



MASTERQUÍMICA XVIII

Facultat de Química

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

Del 23 de maig a l'1 juny de 2023

LLIBRE DE RESUMS

Comissió de Dinamització Lingüística de la Facultat de Química

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
Jessica Giró Paloma, 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 Secretaria
Núria Castells Quintana, representant dels Serveis Lingüístics de la UB

Amb la col·laboració dels Serveis Lingüístics (pel que fa a assessorament lingüístic i terminologia), i el suport de Maria Òdena, becària dels Serveis Lingüístics de la Universitat de Barcelona.

Il·lustració de la portada

Mosaic de la rectoria de la Universitat de Lisboa, Portugal

MASTERQUÍMICA XVIII

Facultat de Química

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

Comissió de Dinamització Lingüística



Presentació

L'any 2005, la Comissió de Dinamització Lingüística de la Facultat de Química va impulsar la jornada Masterquímica amb la finalitat de promoure la comunicació científica en català dels treballs de recerca dels estudiants de màster de la Facultat. L'objectiu principal és 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 un breu resum acompanyat d'un resum gràfic. Per fer-ne difusió, els pòsters presentats s'exposen a la Facultat en el transcurs de les jornades i, a partir de la setena edició, se'n publica el llibre de resums en el Dipòsit Digital de la Universitat de Barcelona, dins de la col·lecció Masterquímica. A més, el gran èxit de participació en cada edició permet assolir l'objectiu de divulgar un recull de la recerca desenvolupada per investigadors novells de qualsevol de les branques de la química, de l'enginyeria química i de l'enginyeria de materials de la Facultat de Química.

Aquest curs, la divuitena jornada del Masterquímica ha tingut lloc entre el 23 de maig i l'1 de juny de 2023 i ha estat l'edició amb un nombre més gran de contribucions: ha superat la fita obtinguda a l'edició anterior i ha consolidat aquesta activitat com un recurs addicional en la formació dels estudiants de màster de la Facultat. De fet, ha acollit l'exposició de treballs de recerca vinculats a la majoria dels màsters organitzats per la Facultat de Química i pertanyents a una gran diversitat de grups de recerca.

A més, cal posar de manifest que el disseny i la capacitat comunicativa dels pòsters presentats han anat millorant en cada nova edició de les jornades. Per tant, tot i que únicament s'han lliurat tres premis als pòsters

seleccionats pel jurat, el grau d'excel·lència de la immensa majoria dels pòsters presentats en aquesta edició és molt destacable.

En un altre ordre de coses, cal dir que el Masterquímica contribueix, sense cap mena de dubte, a l'enriquiment de la terminologia catalana en l'àmbit de la química, a banda de mostrar l'ús i el context habitual on apareixen termes nous. La revisió terminològica que els Serveis Lingüístics de la UB fan dels resums que s'apleguen en aquesta col·lecció deixa algunes aportacions que volem destacar, com per exemple, propostes denominatives (*coformador*, *química de clic*) i l'explicació de la formació o procedència d'un terme (*skyrmió*, *mesogen*).

La col·laboració entre els Serveis Lingüístics i professorat de la Facultat de Química dona també un valor afegit a les jornades del Masterquímica, cosa que en algunes ocasions culmina amb la participació del Termcat en la resolució de dubtes i en la inclusió de termes en fitxes terminològiques en el Cercaterm, com ara *elastòmer de cristall líquid* i *elastòmer líquid cristal·lí monodomini*.

Trobareu aquesta informació més detallada en un nou apartat de la publicació que hem anomenat «Termes a fons».

Comissió de Dinamització Lingüística
Facultat de Química

Índex de resums

Judith Arredondo; José Luis Abad; Gemma Fabriàs <i>Síntesi de degradadors CERT fotoengabiats</i>	7	Mar Caballé; Carlos Mario Olaya; Joaquim Serra; Sergi Astals; Mònica Martínez <i>Avaluació de la biodegradació anaeròbica d'un polihidroxicanoat (PHA)</i>	13	Arnau Cortés Llamas; Stefan Thomas Bromley; Jordi Ribas Ariño <i>Control de la conjugació π mitjançant isomeritzacions induïdes per camp elèctric</i>	19
Cristina Bello-Quiñones; Eduard Balaguer-Garcia; Pere Romea; Fèlix Urpí <i>Aminoxilació en γ de compostos N-acil β,γ-insaturats amb TEMPO catalitzada per coure(II)</i>	8	Eloi Canadell i Soler; Jordi H. Badia i Córcoles; Eliana Ramírez Rangel <i>Síntesi de catalitzadors bifuncionals emprant resines de bescanvi iònic</i>	14	Matías A. Cuello Ramos; David Santos; J. Pablo Salvador; Núria Pascual; M. Pilar Marco <i>Síntesi, bioconjugació i desenvolupament d'anticossos per a la detecció de melamina en llet</i>	20
Emma Bello; Eirini Tarelli; Clara Ràfols; Elisabet Fuguet; Rafael Barbas; Rafael Prohens <i>Formulació de cocrystals de la vitamina D₂ per millorar-ne l'estabilitat fotoquímica</i>	9	Maria Casas; Maria Tindara; Xavier Gómez; Xavier Rovira; Amadeu Llebaria <i>Síntesi de lligands fotocommutables per modular l'activitat dels receptors de membrana amb llum</i>	15	Ingrid Delgado Aguilera; Bart Limburg <i>Síntesi de díades de porfirines per a la utilització en transport electrònic fotoinduït en liposomes</i>	21
Josep Boter Carbonell; Mohamed Amazian El Moussaoui; Teresa Andreu Arbella; Maria Sarret Pons <i>Recobriments de AuCuIn obtinguts amb corrent polsant a partir d'un bany electrolític sense additius</i>	10	Tuo Chen; Elektra Mavromatidou; Alexandr Shafir <i>Nous precursors basats en iode(III) per a la síntesi de radiotraçadors</i>	16	Iván Díaz Redondo; Alberto Cruz Alcalde; Núria López Vinent <i>Tractament d'efluents d'aigües residuals emprant clor activat per mitjà de radiació solar</i>	22
Xavier Bravo Serres; Jordi Puig Bosch; Ben Bradshaw <i>Acoblament d'heterocicles amb èters mitjançant la reacció de Minisci</i>	11	Javier Ciudad Moreno; Alex Tarancón; Héctor Bagán <i>Mesura ràpida de ²¹⁰Pb en aigües amb una resina escintil·ladora</i>	17	Mar Duran; Valentina Piras; Maria Perez; Maria Mercedes Amat <i>Síntesi enantioselectiva dels derivats de l'espiro[indol-3,1- indolizina]</i>	23
Elisabet Buixadera; Dídac Navarro; Jordi Hug Badia <i>Terres rares en pols de carreteres: caracterització per identificar fonts i riscs associats</i>	12	Joan Conejos Jalencas; Anna M. Costa Arnau; Jaume Vilarrasa Llorens <i>Models de metàtesi encreuada per a la síntesi de l'amfidinolida B₂</i>	18	C. Egidio-Perianes; Oscar Nuñez; Sònia Sentellas <i>Caracterització i autenticació de mels mitjançant metodologies analítiques basades en LC-UV</i>	24

Josep Falcó Falcó; Lourdes Mestres; Xavier Vendrell <i>Modificació de fases MAX Ti_3AlC_2 per a la reducció catalítica de CO_2</i>	25	Alex Mampel Moreno; Oriol Galeote; Anna M. Costa; Pere Romea; Fèlix Urpí <i>Reaccions aldòliques organocatalítiques d'aldehids α,β-insaturats</i>	31	Margot Paco-Chipana; Ángela E. Centeno-Lopez; Haruna L. Barazorda-Ccahuana; Francesc Mas; Sergio Madurga <i>Efecte dels additius en la contaminació de nanoplàstics i metalls pesants en efluent andins</i>	37
Arnau Garcia Duran; Maria Fumanal Quintana <i>Separació i transport de càrrega en COFs bidimensionals per a optoelectrònica</i>	26	Nerea Morante del Pino; Xavier Vendrell Villafruela; Lourdes Mestres Vila <i>Materials ferroelèctrics per a condensadors d'emmagatzematge d'alta energia</i>	32	Enric Pasamón Boscà; Juan-Bautista Blanco Canosa <i>Nous enfocaments en la síntesi de pèptids en fase sòlida</i>	38
Pere Garriga-Cazorla; Ciril Jimeno; Jordi Solà; Daniel Carbajo; Ignacio Alfonso <i>Sistemes covalents dinàmics aplicats a biologia i catàlisi</i>	27	Ariana Neyra-Pérez; Yuzelfy Mendoza-Gamero; Albert Romano-Rodríguez; Daniel Sainz-Garcia <i>Marc metal·loorgànics (MOFs) derivats del trifenilè per a aplicacions en catàlisi verda</i>	33	Carla T. P. Coelho; Joaquim Serra; Socorro Vázquez; Elena Xuriguera; Mònica Martínez <i>Reforç amb fibres de filaments de PLA i avaluació dels riscos del procés d'obtenció i impressió 3D</i>	39
Pau Guillamon; Xavier Ariza; Jordi Garcia; Rosalía Rodríguez; Jesús García-Chica; West Kristian D. Paraiso; Sabina Quader <i>Síntesi del C75-O com a potencial agent antitumoral i anorèctic</i>	28	Diego Ontiveros Cruz; Carme Sousa Romero; Francesc Viñes Solana <i>MXens com a fotocalitzadors del trencament de l'aigua</i>	34	Roger Rafel; Jaume Garcia-Amorós; Dolores Velasco <i>Estudi mecanofluorescent d'LSCE amb nous entrecreadors</i>	40
Marc Jurkiewicz; Rodrigo Soto; Jordi Hug Badia <i>Termodinàmica de la síntesi del biolubricant levulinat d'octil a partir d'àcid levulínic i 1-octanol</i>	29	Yaël Ortiz Romero; Alex Tarancón; Héctor Bagán <i>Preparació d'una nova resina escintil·ladora impresa per a la mesura de glucosa marcada amb ^{14}C</i>	35	Laura Ribas; D. Serraïma; M. Vidal; A. Rigol <i>Modelització de la sorció del ^{210}Po en sòls</i>	41
Manel Madrid-Valero; Adrián Gómez-Sánchez; Anna de Juan; Mónica Marro <i>Estudi dels efectes de la congelació i l'acció crioprotectora de la sacarosa en bacteris làctics mitjançant imatge hiperespectral i quimiometria</i>	30	Javier Pacheco; Raimundo Gargallo <i>Detecció d'oligonucleòtids mitjançant la formació d'estructures triplex i nanoclústers de Ag fluorescents</i>	36	Carlos Riego-Mejías; Marina Bellido; Xavier Verdaguer; Antoni Riera <i>$Al(C_6F_5)_3$, un nou àcid de Lewis per a la isomerització regioselectiva d'oxetans</i>	42

Miguel Rodríguez Fórneas; Joaquim Crusats Aliguer <i>Síntesi de porfirines amfifiliques meso-5,15-bis(triazol-4-il)substituïdes autoacoblables</i>	43	Xènia Tarrach; Miguel Mellado-Hidalgo; Pedro Romea; Fèlix Urpí <i>Síntesi enantioselectiva d'aldols protegits a partir de N-acil-tioimides i acetals propargílics</i>	49
Paula Rodríguez Marijuán; Xavier Companyó <i>Desenvolupament d'un nou mètode electrocatalític per a l'α-arilació d'oxazolones</i>	44	Diana Maria Tenica; Paul Lloyd-Williams; Jordi García Gómez <i>Síntesi de lligands pirazòlics per a la complexació amb metalls i l'aplicació posterior com a suport físic per a qbits</i>	50
Daniel Rozúa; Olga Jáuregui; Francisco Javier Santos; Encarnación Moyano <i>Separació i identificació de PFAS mitjançant IMS integrat a UHPLC-MS/MS</i>	45	Joel Torres Andrés; Jordi Ignés-Mullol <i>Partícules col·loïdals virtuals en cristalls líquids quirals</i>	51
Camila Sánchez; Jaume Garcia; Dolores Velasco <i>Síntesi i estudi d'azocompostos fotoactius per al seu ús en dispositius TFT</i>	46	Daniel Valero; Pablo M. Blanco; Francesc Mas; Sergio Madurga <i>Simulació de nanogels termosensibles a la mesoescala</i>	52
Martí Sidro; Yisong Wen; Antoni Riera; Xavier Verdaguer <i>Síntesi de 3,3-diarilpropilamines quirals i derivats biològicament actius</i>	47	Ruiyuan Wang; Olga Jáuregui; Luis Puignou; Encarnación Moyano <i>Identificació i caracterització de proantocianidines en extracte natural per UHPLC-Ion mobility-HRMS</i>	53
Júlia Soler Vilà; Alessandro Sorrenti <i>Autoassemblatge dissipatiu de porfirina basat en una xarxa polimèrica supramolecular porosa</i>	48	Termes a fons	54

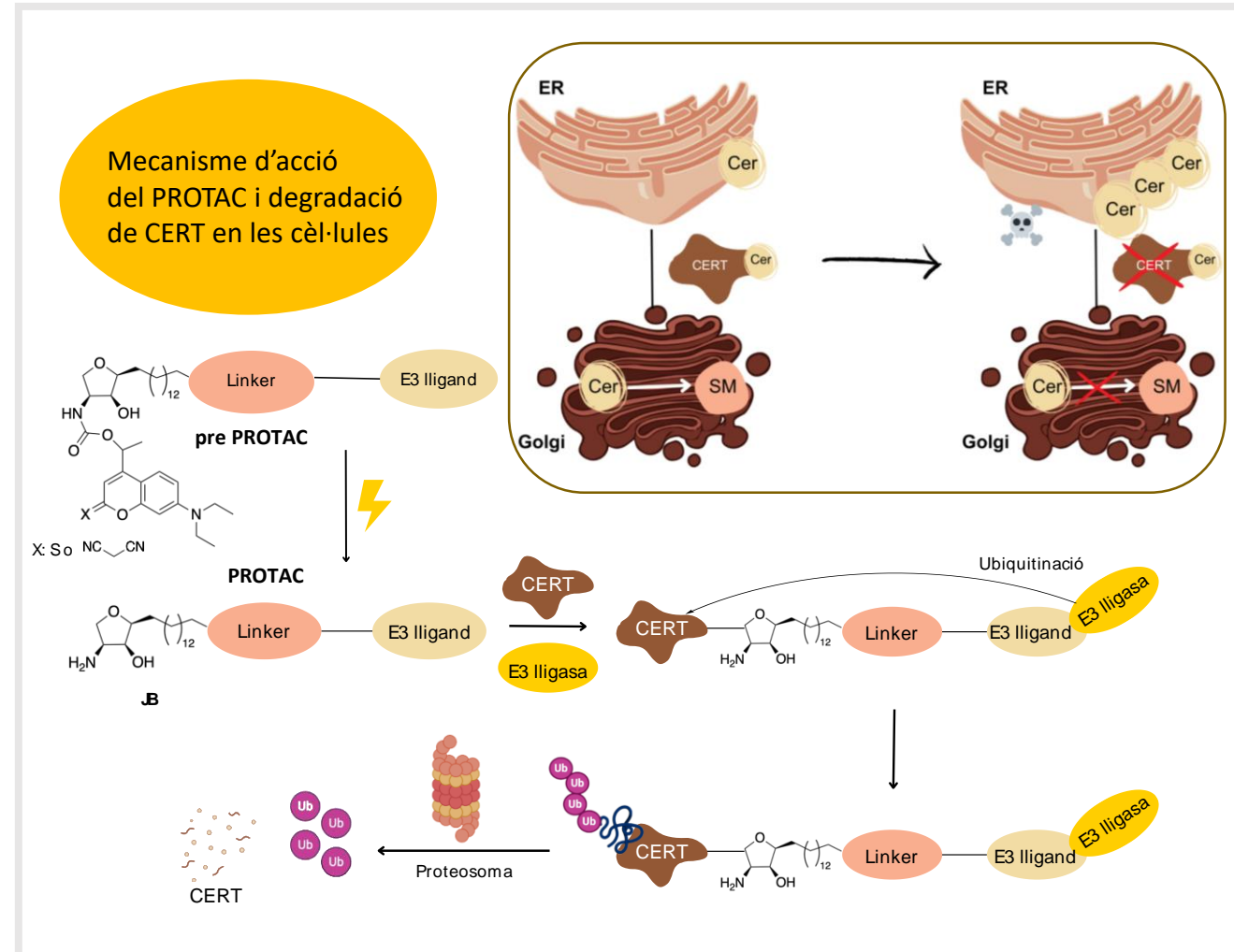


Síntesi de degradadors CERT fotoengabiats

Judith Arredondo; José Luis Abad; Gemma Fabrià
 Institut de Química Avançada de Catalunya (IQAC-CSIC)

La proteïna de transport de ceramides (CERT) transfereix les ceramides des del reticle endoplasmàtic fins a l'aparell de Golgi per convertir-les en esfingomielina. Les ceramides són supressores de tumors en gairebé tots els tipus de càncer, mentre que l'esfingomielina protegeix les cèl·lules de la mort induïda per les ceramides. La inhibició de la metabolització de ceramides mitjançant CERT podria proporcionar noves estratègies per induir la mort de cèl·lules canceroses o atenuar la resistència als fàrmacs.

En el nostre grup ens centrem en la síntesi de PROTACs, que són molècules heterofuncionals que acaben degradant una proteïna d'interès. En estudis previs, s'ha demostrat que la jaspina B és un lligand de CERT i, aprofitant aquest fet, l'objectiu seria disminuir la seva citotoxicitat en cèl·lules promoguda pel grup amino lliure. Per aquesta raó, proposem la síntesi d'una jaspina B fotoactivable utilitzant grups fotolàbils per alliberar el PROTAC actiu per la degradació de CERT.





Aminoxilació en γ de compostos N -acil β,γ -insaturats amb TEMPO catalitzada per coure(II)

Cristina Bello-Quiñones; Eduard Balaguer-Garcia; Pere Romea; Fèlix Urpí

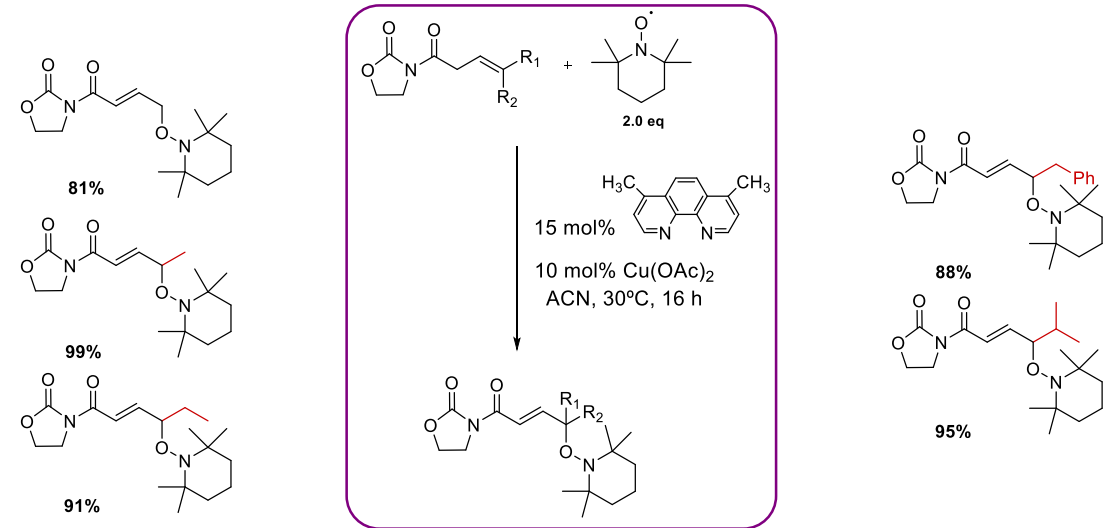
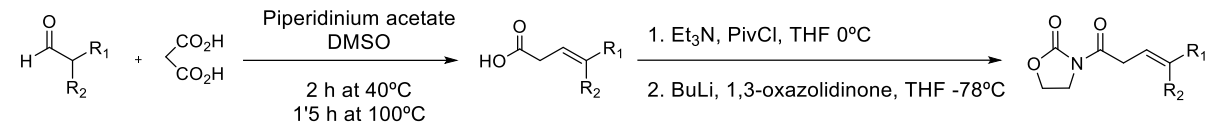
Departament de Química Inorgànica i Orgànica. Secció de Química Orgànica

Dins del ventall de mètodes per a la formació d'enllaços C—C, els quals són clau per a la síntesi orgànica, les alquilacions mitjançant un enolat metàl·lic tenen un paper crucial. En aquest àmbit, es coneixen escassos exemples que es duguin a terme a través d'un mètode homolític, el qual evitaria les limitacions de les reaccions de substitució nucleòfila [1] i l'ús de bases fortes, necessàries en les alquilacions clàssiques [2].

