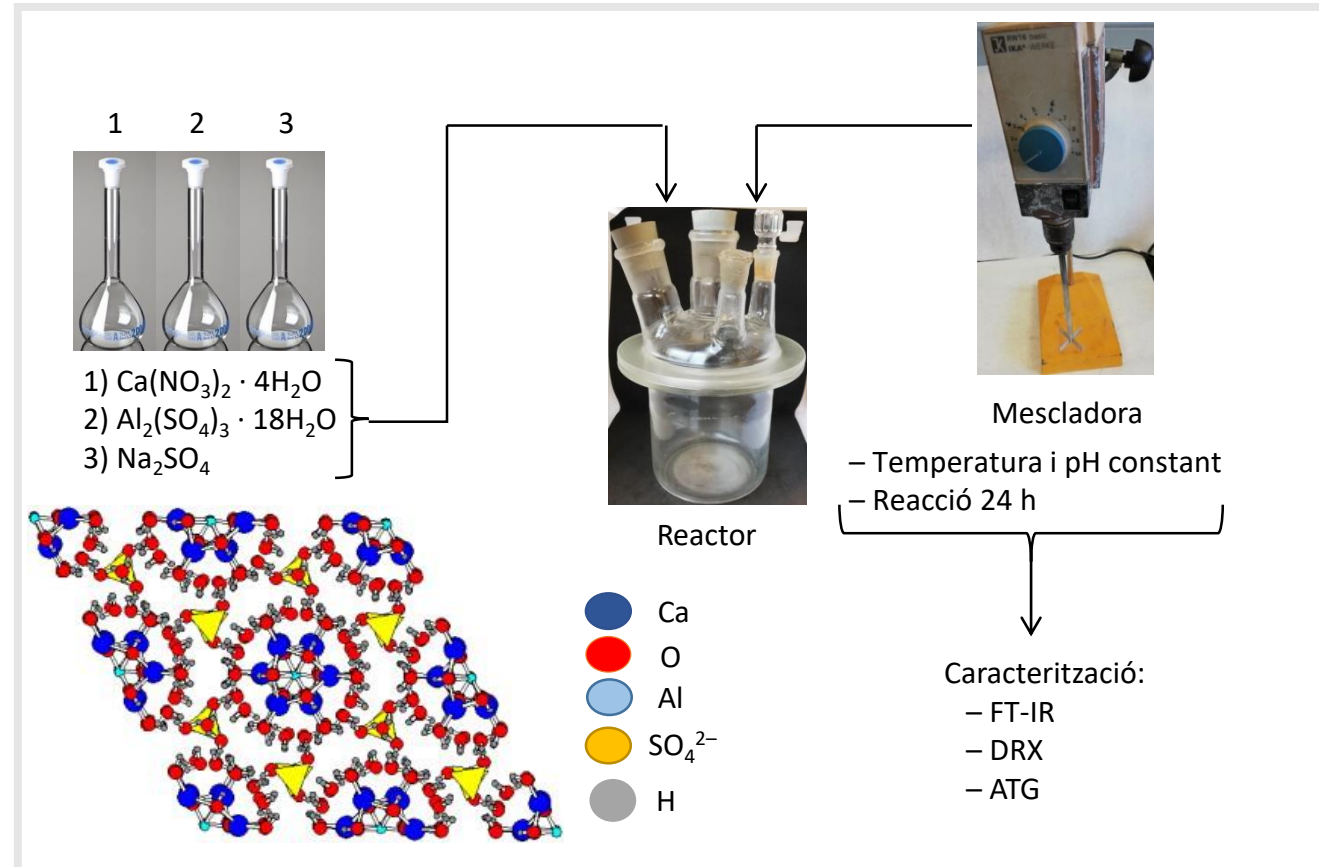
Optimització i formació d'ettringita sintètica

Èric Sanahuja Rosich; Jessica Giró-Paloma; Anna Alfocea Roig; Joan Formosa Mitjans

Departament de Ciència de Materials i Química Física. Secció de Ciència i Enginyeria de Materials

El formigó és el material més consumit mundialment amb 30.000 Mt. L'ettringita, $\text{Ca}_6\text{Al}_2(\text{OH})_{12}(\text{SO}_4)_3 \cdot 26\text{H}_2\text{O}$, és un mineral que es troba majoritàriament al formigó de ciments pòrtland i la seva funció principal és controlar-ne l'enduriment. Es tracta d'un mineral rar a la natura que es forma en medis alcalins en presència de CaO , Al_2O_3 , SO_4^{2-} i H_2O .