Recentment, al grup s'ha desenvolupat una metodologia radicalària, catalitzada per coure(II), per realitzar aminoxilacions en α fent servir TEMPO com a radical [3] i compostos N -acil amb substituents aromàtics com a substrat.

En aquest context, el treball presentat se centra a ampliar l'abast de la reacció catalítica a compostos N -acil β,γ -insaturats, en els quals l'aminoxilació serà en γ , així com a adequar-ne les condicions de reacció a aquest tipus de substrat.

Síntesi material de partida



Referències

- [1] A. F. Parsons, *An Introduction to Free Radical Chemistry*, **2000**, Blackwell Science, Oxford.
 [2] Bar, G.; Parsons, A. F. *Chem. Soc. Rev.* **2003**, 32, 251-263.
 [3] Gómez-Palomino, A.; Pellicena, M.; Romo, J. M.; Solà, R.; Romea, P.; Urpí, F.; Font-Bardia, M. *Chem. Eur. J.* **2014**, 20, 10153-10159.

Formulació de cocristalls de la vitamina D₂ per millorar-ne l'estabilitat fotoquímica



Emma Bello;¹ Eirini Tarelli;¹ Clara Ràfols;¹ Elisabet Fuguet;¹ Rafael Barbas;² Rafel Prohens²

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

² Unitat de Polimorfisme i Calorimetria. Centres Científics, Tecnològics i Científicotècnics, Universitat de Barcelona

Les vitamines són un grup molt important dins dels nutricèutics, ja que són substàncies necessàries per al bon funcionament cel·lular i el desenvolupament normal d'un ésser viu.

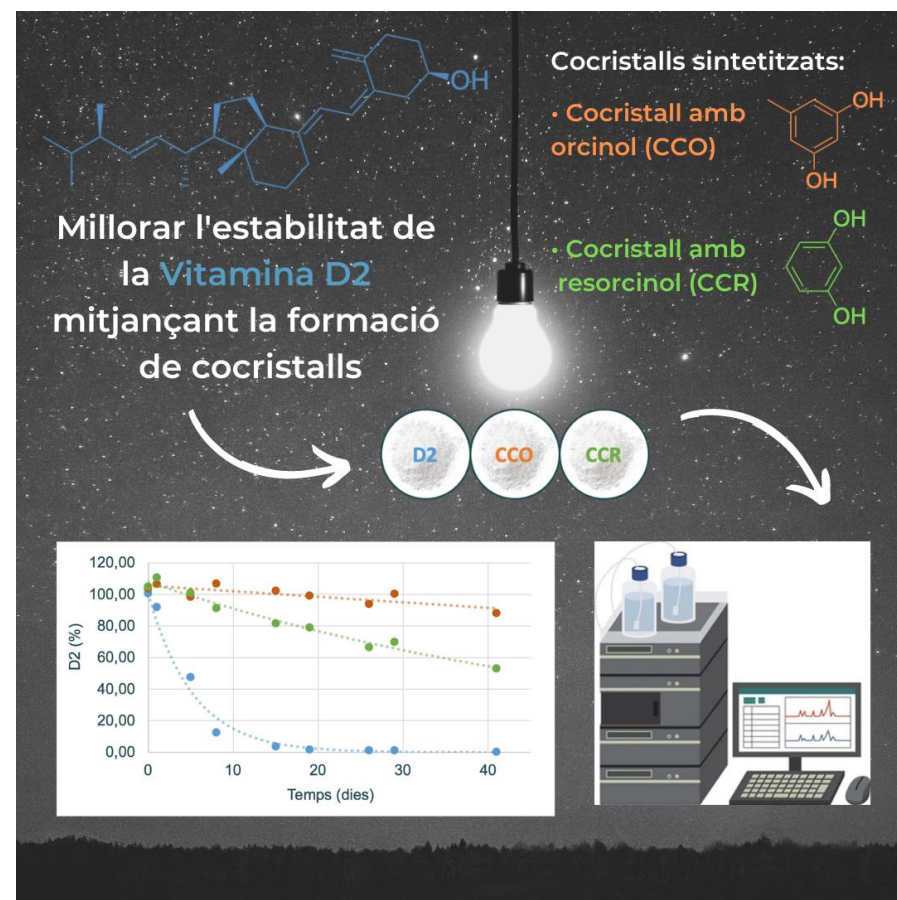
L'ergocalciferol, més conegut com a vitamina D₂, activa l'absorció intestinal del calci i manté l'equilibri entre el calci i el fòsfor en els sistemes ossis i musculars [1]. Un dels problemes químics d'aquesta vitamina és la seva baixa fotoestabilitat [2]. En aquest estudi s'ha fet la síntesi i caracterització de dos cocristalls de l'ergocalciferol, un d'ells amb orcinol i l'altre amb resorcinol, per reduir-ne la susceptibilitat a ser degradats per la llum.

Un cop sintetitzats els dos cocristalls, se n'ha examinat l'estabilitat irradiant-los amb llum a 5000 lx, i controlant el contingut de vitamina D₂ al llarg del temps a partir d'una quantificació per cromatografia líquida. S'ha demostrat que els cocristalls són menys sensibles a la degradació que la vitamina sola.

Referències

[1] Valero Zanuy, M. Á.; Hawkins Carranza, F. Metabolismo, fuentes endógenas y exógenas de vitamina D. Revista Española de Enfermedades Metabólicas Óseas 2007, 16 (4), 63-70.

[2] Li, T.-L.; Min, D. B. Stability and Photochemistry of Vitamin D₂ in Model System. J Food Science 1998, 63 (3), 413-417.



Recobriments de AuCuIn obtinguts amb corrent polsant a partir d'un bany electrolític sense additiu

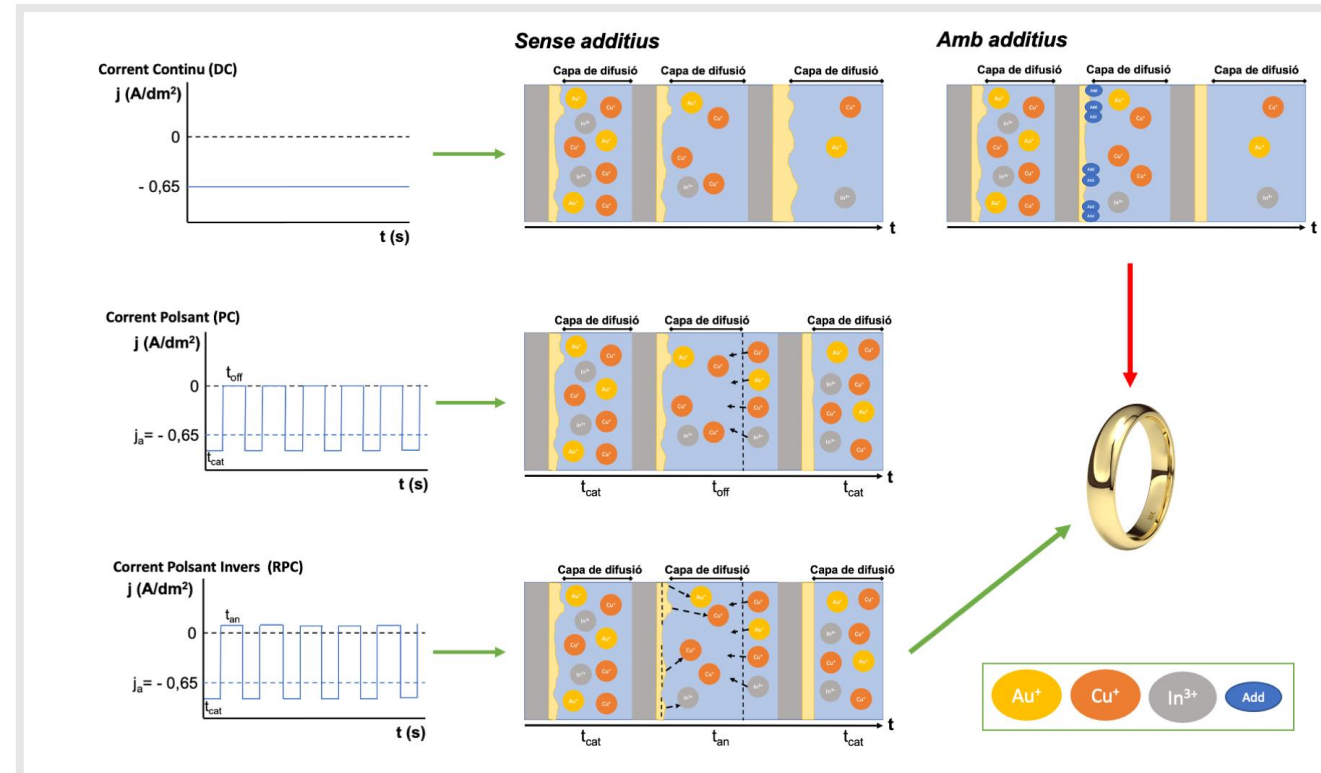


Josep Boter Carbonell; Mohamed Amazian El Moussaoui; Teresa Andreu Arbella; Maria Sarret Pons
Departament de Ciència del Materials i Química Física. Secció de Química Física

A la indústria de la joieria s'empren aliatges que permeten obtenir recobriments amb or que en milloren les propietats i en mantenen l'aparença. Un d'aquests aliatges és el de AuCuIn, obtingut per mitjà d'una deposició electroquímica [1].

En l'obtenció d'aquests recobriments, un dels problemes és que l'ús d'additiu (compostos que es degraden durant el procés electròdic) en el bany electrolític en compromet la vida útil. Aquests additiu, però, són els que asseguren la microestructura adient per produir recobriments amb la composició desitjada i amb bones propietats mecàniques i estètiques.

Es proposa l'ús d'una tècnica d'electrodeposició amb corrent polsant per obtenir dipòsits d'aspecte i propietats properes a les de l'aliatge comercial sense utilitzar additiu [2]. Els resultats han mostrat que la tècnica de corrent polsant invers, aplicant-hi un pols anòdic, permet obtenir recobriments amb característiques comparables a les dels dipòsits obtinguts amb un bany amb additiu.



Referències

[1] Giurlani, W.; Zangari, G.; Gambinossi, F.; Passaponti, et al. (2018). Electroplating for Decorative Applications: Recent Trends in Research and Development. *Coatings*, 8(8), 260.

[2] Chandrasekar, M. S.; Pushpavanam, M. (2008). Pulse and pulse reverse plating—Conceptual, advantages and applications. *Electrochimica Acta*, 53(8), 3313-3322.

Acoblament d'heterocicles amb èters mitjançant la reacció de Minisci



Xavier Bravo Serres; Jordi Puig Bosch; Ben Bradshaw

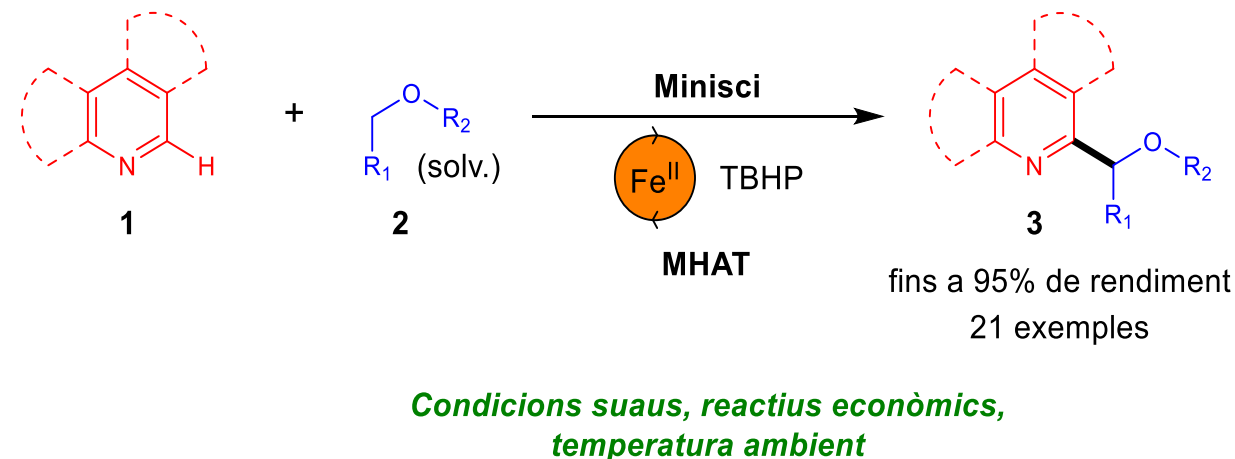
Departament de Farmacologia, Toxicologia i Química Terapèutica. Facultat de Farmàcia i Ciències de l'Alimentació

El descobriment de nous mètodes més senzills per a la construcció d'enllaços C—C és clau en la síntesi orgànica. Per això, en els darrers anys les reaccions de transferència d'àtom d'hidrogen catalitzades per metalls (MHAT) han esdevingut una eina important per desenvolupar noves transformacions per vies radicalàries [1].

Aquestes reaccions del tipus HAT es poden utilitzar per activar enllaços C(sp³)—H d'èters, els quals, per mitjà de la reacció de Minisci, acoblaran amb heterocicles deficientes d'electrons.

Minisci i d'altres ja van intentar en el passat la generació de radicals d'èters per funcionalitzar heterocicles utilitzant TBHP. Tot i això, aquestes reaccions poden patir sobreoxidació, i el seu àmbit, rendiment i selectivitat són limitats, a més de requerir condicions molt enèrgiques [2].

L'objectiu d'aquest treball és aprofundir en el descobriment recent del grup, optimitzant una reacció del tipus Minisci-MHAT sota condicions suaus a temperatura ambient.



Referències

- [1] (a) S. W. M. Crossley, R. M. Martinez, C. Obradors, R. A. Shenvi, *Chem. Rev.*, **2016**, 116 (15), 8912-9000. (b) S. A. Green, S. W. M. Crossley, J. L. M. Matos, S. Vázquez-Céspedes, S. L. Shevick, R. A. Shenvi, *Acc. Chem. Res.*, **2018**, 51 (11), 2628-2640.
- [2] (a) W. Buratti, G. P. Gardini, F. Minisci, F. Bertini, R. Galli, M. Perchinunno, *Tetrahedron*, **1971**, 27 (15), 3655-3668. (b) F. Minisci, F. Fontana, E. Vismara, *J. Heterocyclic Chem.*, **1990**, 27 (1), 79-96.

Terres rares en pols de carreteres: caracterització per identificar fonts i riscos associats

Elisabet Buixadera;¹ Dídac Navarro;² Jordi Hug Badia¹

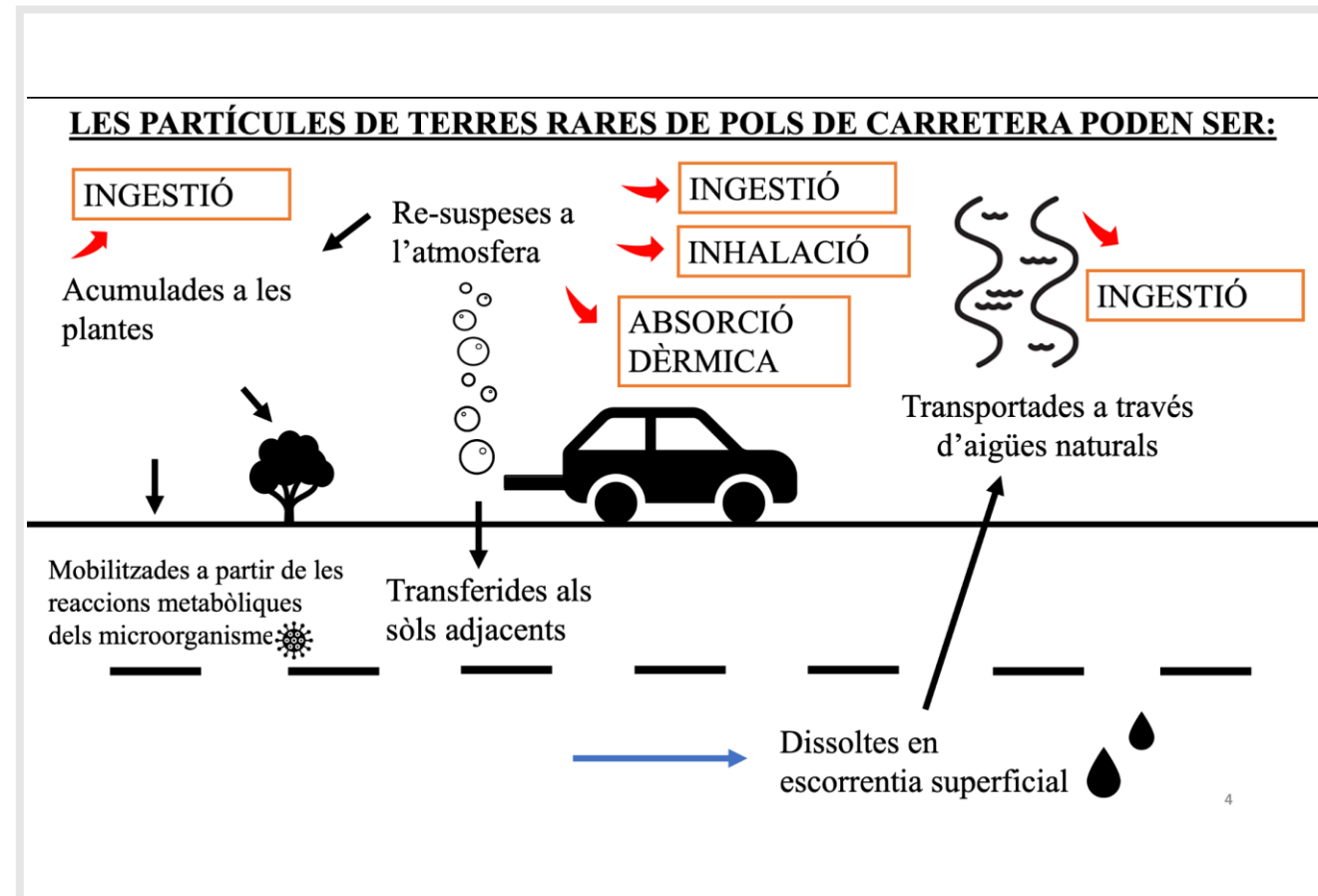
¹ Departament d'Enginyeria Química i Química Analítica. Secció d'Enginyeria Química

² Departament de Mineralogia, Petrologia i Geologia Aplicada. Facultat de Ciències de la Terra



La composició de la pols de carretera té un paper significatiu en la seva capacitat per transportar contaminants. Prové d'una barreja de fonts, incloent-hi les activitats industrials i algunes de relacionades amb el tràfic. La seva composició pot variar en funció de molts factors, i pot tenir un impacte significatiu en la qualitat de l'aire i la salut humana.

L'objectiu d'aquest projecte és caracteritzar la composició química i mineralògica de les partícules de pols de carretera i el seu impacte potencial en la salut humana i l'entorn. S'utilitzaran les característiques mineralògiques per complementar les dades químiques i identificar les procedències de les partícules de terres rares en la pols de les carreteres de Barcelona i Badalona. Barcelona té una alta densitat de vehicles, mentre que Badalona té una alta activitat industrial, cosa que les fa ideals per a l'estudi. A més, també s'avaluaran els nivells de contaminació i els riscos per a la salut, incloent-hi fonts geogèniques i antropogèniques.



Avaluació de la biodegradació anaeròbica d'un polihidroxicanoat (PHA)



Mar Caballé;^{1,2} Carlos Mario Olaya;² Joaquim Serra;¹ Sergi Astals;² Mònica Martínez¹

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

² Departament d'Enginyeria Química i Química Analítica. Secció d'Enginyeria Química

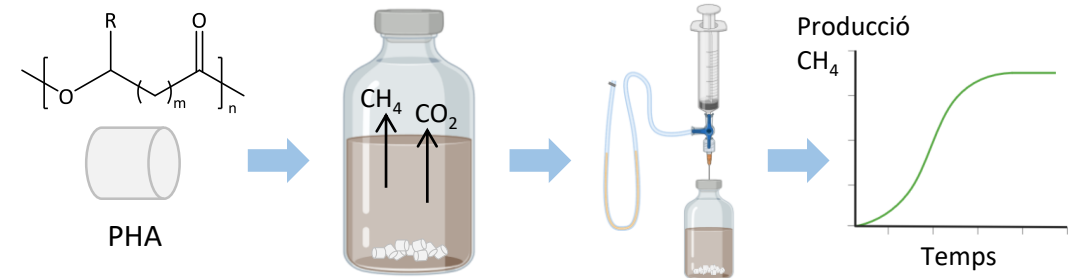
Els polihidroxicanoats (PHAs) són una família de polímers biodegradables d'origen biològic que es postulen com una alternativa sostenible als plàstics d'origen fòssil.

En aquest treball s'estudia la biodegradació anaeròbica del PHA en condicions psicròfiles (20 °C), mesòfiles (35 °C) i termòfiles (55 °C). El seguiment de la biodegradació s'ha fet mitjançant canvis en el material al llarg del temps (pes, dimensions, rugositat superficial, estructura química, etc.), així com amb el monitoratge de la producció de metà.

Els resultats experimentals mostren que el PHA estudiat és un polímer biodegradable, i que les condicions anaeròbiques mesòfiles són les que han donat una degradació més ràpida.

BIODEGRADACIÓ ANAERÒBICA DEL PHA

MONITORATGE DE LA PRODUCCIÓ DE METÀ



EVOLUCIÓ DEL PHA



Síntesi de catalitzadors bifuncionals emprant resines de bescanvi iònic

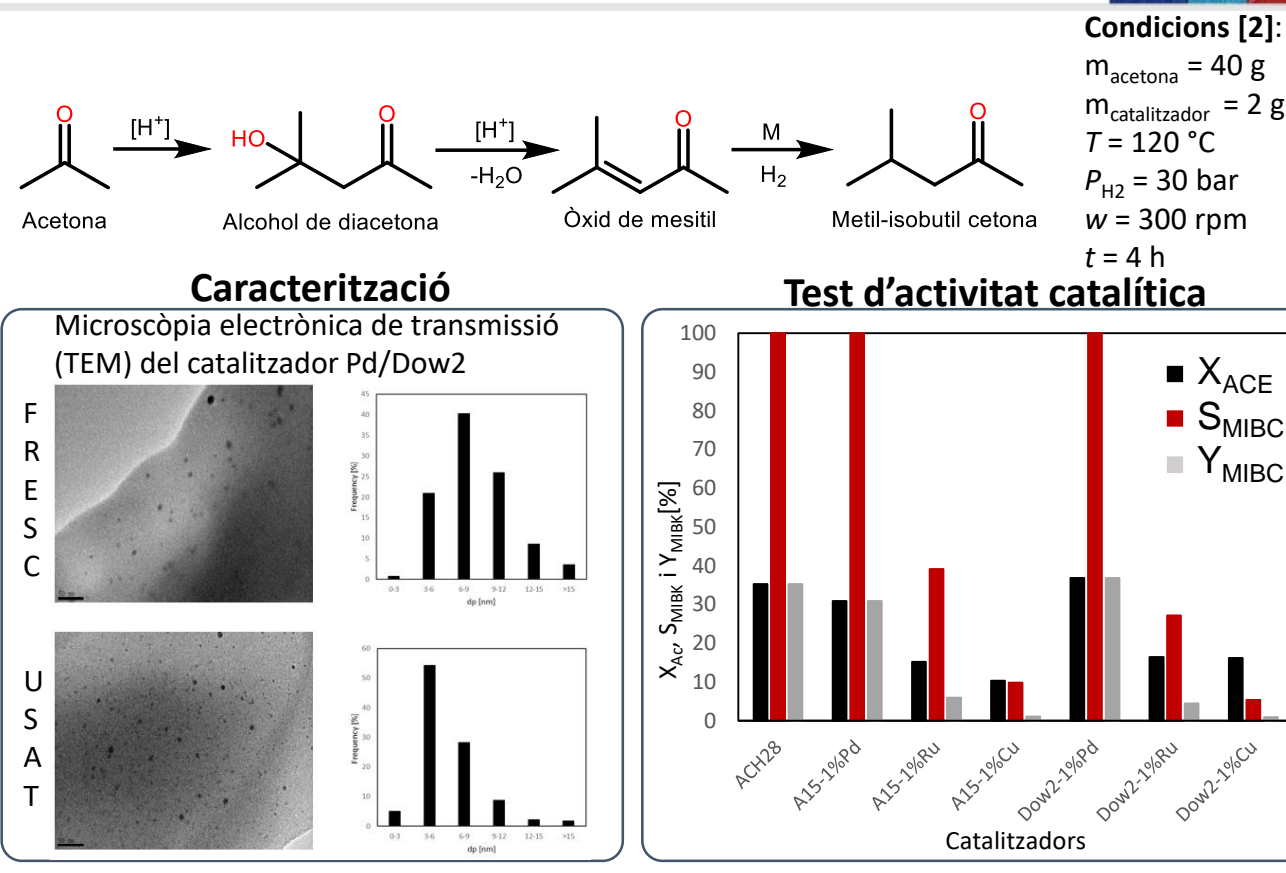


Eloi Canadell i Soler; Jordi H. Badia i Córcoles; Eliana Ramírez Rangel

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

Aquest projecte se centra en la preparació de catalitzadors bifuncionals, emprant com a suport resines de bescanvi iònic comercials per obtenir materials amb grups funcionals àcids (H^+) i metàl·lics (M).

Es van seleccionar les resines àcides Amberlyst™15 (A15), macroreticulada, i Dowex®50WX2 (Dow2), microporosa, i s'hi van introduir diferents metalls (Pd, Cu o Ru) per bescanvi iònic directe en fase aquosa [1]. La quantitat de metall introduïda va ser de l'1 % màssic, tal com es dedueix de l'anàlisi per espectrometria de masses per plasma d'acoblament inductiu (ICP-MS). Es va avaluar l'activitat catalítica dels materials sintetitzats en la reacció d'hidrogenació d'acetona (ACE) per obtenir cetona isobutil metílica (MIBC), atès que és un procés multietapa que requereix una catàlisi àcida i metàl·lica. Els resultats indiquen que els catalitzadors amb Pd són els més selectius, mentre que Dow2 és el suport amb el qual s'assolien conversions més altes.



Referències

- [1] Liguori, F.; Oldani, C.; Capozzoli, L.; Calisi, N.; Barbaro, P. *Appl. Catal. A Gen.* **2021**, 610, 117957.
[2] Talwalkar, S.; Mahajani, S. *Appl. Catal. A Gen.* **2006**, 302, 140-148.

Síntesi de lligands fotocommutables per modular l'activitat dels receptors de membrana amb llum

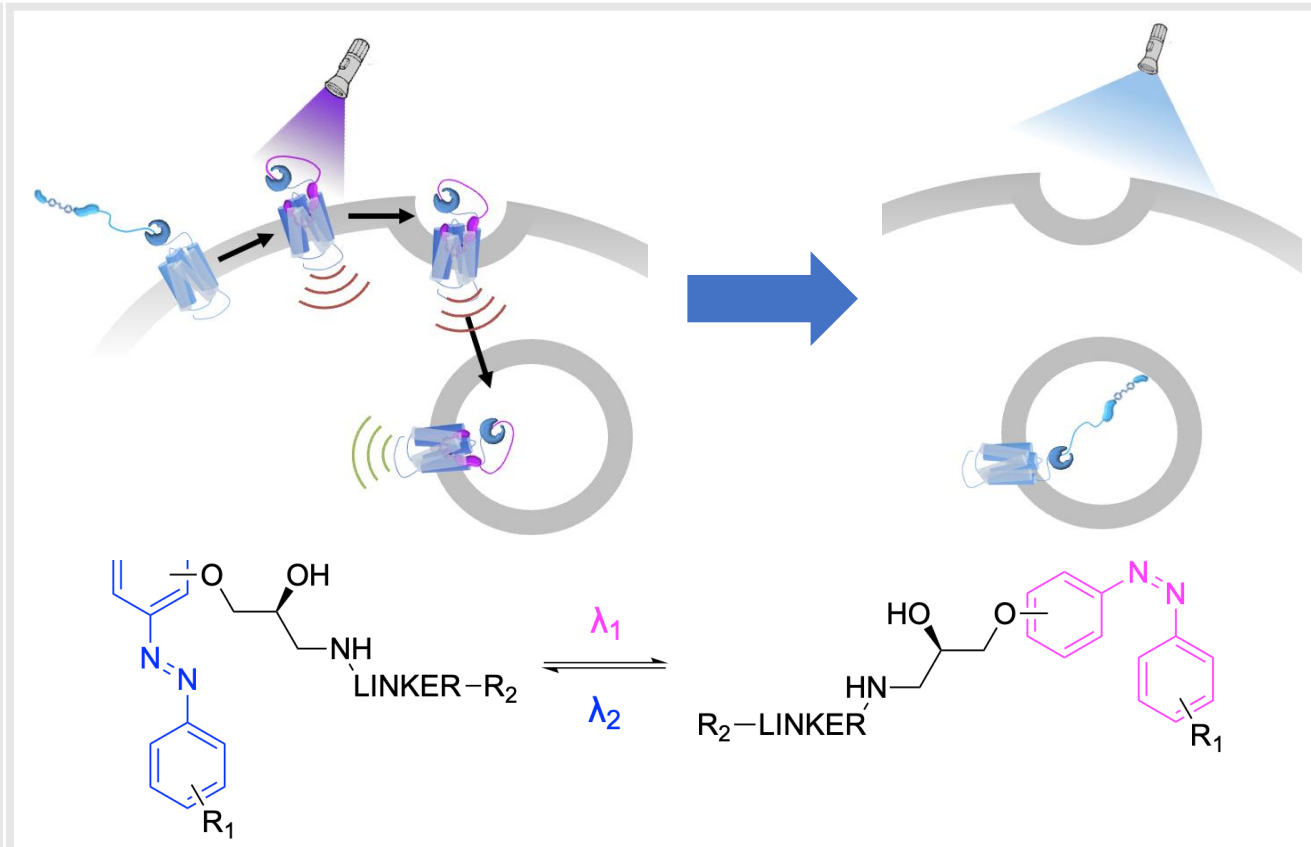


Maria Casas;^{1,2} Maria Tindara;² Xavier Gómez;² Xavier Rovira;² Amadeu Llebaria²

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

² Institut de Química Avançada de Catalunya (IQAC-CSIC), Barcelona

Recerques recents destaquen el potencial de la fotofarmacologia per estudiar els receptors acoblats a proteïnes G (GPCRs) en processos fisiològics i per al desenvolupament de nous fàrmacs. En concret, els β -adrenoreceptors són un tipus de GPCRs, i les molècules dirigides vers aquests receptors tenen un paper crucial en la regulació del sistema respiratori i les funcions cardíaques. Així doncs, en aquest projecte s'han desenvolupat lligands fotocommutables per estudiar la senyalització i les implicacions fisiològiques dels β -ARs. Els lligands dissenyats inclouen un azobenzè, de manera que, en ser il·luminats a diferents longituds d'ona, s'intercanvien entre dos estats (*cis* i *trans*), cosa que provoca canvis en la geometria i la densitat electrònica de la molècula. En conseqüència, hi ha una alteració de les propietats químiques del compost i de la seva afinitat pel receptor. Això proporciona un control espaciotemporal de l'activitat dels β -ARs amb llum, preveu efectes secundaris i permet definir tractaments terapèutics més precisos.



Referències

- [1] A. Duran-Corbera, J. Catena, M. Otero-Viñas, A. Llebaria, X. Rovira, *J. Med.Chem.*, **2020**, *63*, 8458-8470.
- [2] D. Weichert, P. Gmeiner, *ACS Chem. Biol.*, **2015**, *10*, 1376-1386.

Nous precursors basats en iode(III) per a la síntesi de radiotraçadors



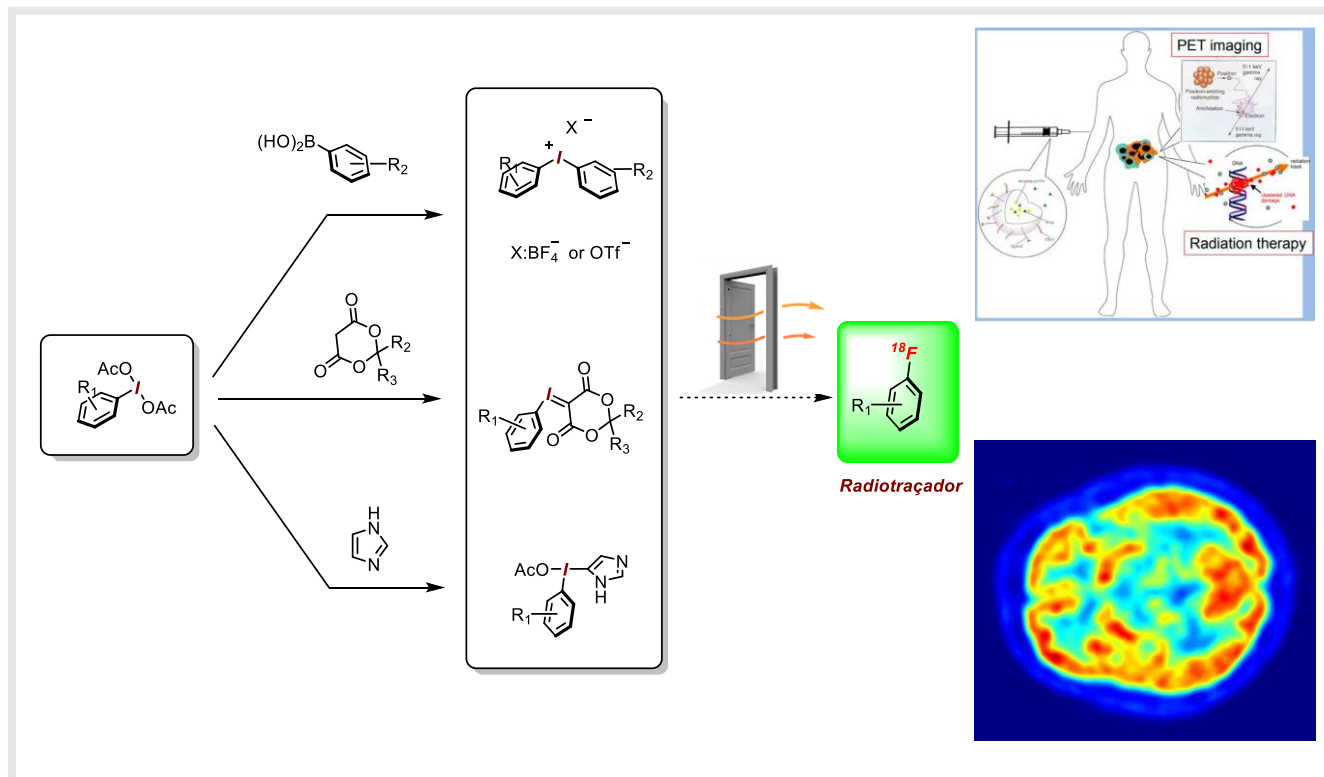
Tuo Chen;^{1,2} Elektra Mavromatidou;¹ Alexandr Shafir¹

¹ Departament de Química Biològica. Institut de Química Avançada de Catalunya (IQAC-CSIC), Barcelona

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

La tomografia per emissió de positrons (PET) és una eina potent de diagnòstic i investigació biològica per imatge que requereix l'ús d'una substància radioactiva (radiotraçador). Els radiotraçadors que contenen l'isòtop ^{18}F són especialment populars a causa de la vida mitjana de desintegració raonablement «llarga» d'uns 110 min. Per aquest motiu, aquests radiotraçadors s'han de generar a través de temps de reacció curts, amb la introducció de l'àtom ^{18}F de manera prevalent en les últimes etapes de la síntesi. La radiofluoració de compostos alifàtics es pot aconseguir mitjançant una reacció $\text{S}_{\text{N}}2$ clàssica [1], mentre que la formació d'un enllaç $\text{C}_{\text{sp}^2}\text{-F}$ aromàtic continua sent un repte.

Segons recerques prèvies [2, 3], en aquest projecte s'exploren diverses metodologies basades en estructures de iode(III) per tal d'aconseguir fluoracions aromàtiques, incloent-hi els anomenats *ilurs de iodoni* i les sals de diariliodoni.



Referències

- [1] Bratteby, K.; Shalgunov, V.; Herd, M. M., *ChemMedChem* **2021**, *16*, 1-12.
- [2] Chun, J. H.; Lu, S. Y.; Lee, Y. S.; Pike, V. W., *J. Org. Chem.* **2010**, *75*, 3332-3338.
- [3] Wu, Y.; Izquierdo, S.; Vidossich, P.; Lledós, A.; Shafir, A., *Angew. Chem. Int. Ed.* **2016**, *55*, 7152-7156.