L'objectiu principal és sintetitzar el mineral al laboratori. D'aquesta manera, es preparen diferents dissolucions dels ions Ca^{2+} , Al^{3+} , SO_4^{2-} en diferents proporcions estequiomètriques per avaluar en quines condicions es forma ettringita en funció del pH, la temperatura i la concentració dels ions. Posteriorment, s'analitza el precipitat format mitjançant diferents tècniques de caracterització com ara l'espectroscòpia d'infraroig (FT-IR), DRX i ATG. L'anàlisi del precipitat ens permet determinar en quines dissolucions s'ha format potencialment l'ettringita, de manera que es pot relacionar el seu comportament i la seva relació amb la química de materials.



Referències

[1] E. Poupelloz, S. Gauffinet, A. Nonat, *Study of nucleation and growth processes of ettringite in diluted conditions. Cement and Concrete Research*, **2020**, 127, 105915.

Síntesi de MXens mitjançant l'aplicació d'ultrasons per a la catàlisi d'hidrogenació de CO₂

Adrià Sánchez Ruiz; Lourdes Mestres Vila; Pilar Ramirez de la Piscina

Departament de Química Inorgànica i Química Orgànica. Secció Química Inorgànica

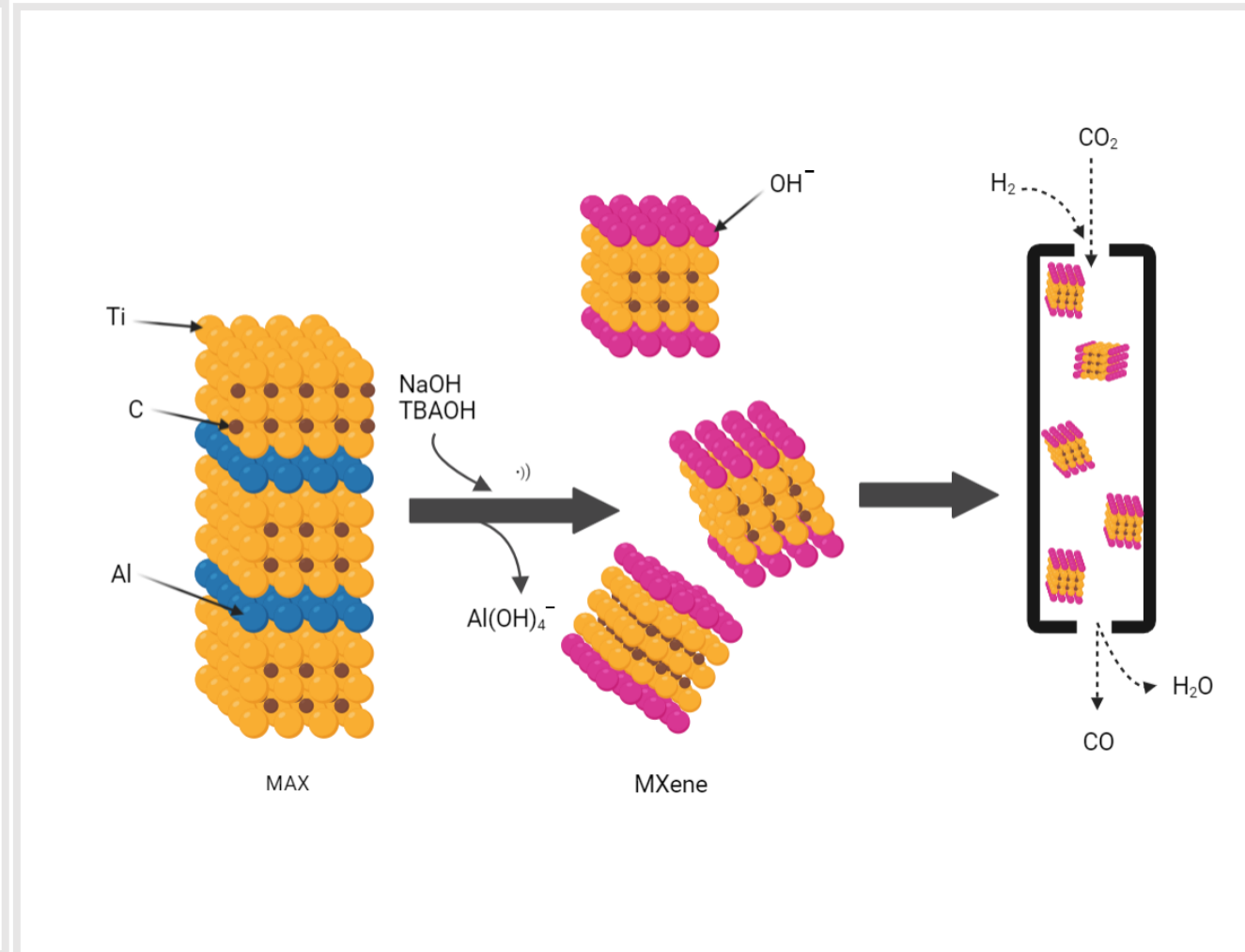
Comissió de Dinamització Lingüística

UNIVERSITAT DE
BARCELONA
Facultat de Química



En l'actualitat la química té la responsabilitat d'avançar conjuntament amb unes pautes ecològiques i sostenibles, en què els avenços científics no constitueixin un perjudici per al medi ambient. Un exemple d'aquesta química enfocada en el medi ambient és l'estudi de catalitzadors per reduir els nivells de CO₂.

Els MXens són una família emergent de materials bidimensionals constituïts per carburs de metalls de transició amb terminacions halogenades o hidroxíliques. Aquest projecte es focalitza en el desenvolupament d'una síntesi per MXens en contraposició als mètodes establerts actualment, substituint l'àcid fluorhídric per altres reactius, com ara hidròxid de sodi o hidròxid de tetrabutilamoni, en condicions de pressió atmosfèrica i temperatures suaus, fent-la més accessible. La segona fita del projecte és la utilització d'aquests MXens com a catalitzadors en reaccions de reducció de CO₂ a productes funcionals com el gas de síntesi, metà o metanol.



Síntesi de lligands per complexar amb ions metàl·lics.