Mesura ràpida de ^{210}Pb en aigües amb una resina escintil·ladora

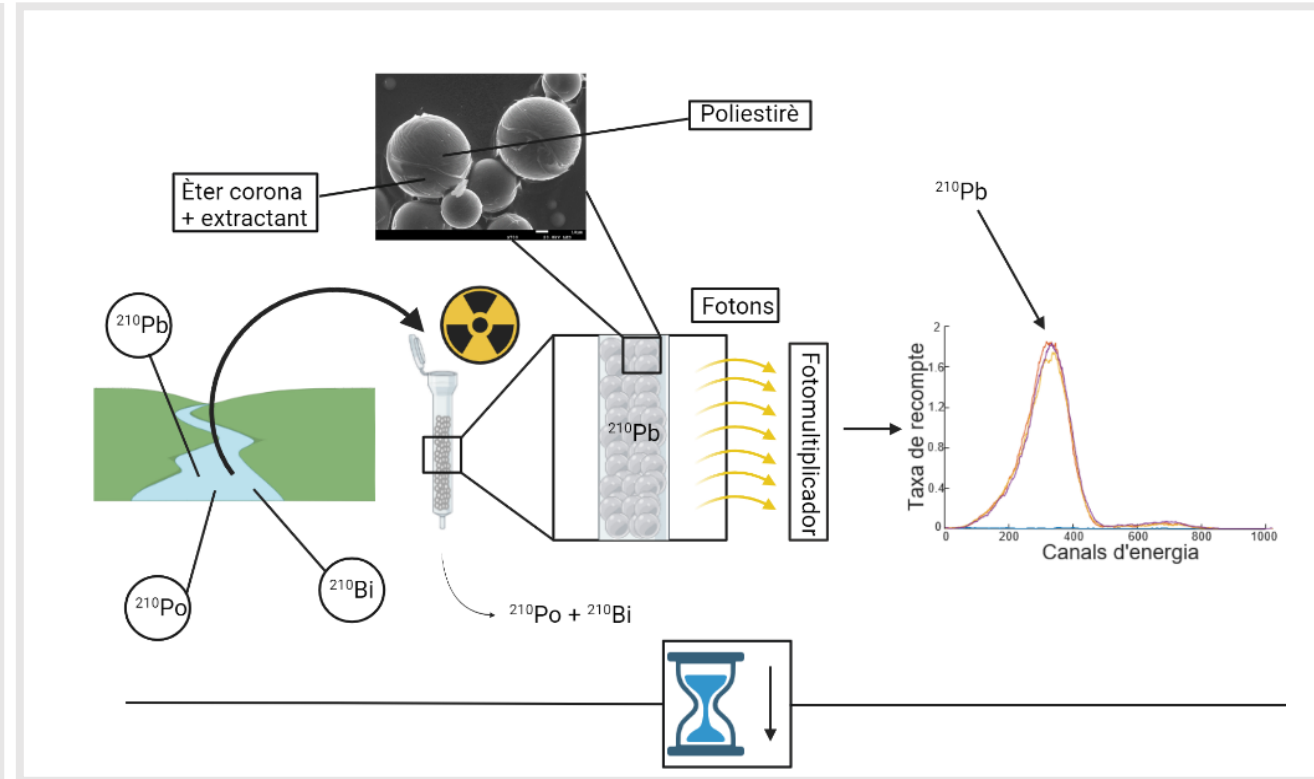
Javier Ciudad Moreno; Alex Tarancón; Héctor Bagán

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

El ^{210}Pb és un radioisòtop natural provinent del ^{238}U i emissor beta que es troba en aigües a baixes concentracions juntament amb altres radionúclids [1]. Tot i això, i degut a la seva perillositat, la legislació estableix uns límits màxims permesos (0,2 Bq/L), molt baixos en comparació amb altres radionúclids.

En aquest treball s'han emprat resines escintil·ladores (PSresin) incloses en un cartutx en fase sòlida, les quals permeten la retenció de ^{210}Pb i la mesura en una sola etapa. Les PSresin són microesferes de poliestirè amb soluts fluorescents encapsulats recobertes per un extractant selectiu de ^{210}Pb (èter corona dissolt en un líquid iònic). Aquest mètode és selectiu i ràpid, i redueix el consum de reactius respecte dels mètodes habituals [2].

En el treball s'hi ha optimitzat la proporció d'extractant i microesferes i el volum de mostra que proporcionen valors d'eficiència, retenció i límits de detecció òptims. Finalment, el mètode desenvolupat s'ha aplicat a mostres d'aigua.



Referències

- [1] C. Landstetter, M. Sinojmeri, C. Katzlberger, A. Achatz, Determination of ^{90}Sr and ^{210}Pb in freshwater fish in Austria, *J. Radioanal. Nucl. Chem.*, 299 (2014) 787-790.
 [2] E. Lluch, J. Barrera, A. Tarancón, H. Bagán, J. F. García, Analysis of ^{210}Pb in water samples with plastic scintillation resins, *Anal. Chim. Acta*, 940 (2016) 38-45.



Models de metàtesi encreuada per a la síntesi de l'amfidinolida B₂

Joan Conejos Jalencas; Anna M. Costa Arnau; Jaume Vilarrasa Llorens

Departament de Química Inorgànica i Orgànica. Secció de Química Orgànica

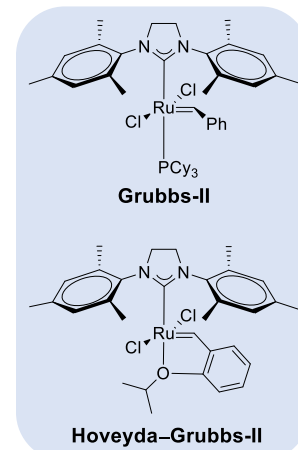
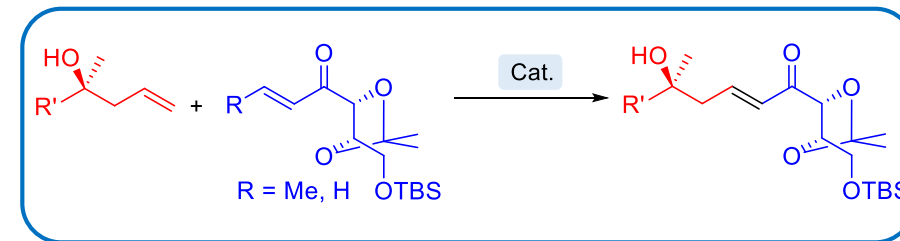
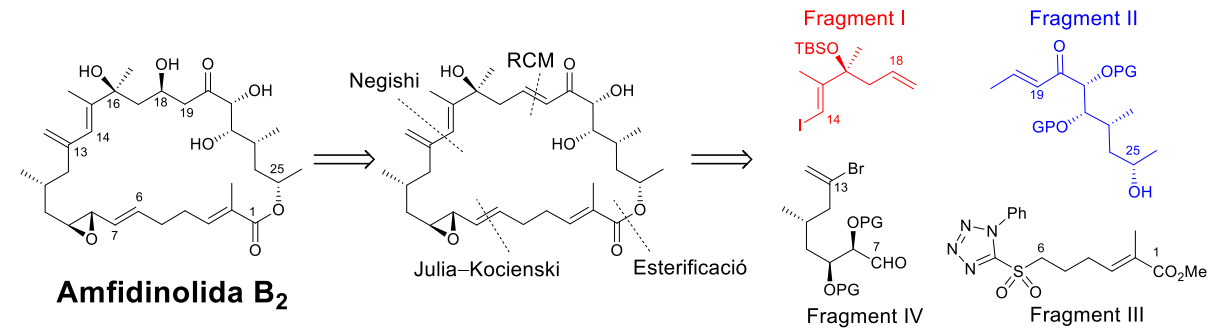
L'amfidinolida B₂ és un macròlid aïllat d'un dinoflagel·lat marí a Brewers Beach (Illes Verges) [1]. És un compost d'especial interès en síntesi degut a la seva estructura complexa, que encara no es coneix amb total certesa, i a la seva citotoxicitat [2].

El nostre grup de recerca va iniciar fa uns anys la síntesi total de l'amfidinolida B₂ i ja se n'han sintetitzat tots els fragments [3]. El pas següent és estudiar-ne la unió.

L'objectiu d'aquest treball és sintetitzar models del fragment II i assajar el seu acoblament encreuat amb diversos substrats a fi de trobar les condicions òptimes d'aquesta reacció.

Referències

- [1] Bauer, I.; Maranda, L.; Shimizu, Y. et al. *J. Am. Chem. Soc.* **1994**, *116*, 2657-2658.
 [2] Kobayashi, J.; Kubota, T. *J. Nat. Prod.* **2007**, *70*, 451-460.
 [3] Cascales Jiménez, V. Tesi doctoral. *Síntesi total de la Anfidinolida B₂*, Universitat de Barcelona, **2021**.



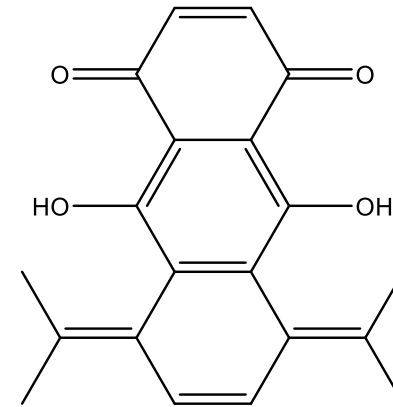


Control de la conjugació π mitjançant isomeritzacions induïdes per camp elèctric

Arnau Cortés Llamas; Stefan Thomas Bromley; Jordi Ribas Ariño

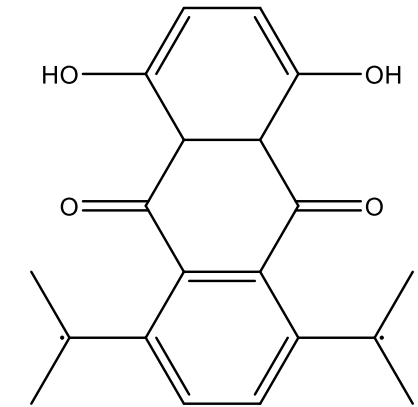
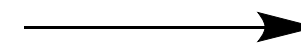
Departament de Ciència de Materials i Química Física. Secció de Química Física

L'ús de camps elèctrics en la química per catalitzar reaccions i promoure isomeritzacions ha despertat un gran interès els darrers anys, perquè permet dissenyar processos químics més eficients i sostenibles, i crear nous dispositius electrònics més eficaços. El control de la conjugació π en sistemes orgànics mitjançant camps elèctrics s'ha proposat com una forma de crear nous dispositius electrònics basats en materials orgànics commutables. Se n'ha comprovat la viabilitat, mitjançant diversos experiments duts a terme en aquest projecte, a partir d'unes estructures orgàniques concretes. Aquestes estructures de naturalesa Kekulé (existència d'una forma no radicalària i d'una de radicalària) poden tenir fins a cert punt la seva conjugació del sistema π alterada, a causa d'un procés de tautomerització i isomerització.



Singlet State
 $S = 0$

Electric Field



Triplet State
 $S = 1$

Síntesi, bioconjugació i desenvolupament d'anticossos per a la detecció de melamina en llet



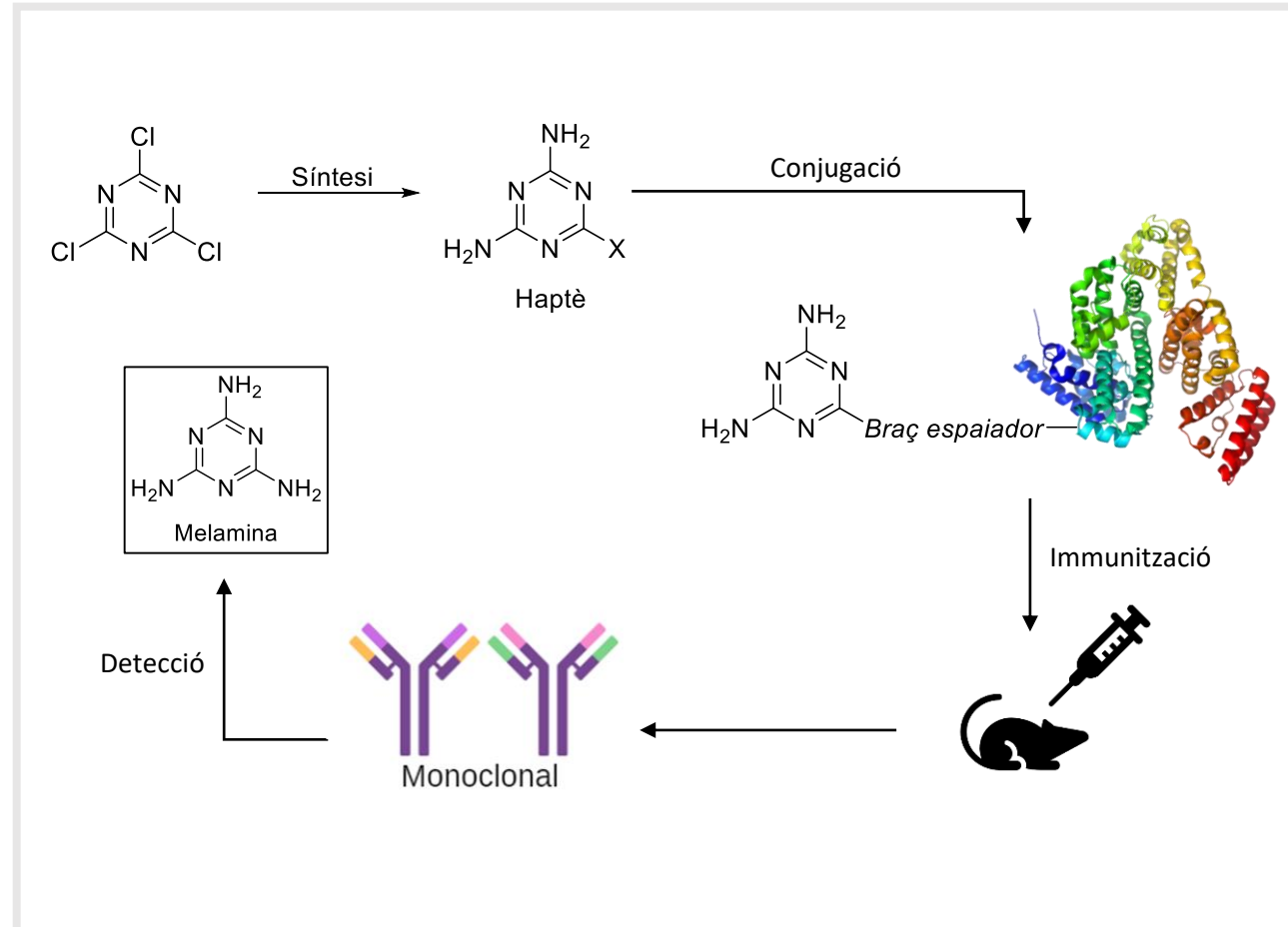
Matías A. Cuello Ramos;^{1,2} David Santos;^{1,2} J. Pablo Salvador;^{1,2} Núria Pascual;^{1,2} M. Pilar Marco^{1,2}

¹ Institut de Química Avançada de Catalunya (IQAC-CSIC), Barcelona

² Centre d'Investigació Biomèdica en Xarxa. Bioenginyeria, Biomaterials i Nanomedicina (CIBER-BBN)

El 2008 es van detectar adulteracions a la llet infantil a la Xina, on s'hi afegia melamina per augmentar el contingut real de proteïna, fet que va provocar danys adversos en la salut, així com la prohibició d'aquests productes d'importació. Per detectar de manera més sensible, específica, ràpida i fiable la presència de melamina en els productes làctics per a lactants, es requereixen mètodes quantitius per a la seva detecció específica, com el mètode ELISA.

En aquest projecte es farà la síntesi i la immunització posterior d'un haptè de melamina per generar anticossos monoclonals capaços de detectar melamina en mostres de llet. A més, es durà a terme la síntesi d'haptens de competició, amb la intenció d'optimitzar els límits de detecció, donat que la melamina té una legislació que implica un límit màxim de residus inferior a 1 ppm en llet i fórmules per a lactants.



Síntesi de díades de porfirines per a la utilització en transport electrònic fotoinduït en liposomes

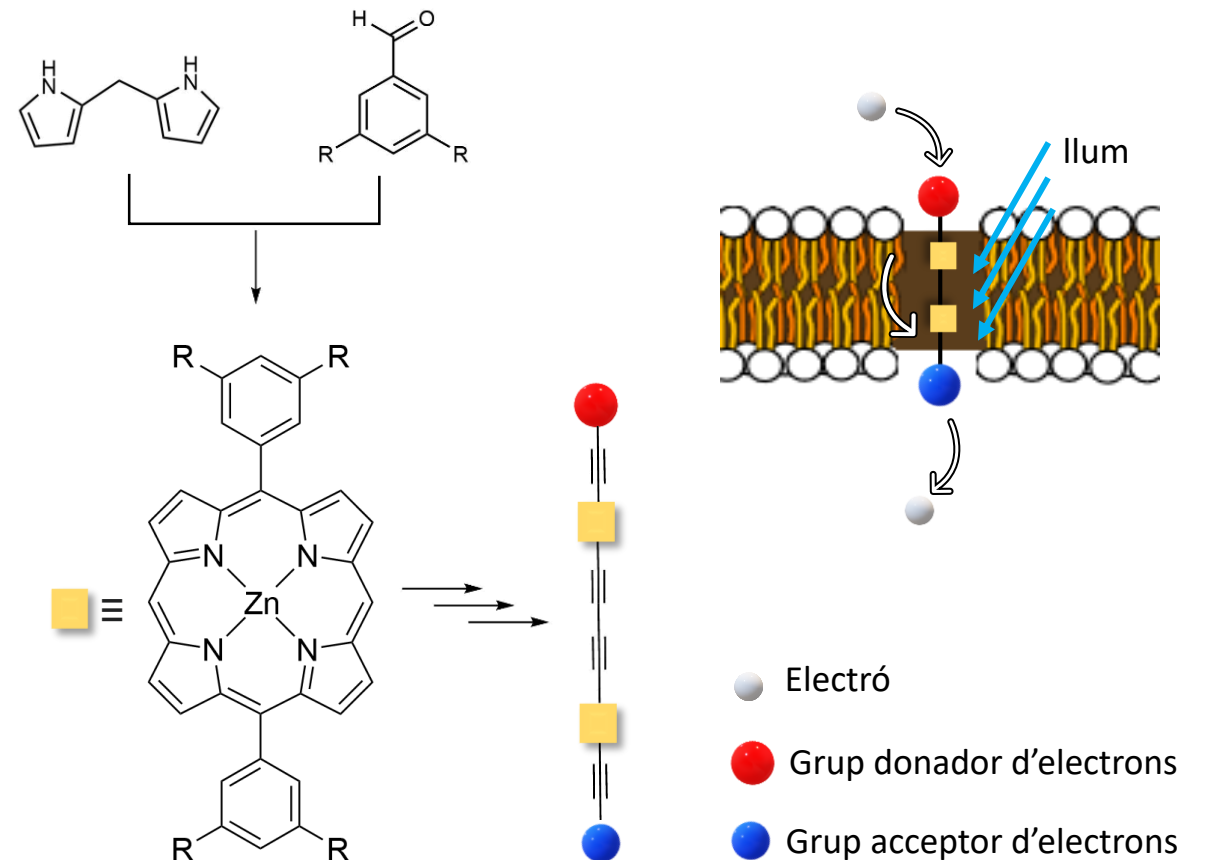
Ingrid Delgado Aguilera; Bart Limburg

Departament de Química Inorgànica i Orgànica. Secció de Química Orgànica



Una gran varietat d'organismes duen a terme processos de transducció d'energia a través de les seves membranes. Un exemple serien els cloroplasts, encarregats de transformar la llum solar en energia durant la fotosíntesi. Concretament, diferents cromòfors que es troben a les seves proteïnes transmembrana són els responsables de recollir la llum i induir una transferència d'electrons entre un donador i un acceptor d'electrons, per generar aquesta energia. En aquest projecte, es pretén imitar aquests processos mitjançant la fotoinducció d'una transferència electrònica a través de la bicapa lipídica d'un liposoma.

Amb aquest propòsit, se sintetitzaran diferents complexos basats en dímers de porfirines de zinc i s'integraran a la bicapa del liposoma. Les dues porfirines estaran unides entre si mitjançant un enllaç butadií, a més de funcionalitzades amb grups donadors i acceptors d'electrons. En conseqüència, la transferència electrònica que s'ha de donar a través de la membrana s'acompleix fàcilment.



Tractament d'efluents d'aigües residuals emprant clor activat per mitjà de radiació solar

Ivan Díaz Redondo; Alberto Cruz Alcalde; Núria López Vinent

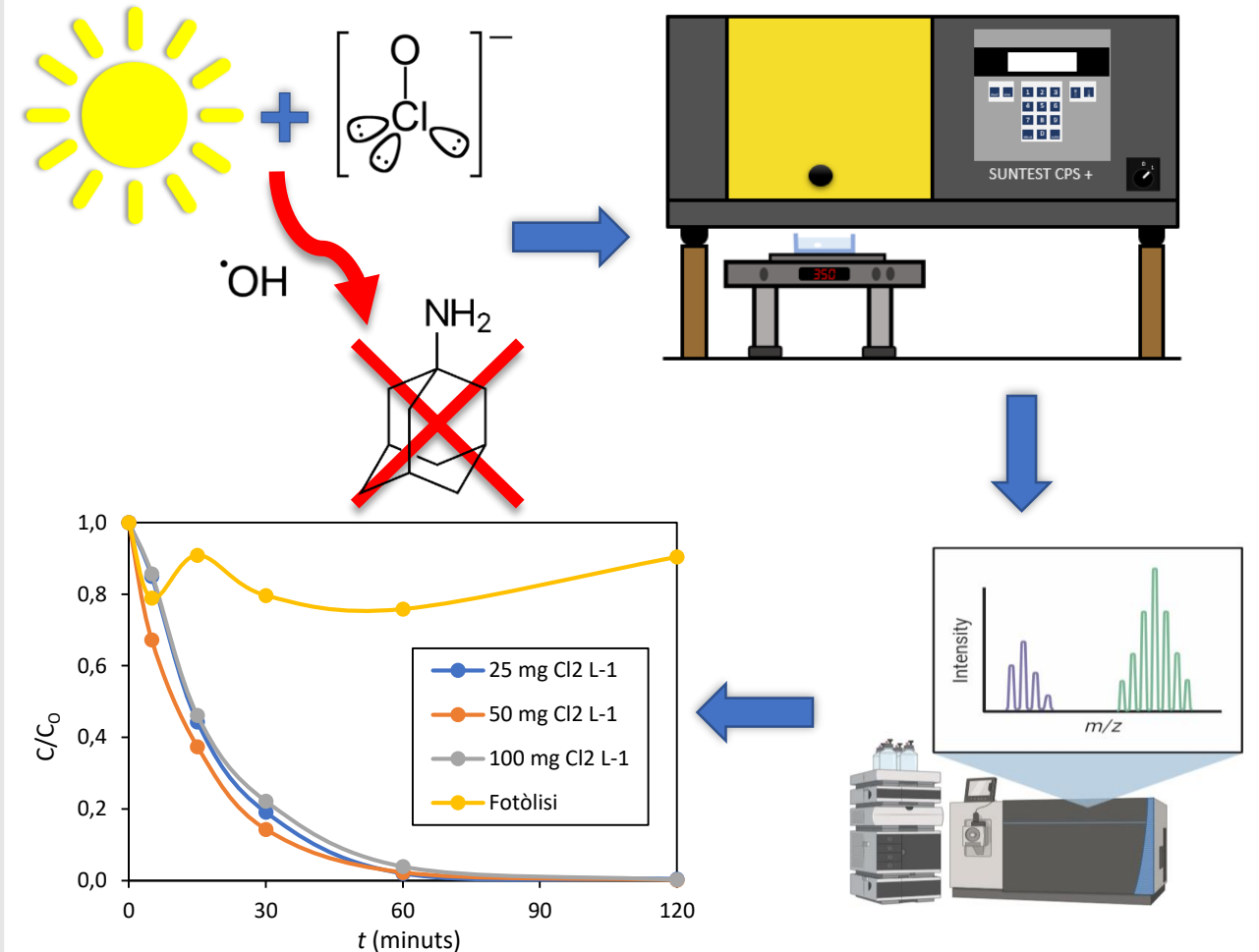
Departament d'Enginyeria Química i Química Analítica. Secció d'Enginyeria Química



Les tecnologies actuals per al tractament d'aigües residuals no estan dissenyades per eliminar microcontaminants orgànics, motiu pel qual són necessàries alternatives com els processos avançats d'oxidació. L'ús de la llum solar com a font de radiació ultraviolada és una opció atractiva que pot ajudar a reduir els costos d'operació en la implementació a gran escala d'aquesta família de tecnologies.

En aquest projecte s'estudia la viabilitat de combinar llum solar i clor com a mètode alternatiu en la degradació de contaminants. Amb aquest objectiu, es fan experiments d'oxidació a escala de laboratori en una cambra de simulació solar, en combinació amb l'anàlisi dels contaminants residuals mitjançant tècniques de cromatografia líquida acoblada a espectrometria de masses.

S'espera que els resultats contribueixin a impulsar pràctiques de reutilització d'aigua, per preservar d'aquesta manera els recursos hídrics i la salut pública i mediambiental.



Síntesi enantioselectiva dels derivats de l'espiro[indol-3,1-indolizina]

Mar Duran; Valentina Piras; Maria Perez; Maria Mercedes Amat

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



Els alcaloides oxindòlics es caracteritzen per tenir una espirofusió a l'anell de pirrolidina en el C3 del nucli indòlic. Els derivats de l'espiro[pirrolidin-3,3'-oxindole] constitueixen una gran família de productes naturals que tenen activitats biològiques i que han inspirat el desenvolupament de nous agents terapèutics [1]. L'espirotriptostatina B és un alcaloide oxindòlic aïllat del brou de fermentació d'*Aspergillus fumigatus* el 1996 [2].

Per dur a terme la síntesi d'aquest compost, en el nostre grup es proposa una metodologia sintètica en quatre passos clau: *a*) la preparació de la lactama bicíclica enantiopura derivada del (S)-triptofanole a través d'una ciclocondensació estereoselectiva amb l'oxoèster **A**; *b*) una espirociclació estereoselectiva; *c*) la generació del doble enllaç de la lactama α,β -insaturada; i *d*) una oxidació.

En aquest treball, ens centrarem en l'estudi de diferents oxidacions del doble enllaç de la lactama α,β -insaturada **E**.

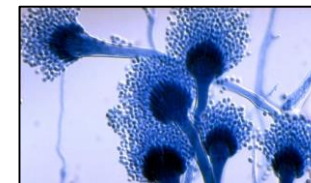


Figura 1. *Aspergillus fumigatus*

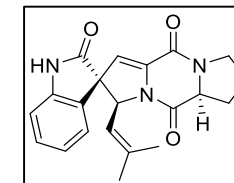
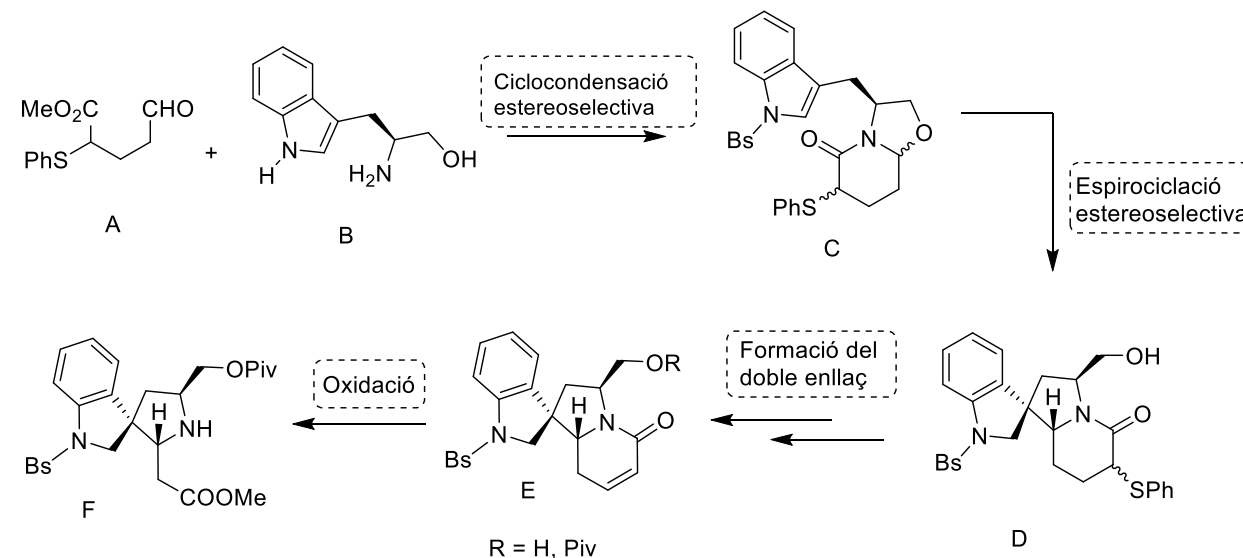


Figura 2. Spirotryprostatin B



Referències

- [1] Pérez, M.; Ramos, C.; Massi, L.; Gazzola, S.; Taglienti, C.; Yayik, N.; Molins, E.; Viayna, A.; Luque, F. J.; Bosch, J. *Organic Letters* **2017**, 19 (15), 4050-4053.
- [2] Trost, B. M.; Stiles, D. T. *Organic Letters* **2007**, 9 (15), 2763-2766.

Caracterització i autenticació de mels mitjançant metodologies analítiques basades en LC-UV



C. Egido-Perianes;¹ Oscar Núñez;^{1,2,3} Sònia Sentellas^{1,2,3}

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

² Institut de Recerca en Nutrició i Seguretat Alimentària (INSA-UB)

³ Serra Húnter Fellow Program, Generalitat de Catalunya

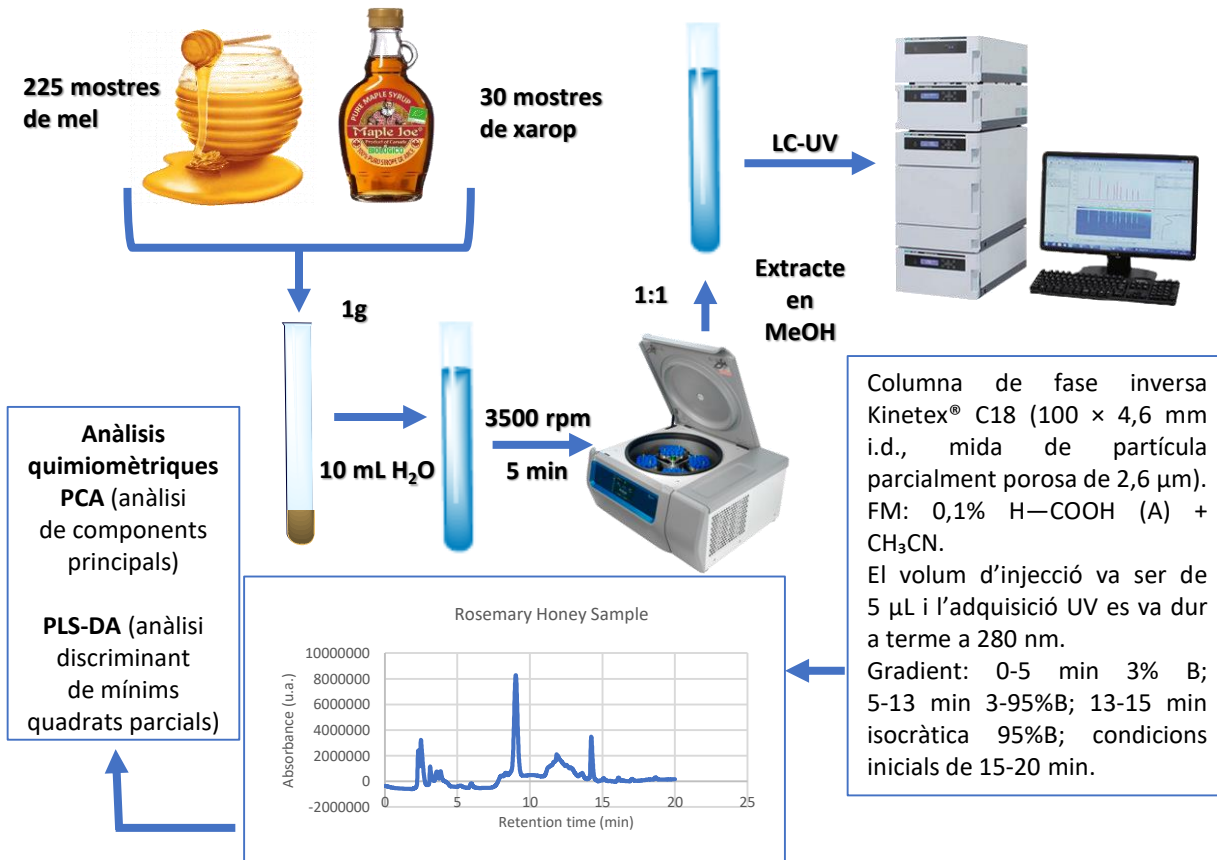
La mel és un producte natural produït per les abelles a partir del nèctar i d'altres secrecions no florals. A causa de la seva composició variable i de la similitud amb altres productes adulterants, és susceptible a l'adulteració. Per tant, cal desenvolupar metodologies analítiques factibles i senzilles per caracteritzar, classificar i autenticar la mel, així com per detectar pràctiques fraudulentes [1].

En aquest treball es va avaluar la possibilitat de caracteritzar i classificar diferents mostres de mel segons les varietats botàniques mitjançant una metodologia HPLC-UV [2]. Les empremtes dactilars obtingudes es van aplicar a diferents mètodes quimiomètrics per determinar-ne la viabilitat com a descriptors químics amb fins d'autenticació. A més a més, es va avaluar la capacitat de la metodologia per determinar l'origen geogràfic de la mel i detectar pràctiques fraudulentes basades en l'adulteració amb xarops.

Referències

[1] García, N. L. Bee World 2018, 95 (3), 89-94.

[2] García-Seval, V.; Martínez-Alfaro, C.; Saurina, J.; Núñez, O.; Sentellas, S. Foods 2022, 11 (15), 2345.





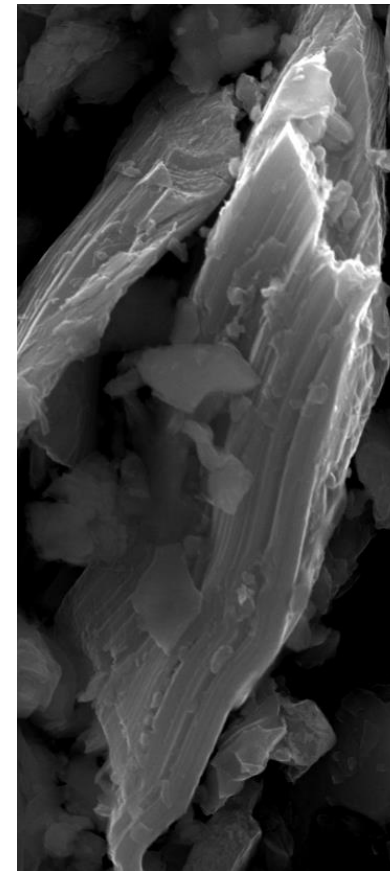
Modificació de fases MAX Ti_3AlC_2 per a la reducció catalítica de CO_2

Josep Falcó Falcó; Lourdes Mestres; Xavier Vendrell

Departament de Química Orgànica i Inorgànica. Secció de Química Inorgànica

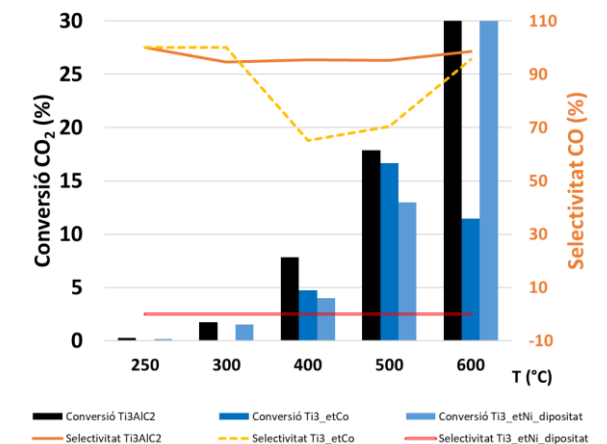
Avui dia les emissions de CO_2 són una de les preocupacions principals a escala mundial. Una forma de reaprofitar aquest gas és a través de la reacció inversa de desplaçament de vapor d'aigua (RIDVA), en què el CO_2 es redueix a CO . Això permet obtenir gas de síntesi, a partir del qual es poden aconseguir una multitud de productes químics d'alt valor afegit que actualment s'obtenen a partir de derivats del petroli.

En aquest treball es pretén modificar una família de carburs ternaris tipus Ti_3AlC_2 , coneguts com a fases MAX, mitjançant la substitució o deposició d'elements metàl·lics altament actius en la reacció RIDVA, com ara Ni, Co, Cu o Zn, a través de diferents metodologies, per després avaluar-los com a catalitzadors en la reacció d'hidrogenació de CO_2 .



+Ni

RIDVA



Separació i transport de càrrega en COFs bidimensionals per a optoelectrònica

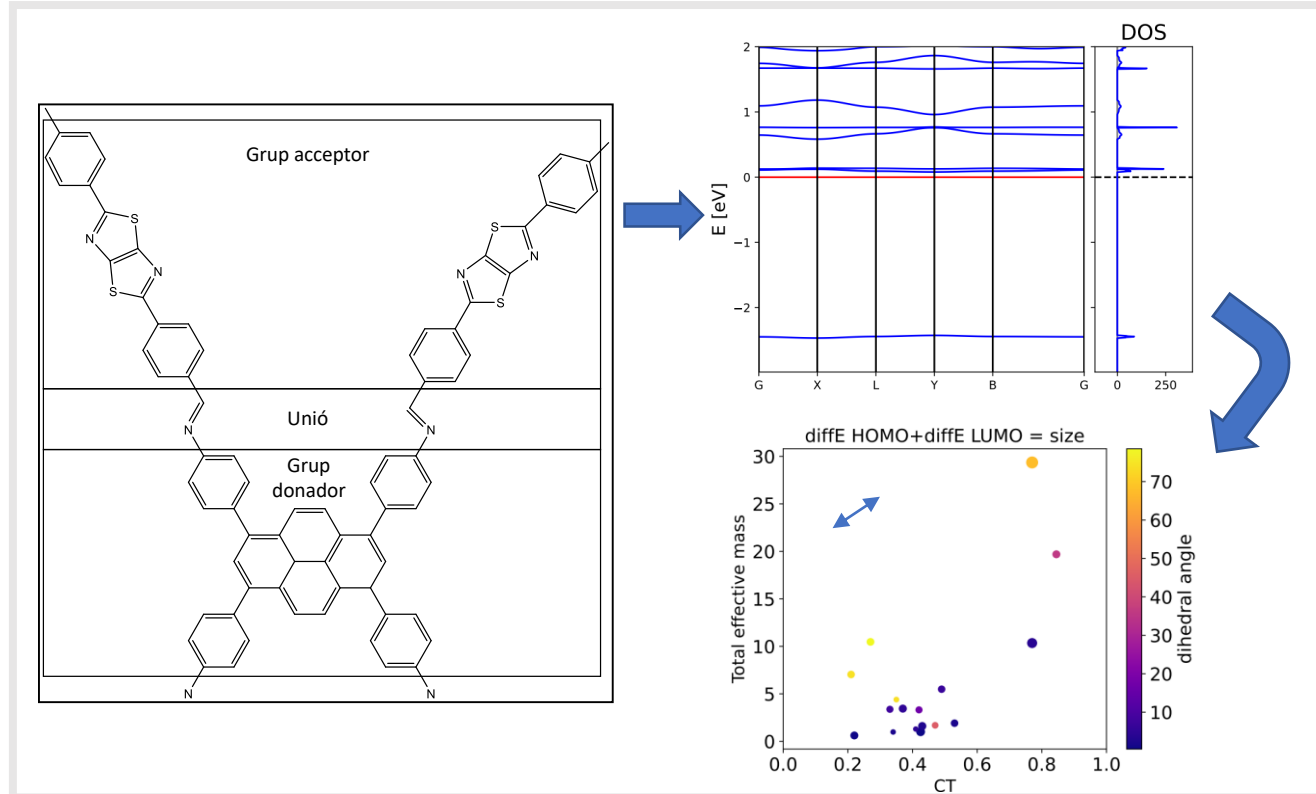


Arnau Garcia Duran; Maria Fumanal Quintana

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

Els *covalent organic frameworks* bidimensionals (2D-COFs) són una classe de material porós format per molècules orgàniques conjugades enllaçades covalentment formant una xarxa π bidimensional. Degut a la seva topologia única i fàcilment modificable, presenten un gran interès en diversos camps com per exemple l'optoelectrònica, l'emmagatzematge de gasos o la catàlisi.