Estudi dels complexos resultants

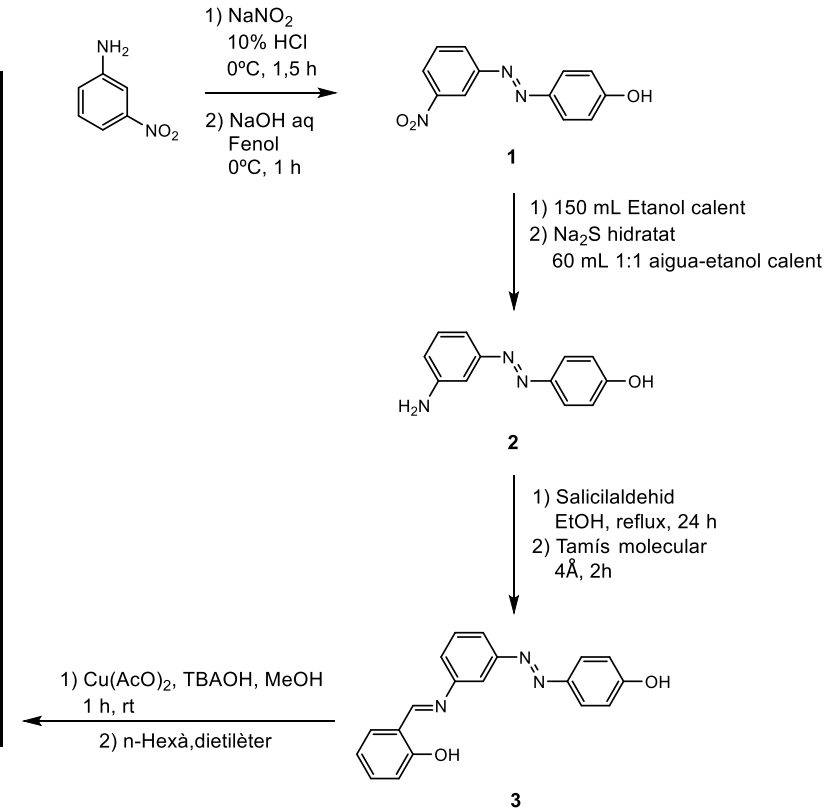
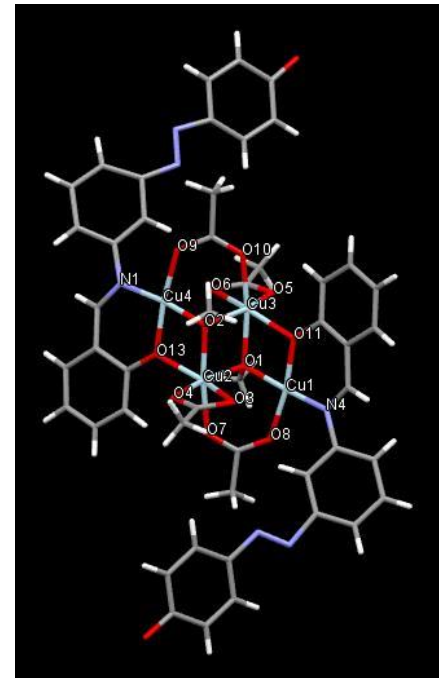


Neus Santiago i Domínguez; Paul Lloyd-Williams; Jordi García

Departament de Química Inorgànica i Química Orgànica. Secció de Química Orgànica

Avui dia hi ha molt interès a construir sistemes amb capacitat de retenir grans quantitats d'informació i amb velocitats elevades de processament. Una aproximació a la síntesi d'aquests es basa en molècules que poden exhibir fenòmens quàntics com ara *spin crossover* (SCO) i *single molecule magnets* (SMMs). Els compostos orgànics amb grups azo conjugats (-N=N-) permeten isomeritzacions reversibles entre les formes *cis* i *trans* sota irradiació de llum UV. Aquestes isomeritzacions provoquen canvis en les seves propietats fisicoquímiques, cosa que pot fer que siguin importants en camps diversos com ara cristalls líquids, fotointerruptors [1], agents terapèutics o inclús com a administradors de fàrmacs.

El nostre grup d'investigació està interessat en la síntesi optimitzada de nous lligands que incorporen grups azo i imina, capaços de coordinar-se amb cations metàl·lics (idealment amb lantànids) per obtenir nous nanomaterials que poden ser SMMs amb propietats modulables per la irradiació de llum UV.



Referències

[1] I. Cârlescu, A. M. Scutaru, D. Apreutesei, V. Alupei, D. Scutaru, The liquid crystalline behaviour of ferrocene derivatives containing azo and imine linking groups, *Liq. Cryst.* **2007**, *34*, 775-785.



Noves rutes cap a naftalens dopats amb el fragment BN

Guillem Sanz Liarte;¹ Federica Rulli;² Pol Roca;¹ Nina Martinez;² Raimon Puig de la Bellacasa;²

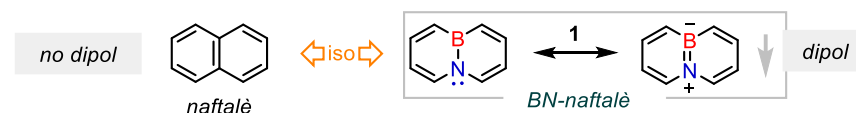
Ana B. Cuenca;² Alexandr Shafir¹

¹BISi-Bonds grup, Institut de Química Avançada de Catalunya, IQAC-CSIC

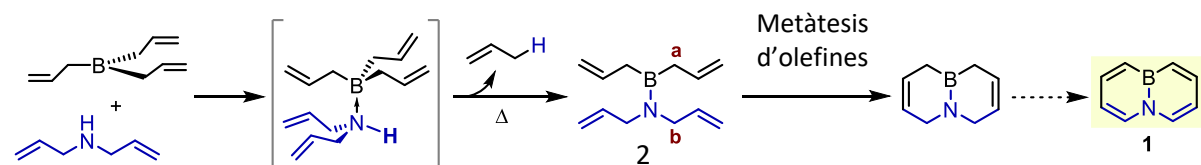
²Departament de Química Orgànica i Farmacèutica, Institut Químic de Sarrià, URL

El concepte “isosterisme B-N” es basa a reemplaçar un enllaç C=C pel fragment B-N. Aquest intercanvi permet obtenir entitats similars estructuralment, però amb diferents propietats electròniques. En el camp dels hidrocarburs policíclics aromàtics, l’isosterisme BN està proliferant en camps com la ciència de materials o la biomedicina [1]. Aquest tipus de compostos poden ser representats pel regioisòmer del BN-naftalè **1**.

Així, l’isòmer **1**, preparat primerament els anys seixanta per Dewar i col·laboradors, representa un element molt interessant per obtenir compostos aromàtics BN de major complexitat. Posteriorment, els grups d’Ashe i Fang van reportar el que representen les rutes principals cap a **1**, les quals es basen en una doble metàtesi de tancament d’anell [2]. Així i tot, aquestes metodologies presenten un ampli marge de millora. Aquí anunciarem una síntesi millorada cap al BN-naftalè. Específicament, mostrarem que el precursor tetra-al·lilic **2** pot ser obtingut eficientment via una reacció de propenòlisi utilitzant dial·lilamina i trial·lilborà [3].



Nova ruta sintètica cap a **1**



Referències

[1] Z. X. Giustra, S. Y. Liu, *J. Am. Chem. Soc.*, **2018**, *140*, 1184-1194.

[2] a) F. Sun, L. Lv, M. Huang, Z. Zhou, X. Fang, *Org. Lett.*, **2014**, *16*, 5024-5027; b) A. D. Rohr, J. W. Kampf, A. J. Ashe, III, *Organometallics*, **2014**, *33*, 1318-1321.

[3] Manuscrit en preparació.

Reaccions directes i enantioselectives de *N*-(2-azidoacetil) tioimides amb acetals dimetílics aromàtics catalitzades per complexos quirals de Ni(II)