El seu potencial en aplicacions optoelectròniques depèn de les seves propietats òptiques i conductores. D'una banda, les propietats conductores depenen de la conjugació π , la qual es pot optimitzar estratègicament emprant lligands conjugats i certes simetries [1]. D'altra banda, les propietats òptiques depenen del caràcter dels estats excitats, el qual es pot modificar introduint grups electrodonadors i electroacceptors, cosa que promou la transferència de càrrega [2]. La introducció d'aquests grups, però, tendeix a disminuir la conjugació π , i n'empitjora la conductivitat. L'objectiu és investigar, mitjançant mètodes DFT, ambdues propietats en 2D-COFs per establir la seva correlació i determinar com optimitzar-les simultàniament.



Referències

- [1] S. Thomas, H. Li, C. Zhong, M. Matsumoto, W. R. Dichtel, J.-L. Bredas, *Chem. Mater.*, **2019**, 31, 3051-3065.
 [2] J. Zhao, J. Ren, G. Zhang, Z. Zhao, S. Liu, W. Zhang, L. Chen, *Chem. Eur. J.*, **2021**, 27, 10781-10797.

Sistemes covalents dinàmics aplicats a biologia i catàlisi

Pere Garriga-Cazorla; Ciril Jimeno; Jordi Solà; Daniel Carbajo; Ignacio Alfonso

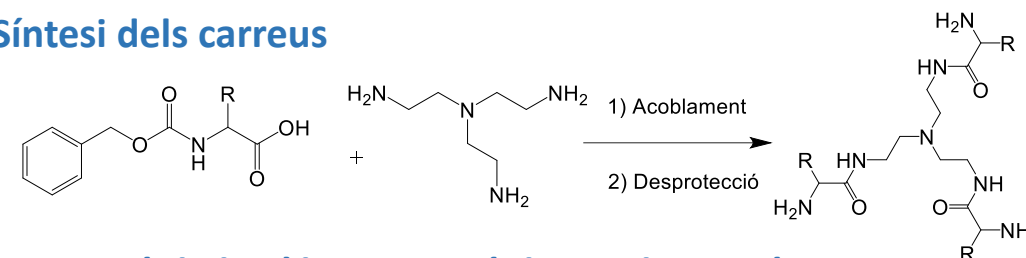
Departament de Biologia Química. Centre d'Investigació de Química Avançada (CSIC-IQAC), Barcelona



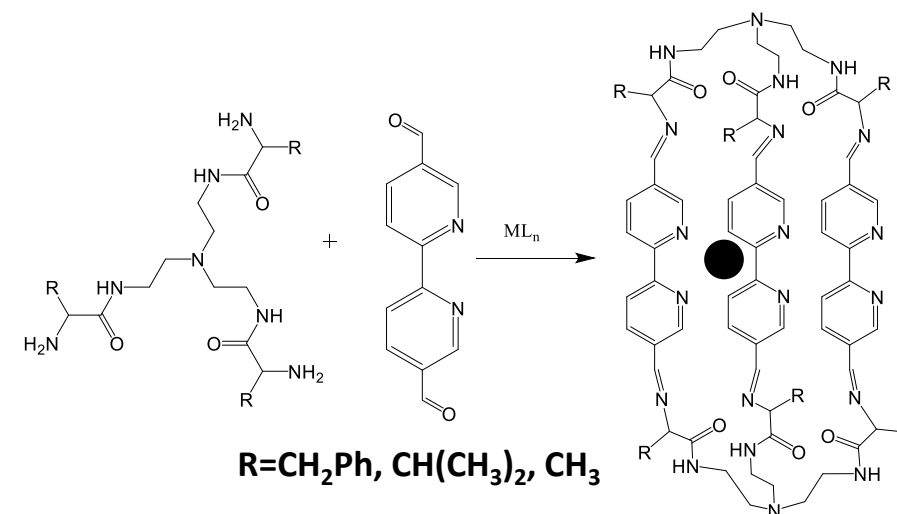
La química covalent dinàmica representa una estratègia sintètica basada en la formació de sistemes supramoleculars complexos, generats a partir d'unitats moleculars discretes per a diferents aplicacions: des de la creació de llibreries dinàmiques biològiques [1] fins al desenvolupament de catalitzadors asimètrics.

En aquest projecte pretenem dissenyar i obtenir un sistema supramolecular, aprofitant la química covalent dinàmica per a la formació d'imes i la predisposició del sistema a formar una gàbia molecular, obtinguda a partir dels efectes de preorganització del sistema, així com de la seva cooperativitat intrínseca, entre d'altres. La introducció d'un bianell de piridines al sistema crea un entorn que afavoreix la coordinació octaèdrica amb la introducció d'un metall al sistema [2]. A més, la quiralitat proporcionada per l'aminoàcid [3] permet obtenir una informació estructural més detallada de l'assemblatge de la molècula.

Síntesi dels carreis



Formació de la gàbia, reacció de condensació



Referències

1. Carbajo, D., Pérez, Y., Guerra-Rebollo, M., Prats, E., Bujons, J., & Alfonso, I. (2022). Dynamic Combinatorial Optimization of In Vitro and In Vivo Heparin Antidotes. *Journal of Medicinal Chemistry*, 65(6), 4865-4877. <https://doi.org/10.1021/acs.jmedchem.1c02054>
2. Paulus, B. C., Adelman, S. L., Jamula, L. L. L., & McCusker, J. K. K. (2020). Leveraging excited-state coherence for synthetic control of ultrafast dynamics. *Nature*, 582(7811), 214-218. <https://doi.org/10.1038/s41586-020-2353-2>
3. Esteve, F., Altava, B., García-Verdugo, E., Luis, S. V., & Lehn, J. M. (2022). Doubly chiral pseudopeptidic macrobicyclic molecular cages: Water-assisted dynamic covalent self-assembly and chiral self-sorting. *Chem*, 8(7), 2023-2042. <https://doi.org/10.1016/j.chempr.2022.04.007>

Síntesi del C75-O com a potencial agent antitumoral i anorèctic

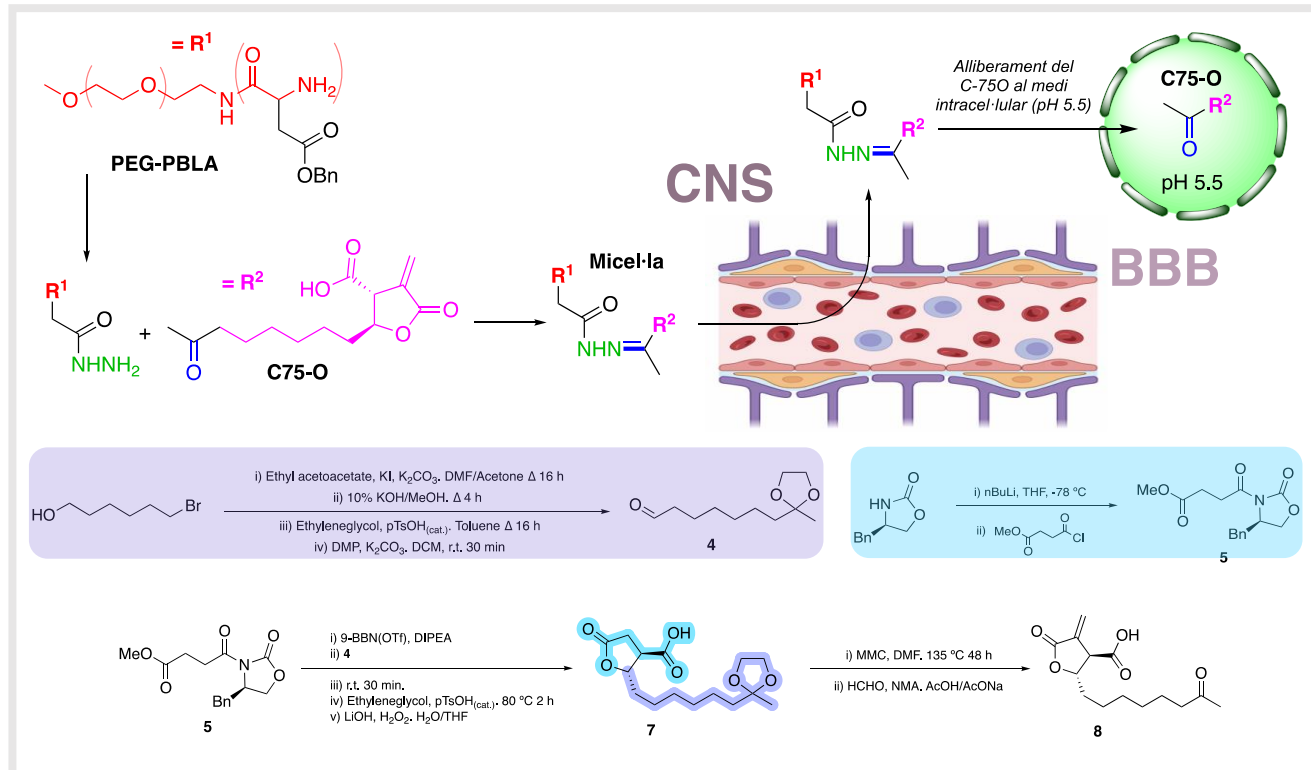


Pau Guillamon; Xavier Ariza; Jordi Garcia; Rosalía Rodríguez; Jesús Garcia-Chica; West Kristian D. Paraiso; Sabina Quader

Departament de Química Inorgànica i Orgànica. Secció de Química Orgànica

Un dels reptes més grans de la medicina actual és el tractament de malalties greus sense teràpia eficaç. Durant la primera dècada del 2000 es va treballar en el desenvolupament d'un potencial fàrmac amb acció antitumoral (C75) [1]. A més a més, en fer assaigs *in vivo*, es van detectar marcades propietats anorèctiques que, més endavant, es van associar a un dels enantiòmers. Aquest fet va provocar un augment considerable de l'interès per aquest tipus de molècula [2].

Després d'anys d'investigació, s'ha trobat la necessitat de sintetitzar un anàleg capaç de travessar eficaçment la barrera hematoencefàlica per poder atacar el glioblastoma, un tipus agressiu de tumor cerebral que avui dia és de difícil tractament. La millor opció considerada és l'anomenat C75-O. Aquesta molècula formaria enllaços covalents amb nanopartícules de tipus PEG-PBLA modificades, de manera que n'afavoreix la penetració a través de la barrera hematoencefàlica i es produeix una posterior alliberació del fàrmac al medi intracel·lular a pH 5,5 [3].



Referències

- [1] Kauhjda FP, Pizer ES, Li JN, Mani NS, Frehywot GL, Townsend CA. *Proc. Natl. Acad. Sci.* **2000**, 97, 3450.
- [2] Makowski K, Mera P, Paredes D, Herrero L, Ariza X, Asins G, Hegardt FG, Garcia J, Serra D. *Chirality.* **2013**, 25, 281.
- [3] West Kristian DP, Garcia-Chica J, Ariza X, Zagmunt S, Fukushima S, Garcia J, Mochida Y, Serra D, Herrero L, Kinoh H, Casals N, Kataoka K, Rodríguez R, Quader S. *Biomater. Sci.* **2021**, 9, 7076.

Termodinàmica de la síntesi del biolubricant levulinat d'octil a partir d'àcid levulínic i 1-octanol



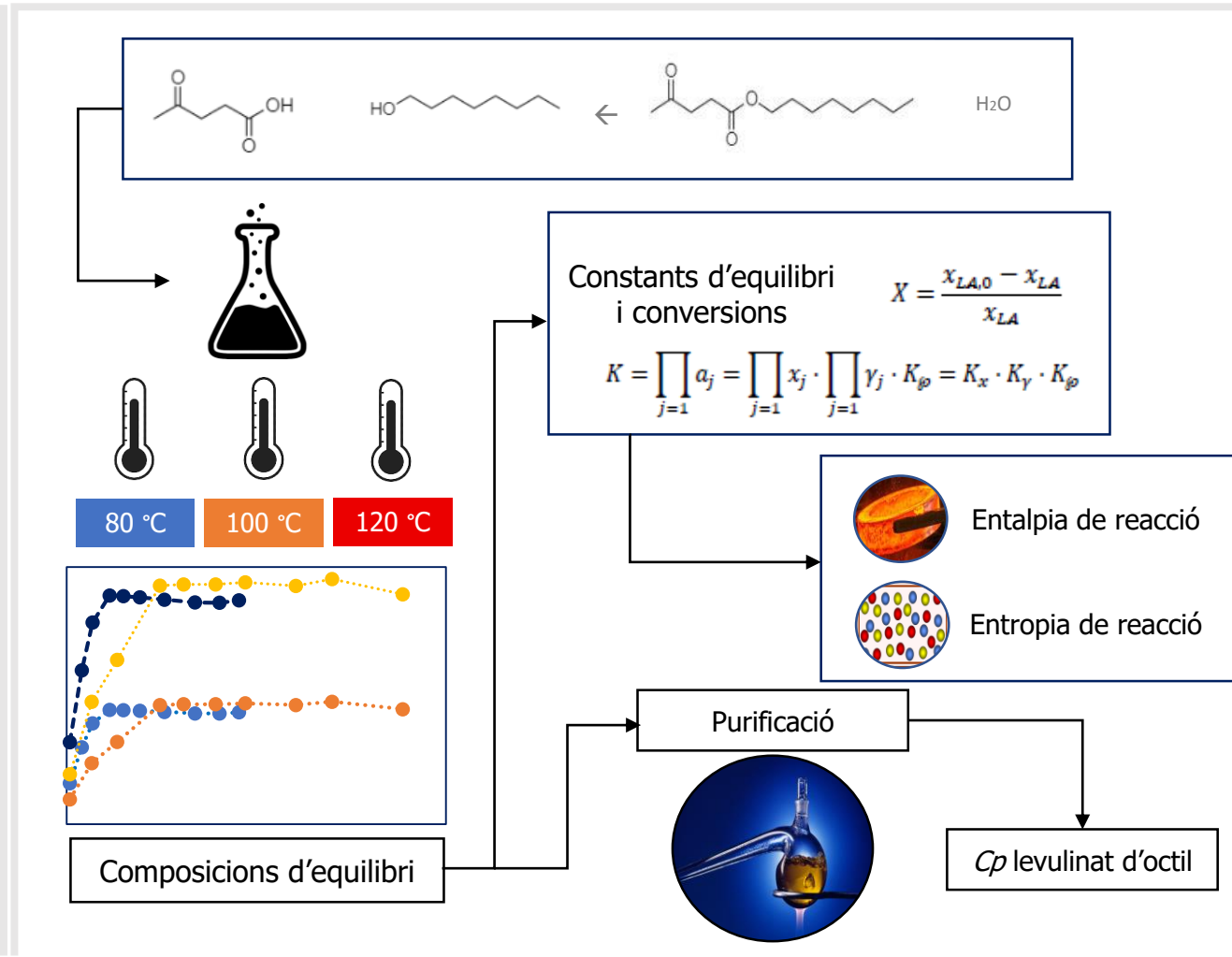
Marc Jurkiewicz; Rodrigo Soto; Jordi Hug Badia

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

El levulinat d'octil (OL) és un compost que, per les seves propietats fisicoquímiques, té un gran potencial com a substitutiu de bases lubricants tradicionalment derivades del petroli. L'OL es pot sintetitzar per esterificació de l'àcid levulínic (AL) amb octanol (OH), dues substàncies que es poden obtenir a partir de derivats de la biomassa.

El treball pretén quantificar les propietats termodinàmiques d'aquesta reacció de síntesi, cosa estrictament necessària per poder dissenyar processos industrials per a la producció del compost de referència.

En aquest treball es determina per primera vegada la constant d'equilibri de la síntesi de referència a temperatures d'entre 80 °C i 120 °C i el seu valor es compara amb l'obtingut mitjançant mètodes d'estimació. Així mateix, es determina la conversió a diverses temperatures i les variacions d'entalpia i d'entropia de la reacció. Finalment, es descriu un procés de purificació de l'OL i es determina experimentalment i per primera vegada la calor específica del compost a diverses temperatures.



Estudi dels efectes de la congelació i l'acció crioprotectora de la sacarosa en bacteris làctics mitjançant imatge hiperespectral i quimiometria



Manel Madrid-Valero;^{1,2} Adrián Gómez-Sánchez;¹ Anna de Juan;¹ Mónica Marro²

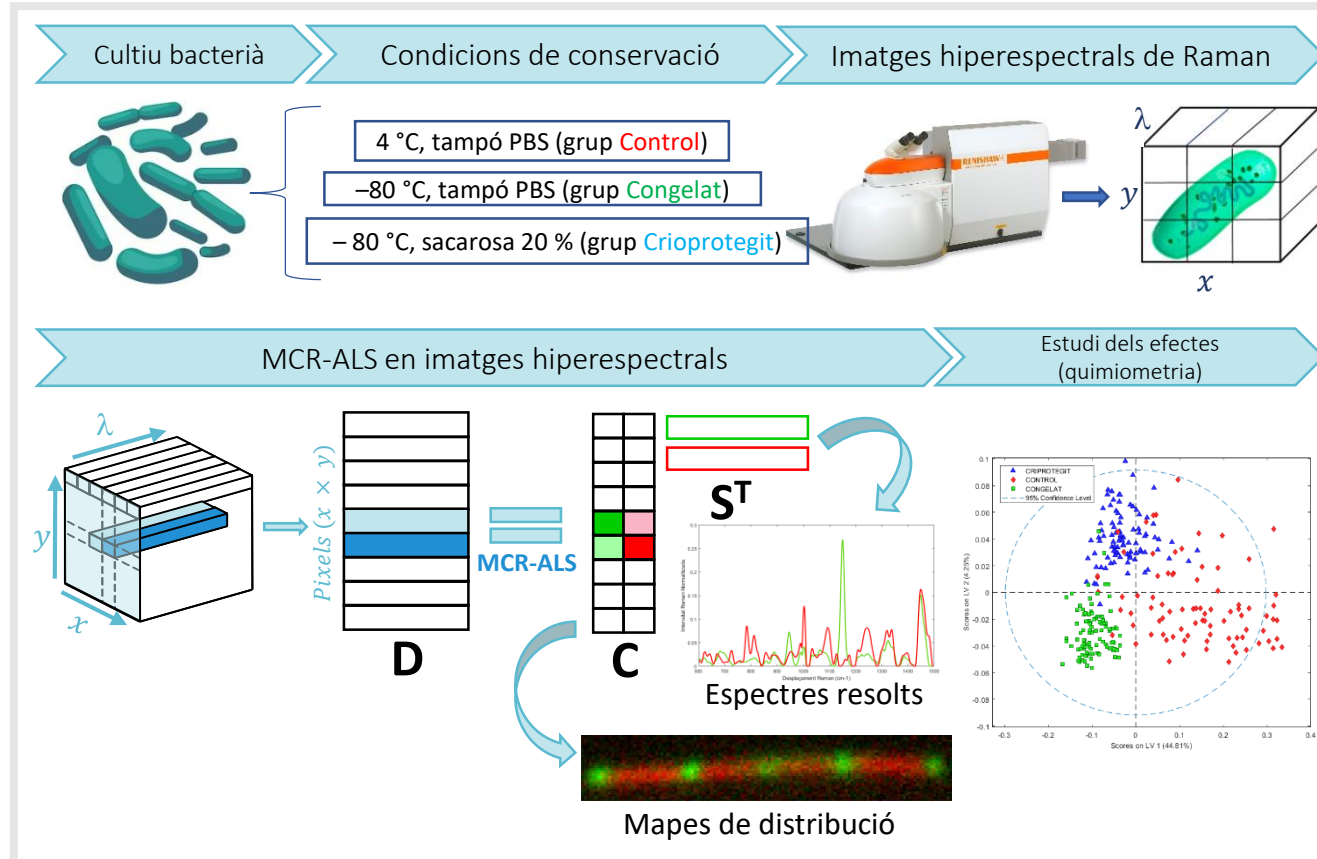
¹ Departament d'Enginyeria Química i Química Analítica. Secció de Química Analítica

² Institut de Ciències Fotòniques (ICFO)

Els bacteris làctics (BAL) són àmpliament emprats en la indústria de l'alimentació com a probiòtics, gràcies als seus efectes beneficiosos en la salut humana. Malgrat això, diversos processos industrials de processament i conservació d'aliments exposen els BAL a condicions hostils, les quals poden afectar les seves propietats i viabilitat.

En aquest estudi es descriuen els efectes que provoca la congelació sobre *Lactobacillus delbrueckii* subespècie *bulgaricus*. A més, s'analitza l'acció crioprotectora que presenta la sacarosa com a medi extracel·lular [1]. La recerca es duu a terme mitjançant l'obtenció d'imatges hiperespectrals de Raman, les quals són una eina útil per obtenir informació tant morfològica com química de bacteris individuals i les seves macromolècules.

S'utilitzen mètodes quimiomètrics per a la interpretació d'aquestes imatges, en aquest cas, la resolució multivariant de corbes per mínims quadrats alterns (MCR-ALS), que permet desmesclar les signatures espectrals i els mapes de distribució dels components de la mostra [2].



Referències

[1] N. Romano, M. Marro, M. Marsal, P. Loza-Álvarez, A. Gomez-Zavaglia, *Food Res. Int.*, **2021**, 143, 110235.

[2] A. de Juan, R. Tauler, *Anal. Chim. Acta*, **2021**, 1145, 59-78.

Reaccions aldòliques organocatalítiques d'aldehids α,β -insaturats

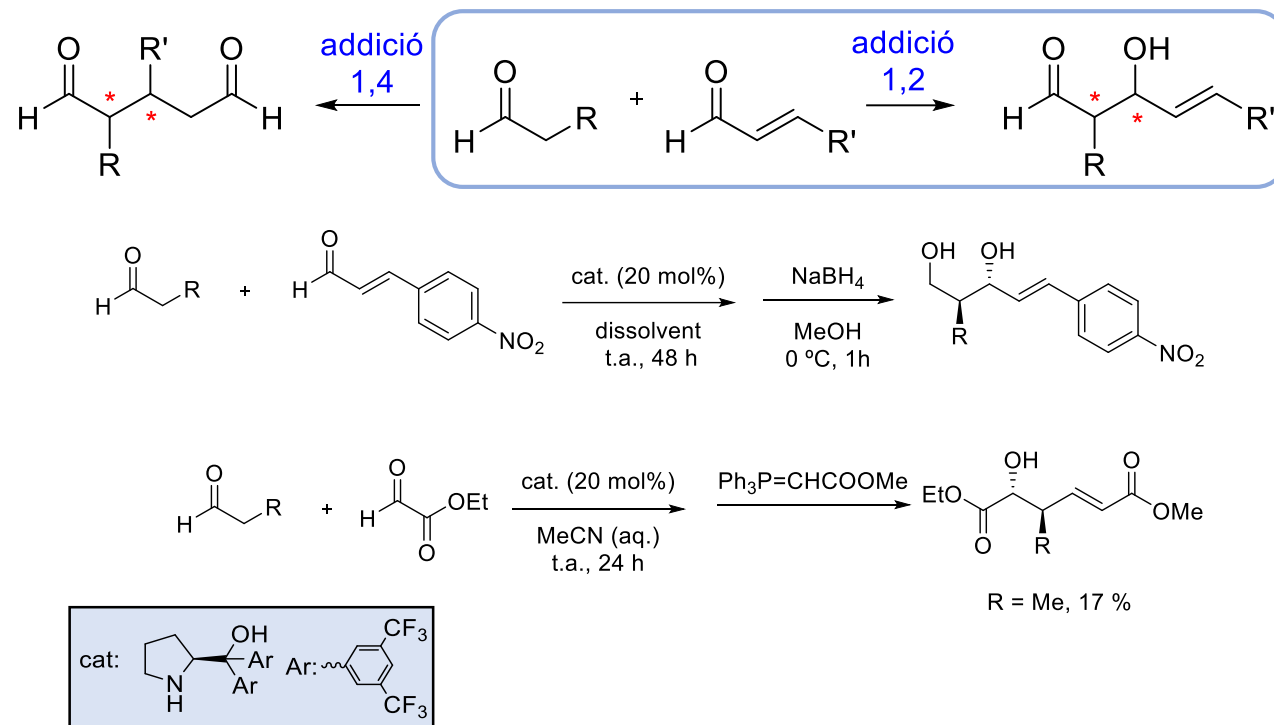
Alex Mampel Moreno; Oriol Galeote; Anna M^a Costa; Pere Romea; Fèlix Urpí

Departament de Química Inorgànica i Orgànica. Secció de Química Orgànica



Les reaccions organocatalítiques han guanyat importància en les últimes dècades, degut a l'avantatge que suposa l'ús de molècules orgàniques senzilles, amb un impacte mediambiental baix, com a catalitzadors (química verda). És ben conegut que les amines secundàries quirals formen enamines amb aldehids i cetones. Aquestes poden reaccionar amb aldehids α,β -insaturats i generar l'adducte de Michael (addició 1,4) o l'aldol corresponent (addició 1,2). Hi ha pocs precedents a la literatura de reaccions aldòliques aminocatalítiques d'aldehids α,β -insaturats [1-3].

En aquest treball s'ha estudiat la reacció aldòlica encreuada d'aldehids alifàtics amb el *p*-nitrocinnamaldehyd i el piruvat d'etil, emprant com a catalitzador un diarilprolinol. Els rendiments que s'han obtingut fins ara són baixos. Paral·lelament, estem estudiant, per RMN, els intermedis que es formen en aquestes reaccions per entendre i millorar-ne aquests baixos rendiments.



Referències

- [1] Yujiro Hayashi, Kaito Nagai, Shigenobu Umemiya. *Chem. Asian J.* **2019**, 14 (23), 4146-4149.
- [2] Taichi Kano, Hiroki Maruyama, Ryu Sakamoto, Keiji Maruoka. *Chem. Commun.* **2015**, 51 (49), 10062-10065.
- [3] Yujiro Hayashi, Takahiko Itoh, Seiji Aratake, Hayato Ishikawa. *Angew. Chem. Int. Ed.* **2008**, 47 (11), 2082-2084.



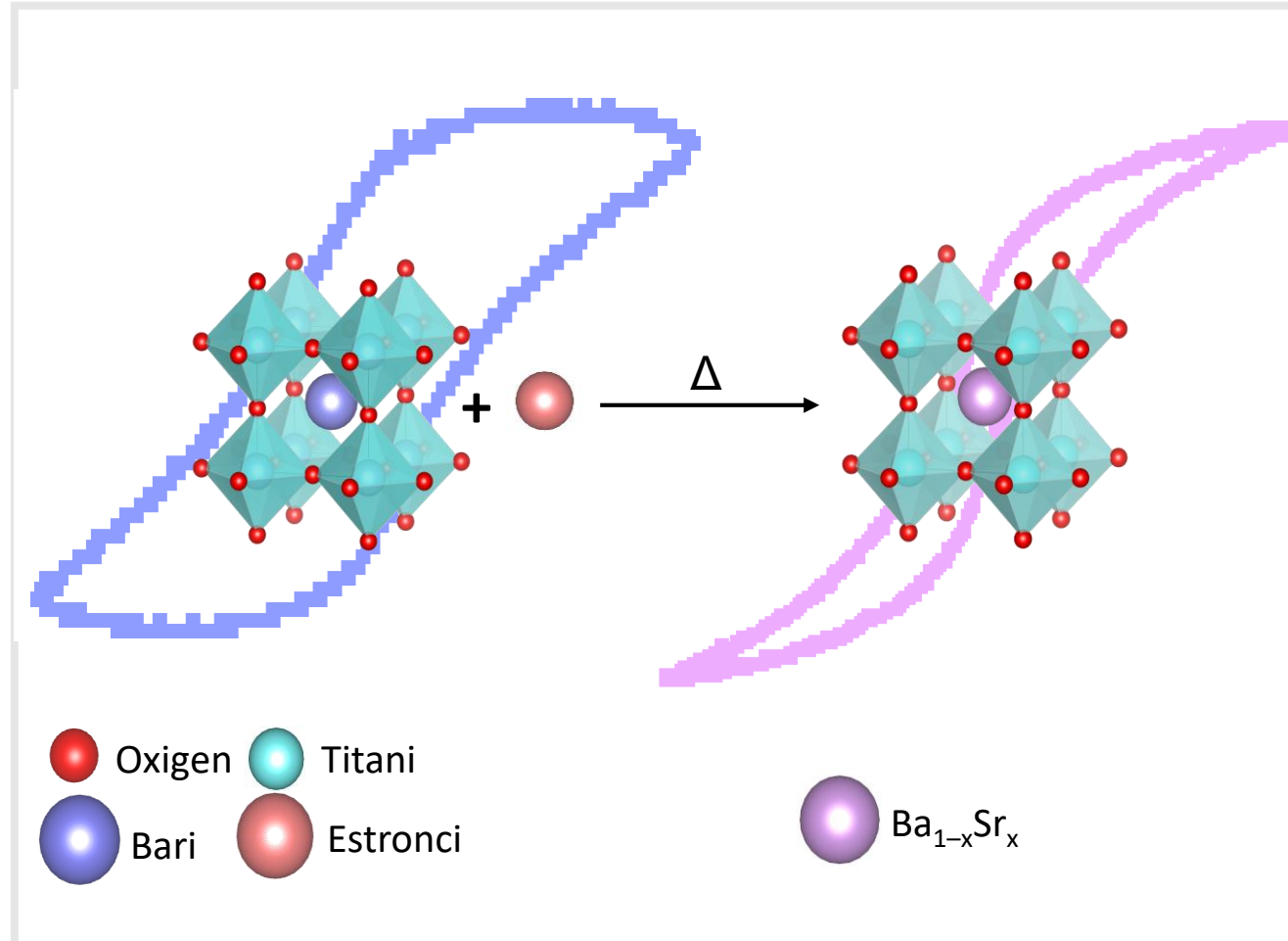
Materials ferroelèctrics per a condensadors d'emmagatzematge d'alta energia

Nerea Morante del Pino; Xavier Vendrell Villafruela; Lourdes Mestres Vila

Departament de Química Inorgànica i Orgànica. Secció de Química Inorgànica

Els materials dielèctrics són una part fonamental dels dispositius electrònics, com per exemple els condensadors, que fem constantment. Això no obstant, la major part dels dielèctrics que s'empren estan basats en el PbTiO_3 . Tenint en compte la toxicitat del plom i el seu perill mediambiental, s'investiguen nous materials lliures de plom amb bones propietats d'emmagatzematge energètic. Actualment, els materials ferroelèctrics basats en el BaTiO_3 (BTO) presenten bones propietats elèctriques, però no són adequats per ser emprats com a emmagatzemadors d'energia.

Per aquest motiu, en aquest treball es proposa sintetitzar diversos compostos basats en el BTO substituint parcialment el Ba^{2+} per Sr^{2+} ($\text{Ba}_{1-x}\text{Sr}_x\text{TiO}_3$) emprant el mètode ceràmic. Els materials preparats s'han caracteritzat per difracció de raigs X, microscòpia electrònica de rastreig i se n'han avaluat les propietats elèctriques funcionals.



Marc metal·loorgànics (MOFs) derivats del trifenilè per a aplicacions en catàlisi verda



Ariana Neyra-Pérez;¹ Yuzelfy Mendoza-Gamero;^{1,2} Albert Romano-Rodríguez;^{2,3} Daniel Sainz-García^{1,2}

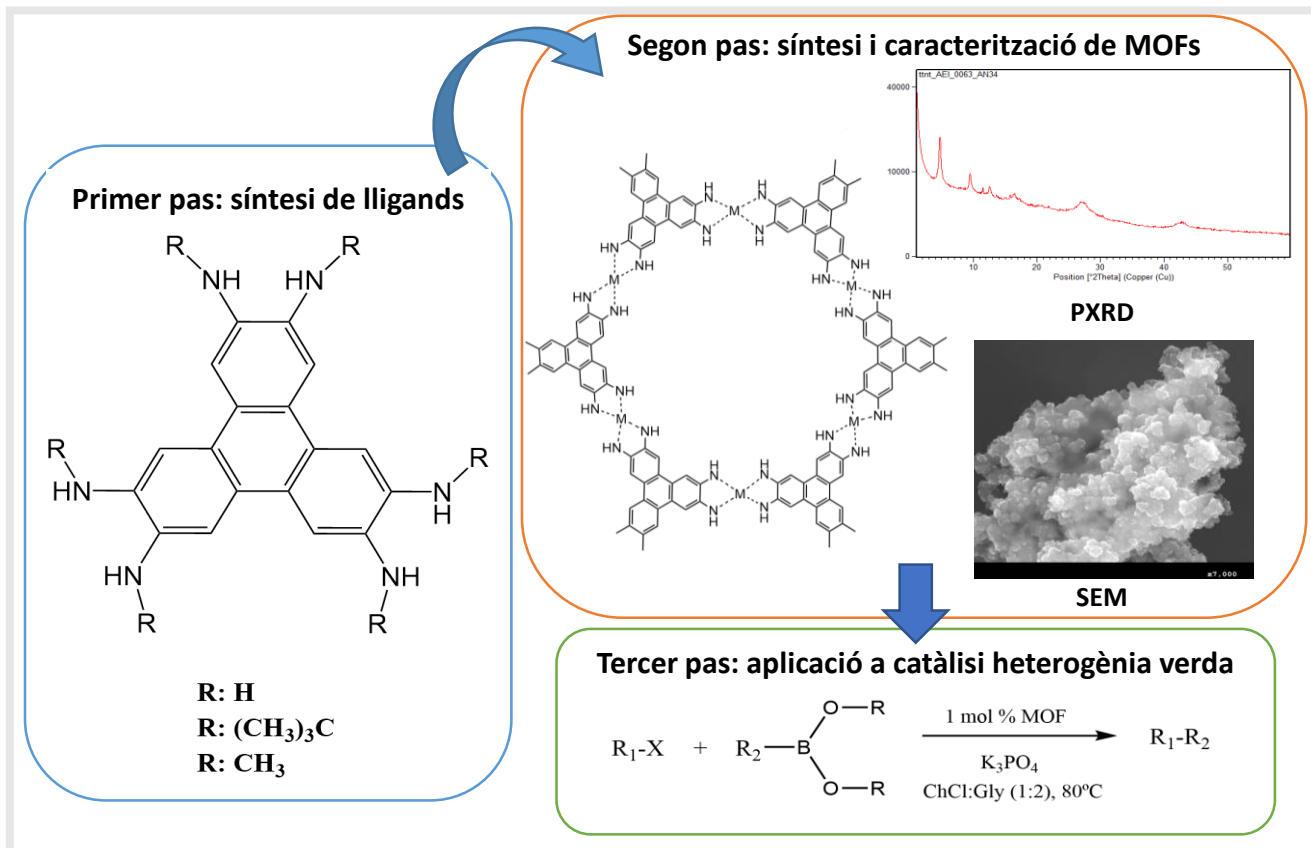
¹ Departament de Química Inorgànica i Orgànica. Secció de Química Inorgànica

² Institut de Nanociències i Nanotecnologia (IN2UB)

³ Departament d'Enginyeria Electrònica i Biomèdica. Facultat de Física

Els marcs metal·loorgànics (MOFs) són nanomaterials híbrids basats en la unió periòdica de centres metàl·lics i lligands de pont orgànics, sobre els quals s'ha investigat àmpliament per a l'aplicació de catàlisi heterogènia degut a la gran àrea superficial i l'alta porositat que els caracteritza [1]. Fins ara, l'atenció s'ha centrat en els MOFs amb amines a causa de les seves característiques bàsiques que poden generar llocs actius per a la catàlisi [2].

En aquest treball es presenta la síntesi dels lligands d'amines a partir de reaccions d'acoblament encreuat C—N catalitzats per pal·ladi (Buchwald-Hartwig) i coure (Ullmann), seguit de la síntesi dels MOFs i una aplicació posterior com a catalitzadors per a les reaccions de Suzuki-Miyaura.



Referències

[1] Seon-Jin Choi, Il-Doo Chim, *Electron. Matter. Letter.*, **2018**, 14.

[2] Yichao Lin, Chunlong Kong, Liang Chen, *RSC Adv.*, **2016**, 6, 32598-32614.