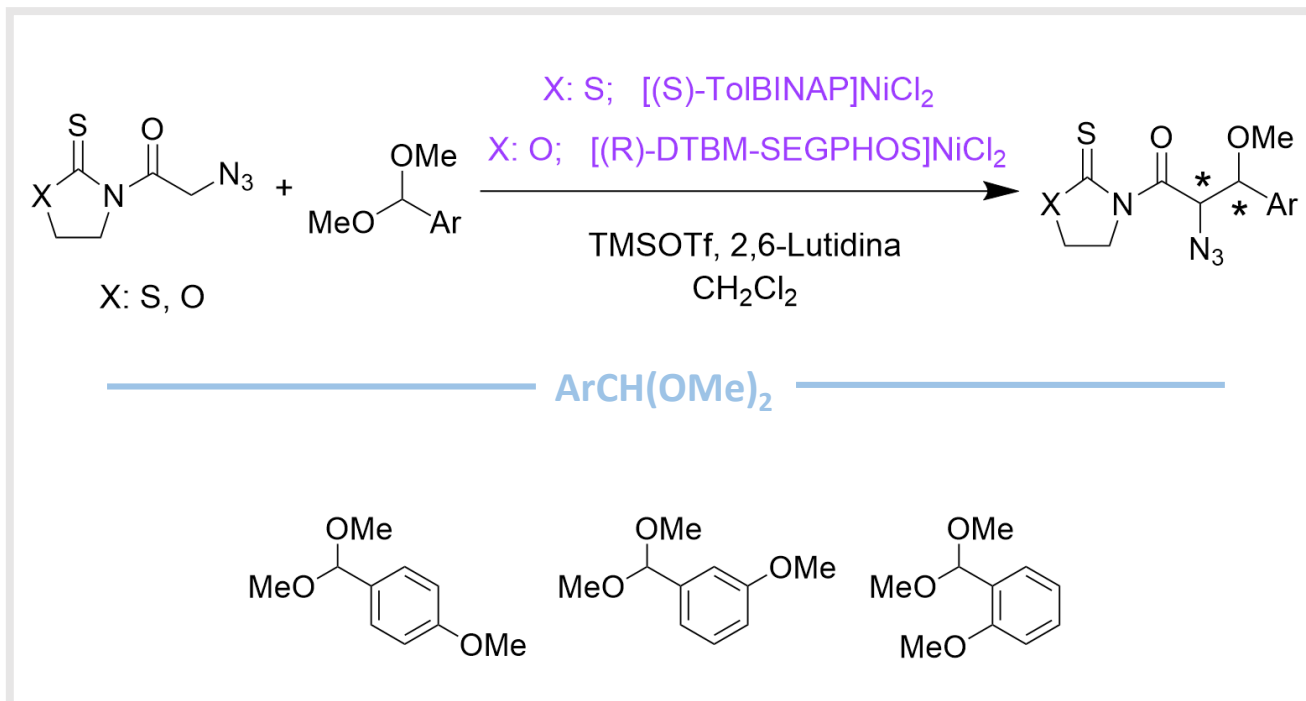
Andrea Suárez-Herrera; Miguel Mellado-Hidalgo; Pedro Romea; Fèlix Urpí

Departament de Química Inorgànica i Orgànica. Secció de Química Orgànica

La construcció enantioselectiva d'enllaços carboni-carboni ha estat un dels aspectes clau en la síntesi orgànica durant les últimes dècades [1]. Així, la necessitat constant d'obtenir procediments més selectius i eficients ha donat lloc al desenvolupament de nous mètodes catalítics [2].

En aquest context, el nostre grup ha utilitzat catalitzadors quirals per tal de controlar la configuració de nous estereocentres en reaccions aldòliques i obtenir productes enantiomèricament purs [3].

En aquest projecte s'estudien les reaccions de tipus aldòlic directes i enantioselectives de *N*-(2-azidoacetil) tioimides catalitzades per complexos quirals de níquel(II) amb acetals dimetílics aromàtics. Aquestes reaccions permeten la construcció d'un nou enllaç carboni-carboni i la formació simultània i controlada de dos nous estereocentres amb excel·lent excés enantiomèric dels diastereòmers majoritaris *syn* o *anti*, en funció del catalitzador.



Referències

- [1] E. M. Carreira, L. Kvaerno, *Classics in Stereoselective Synthesis*, Wiley-VCH, Weinheim, **2009**.
- [2] P. J. Walsh, M. C. Kozlowski, *Fundamentals of Asymmetric Synthesis*, Univ. Science Books, **2009**.
- [3] S. C. D. Kennington, S. F. Teloxa, M. Mellado-Hidalgo, O. Galeote, S. Puddu, M. Bellido, P. Romea, F. Urpí, G. Aullón, M. Font-Bardia, *Angew. Chem. Int. Ed.*, **2021**, *60*, 15307-15312.



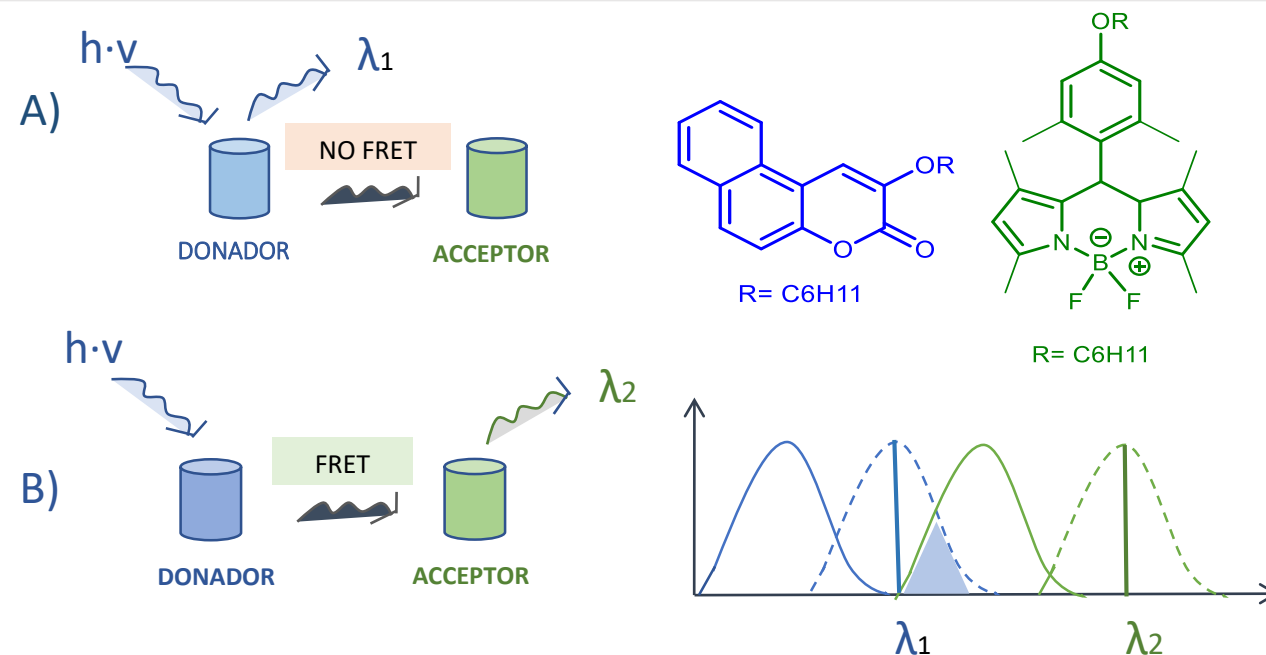
Síntesi i estudi d'un parell de fluoròfors per a elastòmers amb doble luminescència

Júlia Vergés Oms; Pedro Güixens Gallardo; Jaume Garcia Amorós; Dolors Velasco Castrillo

Departament de Química Inorgànica i Orgànica. Secció de Química Orgànica

Els elastòmers líquids cristal·lins monodomini (LSCEs) [1] són materials que combinen l'elasticitat d'un elastòmer convencional amb l'autoorganització de la fase líquida cristal·lina. Per tot això, presenten propietats úniques que permeten convertir processos mecànics, com per exemple la tensió i la pressió, en resultats òptics mesurables.

En aquest treball exposo la síntesi de diversos fluoròfors amb la finalitat de trobar un parell (acceptor/donador) que presenti transferència d'energia de ressonància Föster (FRET, *Föster resonance energy transfer*). Aquests fluoròfors s'incorporaran als LSCEs per poder observar una luminescència dual dependent de la força mecànica exercida.



Referències

[1] J. Garcia-Amorós, D. Velasco, Structural Features Guiding the Design of Liquid-Crystalline Elastomeric Fluorescent Force Sensors. *Appl. Syst. Innov.*, **2020**, 3(2), 22.

Ús d'AlphaFold i altres mètodes computacionals en la investigació d'una glicosiltransferasa

Òscar Vidal; Qinghua Liao; Carme Rovira

Departament de Química Inorgànica i Orgànica. Secció de Química Orgànica

Comissió de Dinamització Lingüística

UNIVERSITAT DE
BARCELONA
Facultat de Química



L'estiu passat, amb la publicació de l'article d'intel·ligència artificial AlphaFold, es va resoldre un dels problemes més importants en el camp de la biologia dels últims cinquanta anys: la predicció del plegament d'una proteïna a partir de la seva seqüència d'aminoàcids.

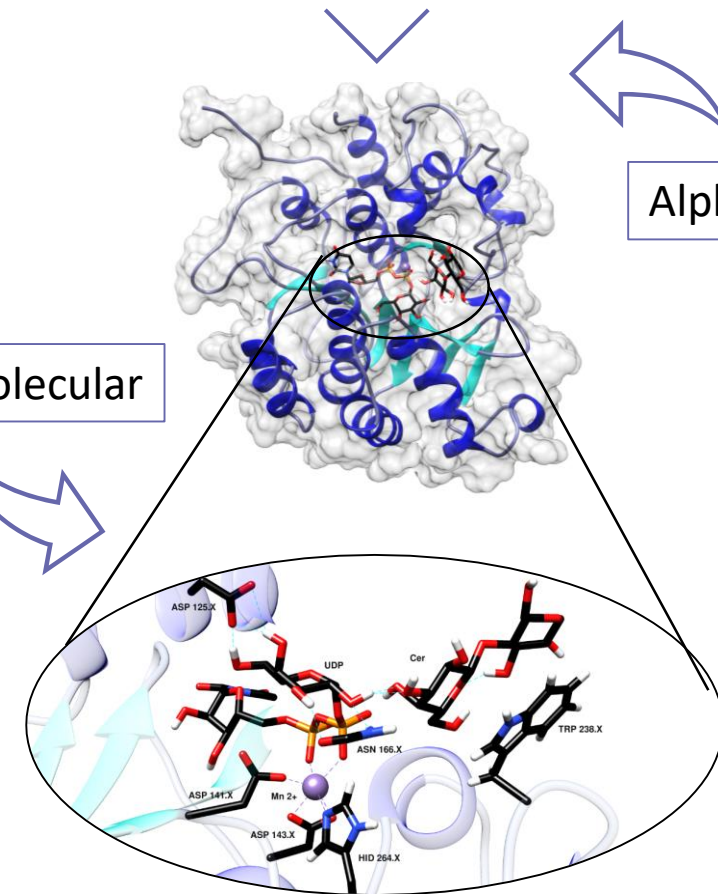
Gràcies a l'avenç tecnològic que ha suposat AlphaFold, aquest treball ha pogut predir l'estructura de l'enzim humà A4GALT i fer un estudi posterior del seu complex de Michaelis mitjançant dinàmica molecular. D'aquesta manera, s'ha pogut determinar la disposició més estable entre el lligand i l'enzim i, a més, computar quins són els principals residus que interaccionen.

Un cop assolit aquest estudi, pot ajudar a valorar diferents substàncies que en un futur poden ser possibles candidates a ser utilitzades com a inhibidors de A4GALT, el qual està relacionat amb diferents patologies com és la malaltia de Fabry.

MSKPPDLLLRLLRGAPRQVRVCTLFIIIGFKFTFFVSIMIIYWHVVGEPEKEKGQLYNLP...

AlphaFold

Dinàmica molecular



MASTERQUÍMICA XVII

Facultat de Química

Jornades de presentació de treballs experimentals
de màster de la Facultat de Química (24-26 de maig de 2022)

Organització del Masterquímica i edició del llibre de resums:
Comissió de Dinamització Lingüística de la Facultat de Química

Edició: març de 2023



Aquesta obra està subjecta a una llicència de Creative Commons
Reconeixement-NoComercial-SenseObraDerivada