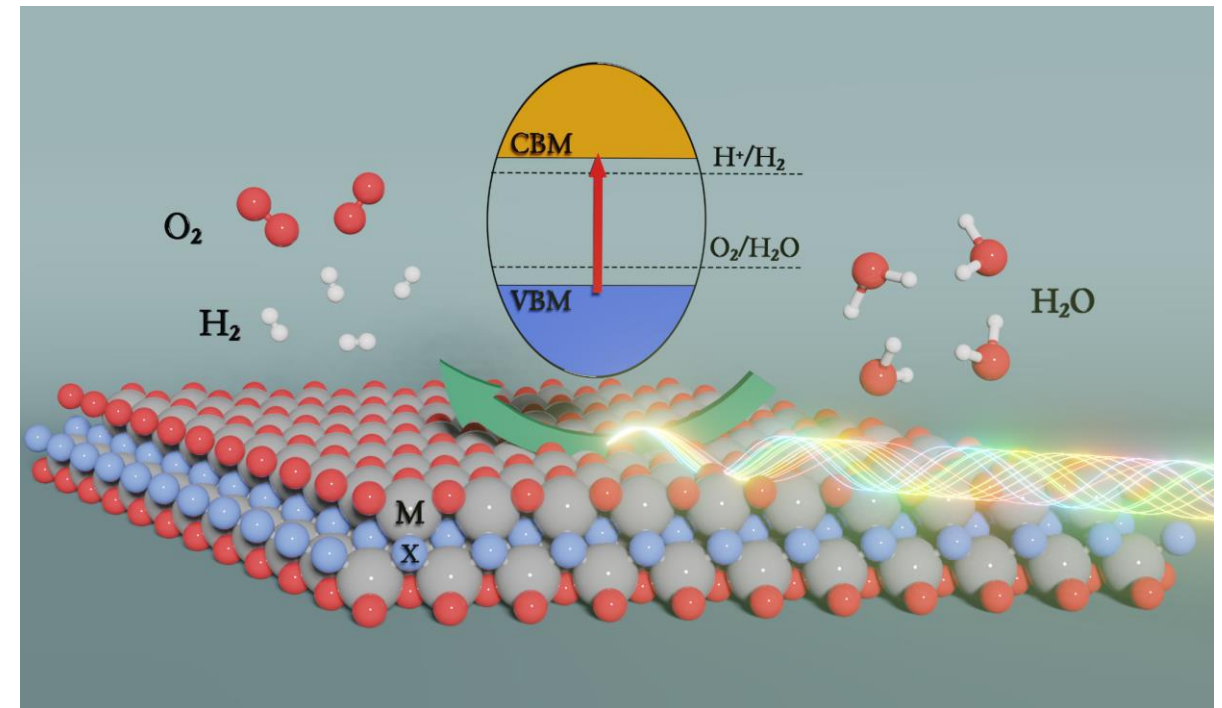


MXens com a fotocatalitzadors del trencament de l'aigua

Diego Ontiveros Cruz; Carme Sousa Romero; Francesc Viñes Solana

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

Els MXens ($M_{n+1}X_nT_2$) són carburs i nitrurs bidimensionals de metalls de transició primerencs que han estat proposats com a materials potencialment fotoactius. Un pas clau i necessari per avaluar el seu possible ús en la fotoquímica impulsada per la llum solar, com ara en la reacció de trencament de l'aigua, és l'exploració de la seva estructura de bandes en funció de la seva composició elemental (M, X), amplada (n), l'apilament de capes atòmiques i les possibles terminacions (T) de superfície. En aquest projecte, gràcies a les eines de la química computacional, s'ha fet un ample cribratge d'aquests compostos i les seves estructures, que ens ha permès proposar Zr_2CO_2 , Sc_2CCl_2 , Y_2CCl_2 , Sc_2CS_2 i Y_2CS_2 com a possibles candidats per al trencament fotocatalític de l'aigua.



Preparació d'una nova resina escintil·ladora impresa per a la mesura de glucosa marcada amb ^{14}C

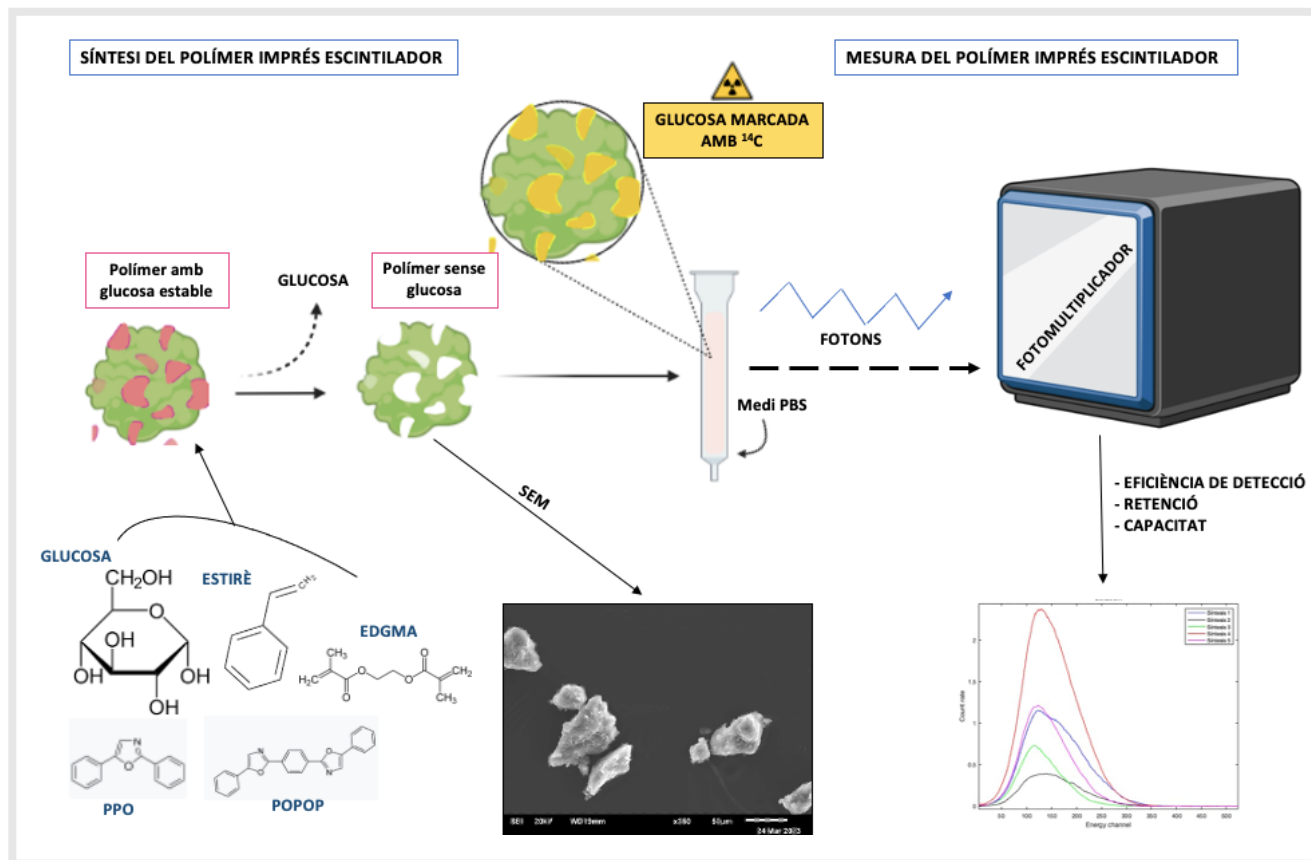


Yaël Ortiz Romero; Alex Tarancón; Héctor Bagán

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

La glucosa marcada amb ^{14}C és molt utilitzada en l'àmbit mèdic per al tractament i el diagnòstic, la qual cosa fa que hi hagi interès a desenvolupar mètodes selectius per mesurar-la. El ^{14}C és un emissor beta i en aquest treball es proposa la seva mesura emprant un polímer imprès escintil·lador que reté glucosa i produeix fotons a l'interaccionar amb les partícules beta emeses pel radionúclid. Aquest material permet la separació i mesura de la glucosa marcada amb ^{14}C , de manera que se simplifica el procés analític i es redueix la quantitat de temps i reactius necessaris [1].

S'han avaluat diversos tipus de polimeritzacions per sintetitzar els polímers impresos, i s'ha conclòs que la de bloc és la que presenta millors resultats. S'han optimitzat els reactius, proporcions i medis per avaluar la retenció i l'eficiència en columna, i es pot concloure que el medi de tampó fosfat salí és el més adequat ja que presenta retencions majors.



[1] Lluch, E., Barrera, J., Tarancón, A., Bagán, H., & García, J. F. (2016). Analysis of ^{210}Pb in water samples with plastic scintillation resins. *Analytica Chimica Acta*, 940, 38-45.

Detecció d'oligonucleòtids mitjançant la formació d'estructures tríplex i nanoclústers de Ag fluorescents



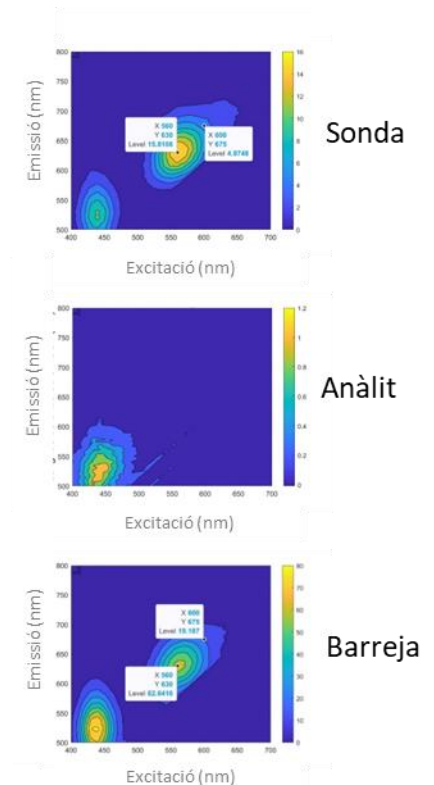
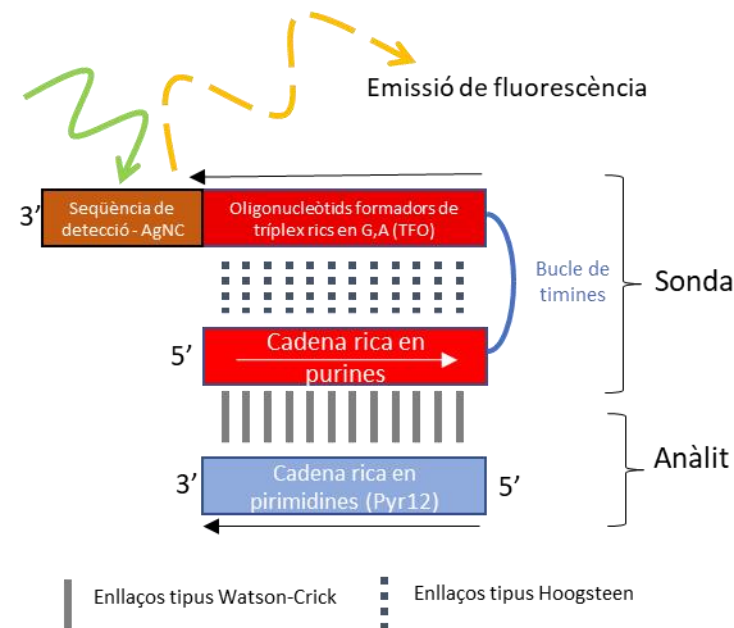
Javier Pacheco; Raimundo Gargallo

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

Els oligonucleòtids són molècules curtes de DNA que contenen informació genètica segons la combinació de bases nitrogenades. Aquestes molècules són presents en processos de regulació gènica en malalties com ara l'Alzheimer, el VIH o la COVID-19 [1], ja que són capaces de formar a les cadenes de DNA nuclear unes estructures secundàries anomenades *tríplex*.

La detecció d'aquestes estructures tríplex podria ser una diana diagnòstica interessant. En aquest estudi s'utilitzen quatre tècniques analítiques per detectar-les: espectroscòpia de fluorescència, electroforesi capil·lar, dicromisme circular i microscòpia de forces atòmiques. En tots els casos, a més, s'intentarà sintetitzar i establir nanoclústers de plata a la mateixa estructura del DNA.

Es podria esperar un desplaçament al vermell en l'emissió de fluorescència ja que la seva emissió depèn de l'estructura dúplex o tríplex formada per l'oligonucleòtid, a més de canvis en l'absorbància, l'el·lipticitat o el temps de retenció segons la tècnica analítica utilitzada.



[1] Incherah Bekkouche, Alexander Y. Shishonin, and Alexandre A. Vetcher. Recent Development in Biomedical Applications of Oligonucleotides with Triplex-Forming Ability. *Polymers* 15 (4) 858. 2023.

Efecte dels additius en la contaminació de nanoplàstics i metalls pesants en efluent andins



Margot Paco-Chipana;^{1,2} Ángela E. Centeno-Lopez;² Haruna L. Barazorda-Ccahuana;^{1,2}

Francesc Mas;¹ Sergio Madurga¹

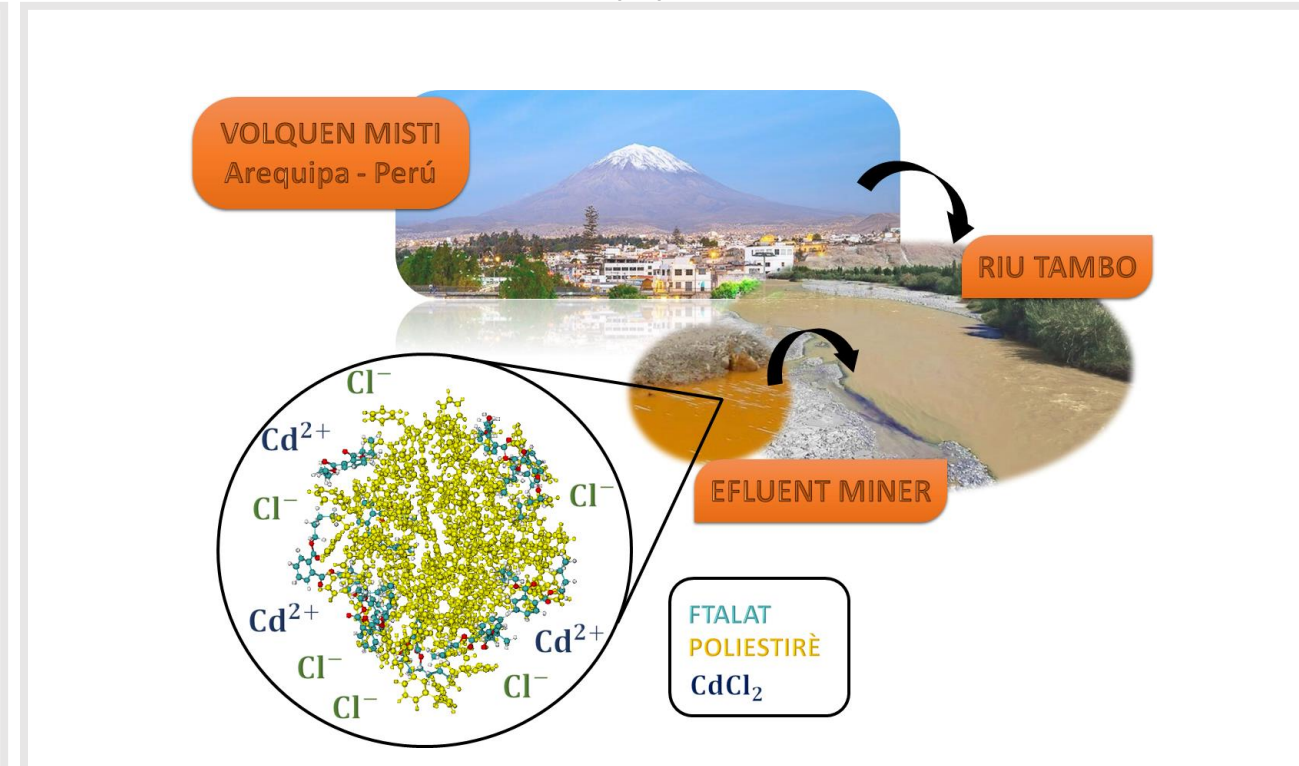
¹ Departament de Ciència de Materials i Química Física. Secció de Química Física

² Computational Biology and Chemistry Research Group. VIR-INV. Universidad Católica de Santa María, Arequipa (Perú)

Estudis sobre la contaminació en medis aquàtics per nanoplàstics i microplàstics demostren que el poliestirè envellit actua com un transportador de metalls pesants [1-2]. Així mateix, reporten que els microplàstics augmenten la seva capacitat d'adsorció quan actuen conjuntament amb els seus additius [3].

En aquest estudi s'analitza el comportament del di-metil, di-etil i di-butil ftalat amb poliestirè i CdCl_2 en aigua dolça. Per assolir aquest objectiu s'han avaluat tres sistemes mitjançant simulacions de dinàmica molecular, cada sistema amb cadascun dels ftalats en presència de poliestirè i CdCl_2 .

Els nostres resultats demostren que l'agregació del poliestirè es veu influenciada per la presència de ftalats i mostren un procés més ràpid quan aquests additius hi són presents. Aquestes troballes poden proporcionar informació valuosa per desenvolupar estratègies de descontaminació.



Referències

- [1] Liu, Q., Wu, H., Chen, J., Guo, B., Zhao, X., Lin, H., Huang, C. *Env. Res.*, **2022**, 214, 113777.
- [2] Naqash, N., Prakash, S., Kapoor, D., Singh, R. *Env. Chem. Let.*, **2020**, 18(6), 1813-1824.
- [3] Godoy, V., Blázquez, G., Calero, M., Quesada, L., Martín-Lara, M. A. *Env. Pollution*, **2018**, 255, 113363.

Nous enfocaments en la síntesi de pèptids en fase sòlida



Enric Pasamón Boscà; Juan-Bautista Blanco Canosa
 Institut de Química Avançada de Catalunya (IQAC-CSIC), Barcelona

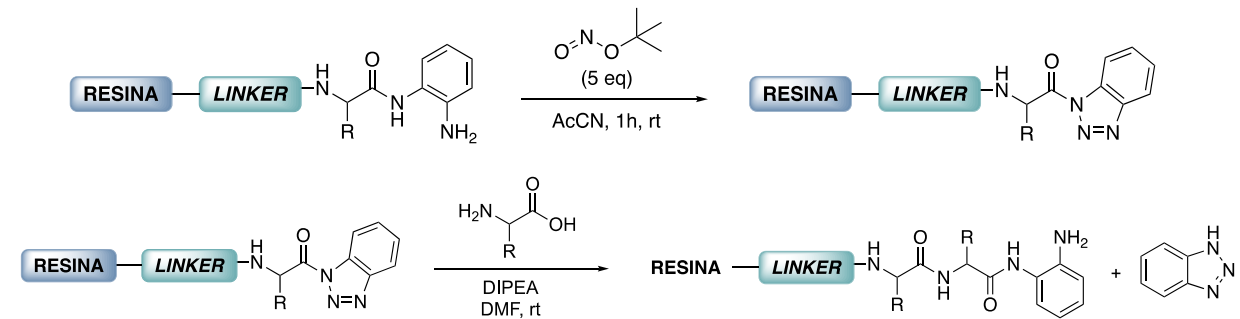
La síntesi de pèptids en fase sòlida (SPPS) [1] permet preparar seqüències de pèptids homogènies per a l'avaluació biològica i la caracterització estructural. La síntesi actual té lloc en sentit C-terminal \rightarrow N-terminal, sentit contrari a la síntesi ribosòmica a la natura. La síntesi en el sentit oposat té diferents avantatges. Tanmateix, la racemització de l'aminoàcid C-terminal durant el pas d'activació continua sent un problema important.

L'objectiu d'aquest projecte és avaluar críticament mètodes de síntesi de pèptids en sentit N-terminal \rightarrow C-terminal, en particular els basats en HBTU i compostos similars, i idear nous mètodes de síntesi. Això implicarà la síntesi de blocs de construcció d'aminoàcids, síntesi de pèptids en fase sòlida i anàlisi i caracterització a partir d'HPLC i espectrometria de masses.

• Modificació d'aminoàcids



• Síntesi del pèptid en fase sòlida



Referències

[1] Merrifield, R. B. (1963). Solid Phase Peptide Synthesis. I. The Synthesis of a Tetrapeptide. Journal of the American Chemical Society, 85(14), 2149-2154; DOI: 10.1021/ja00897a025.

Reforç amb fibres de filaments de PLA i avaluació dels riscos del procés d'obtenció i impressió 3D

Comissió de Dinamització Lingüística



Facultat de Química



Carla T. P. Coelho;^{1,2} Joaquim Serra;¹ Socorro Vázquez;² Elena Xuriguera;¹ Mònica Martínez¹

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

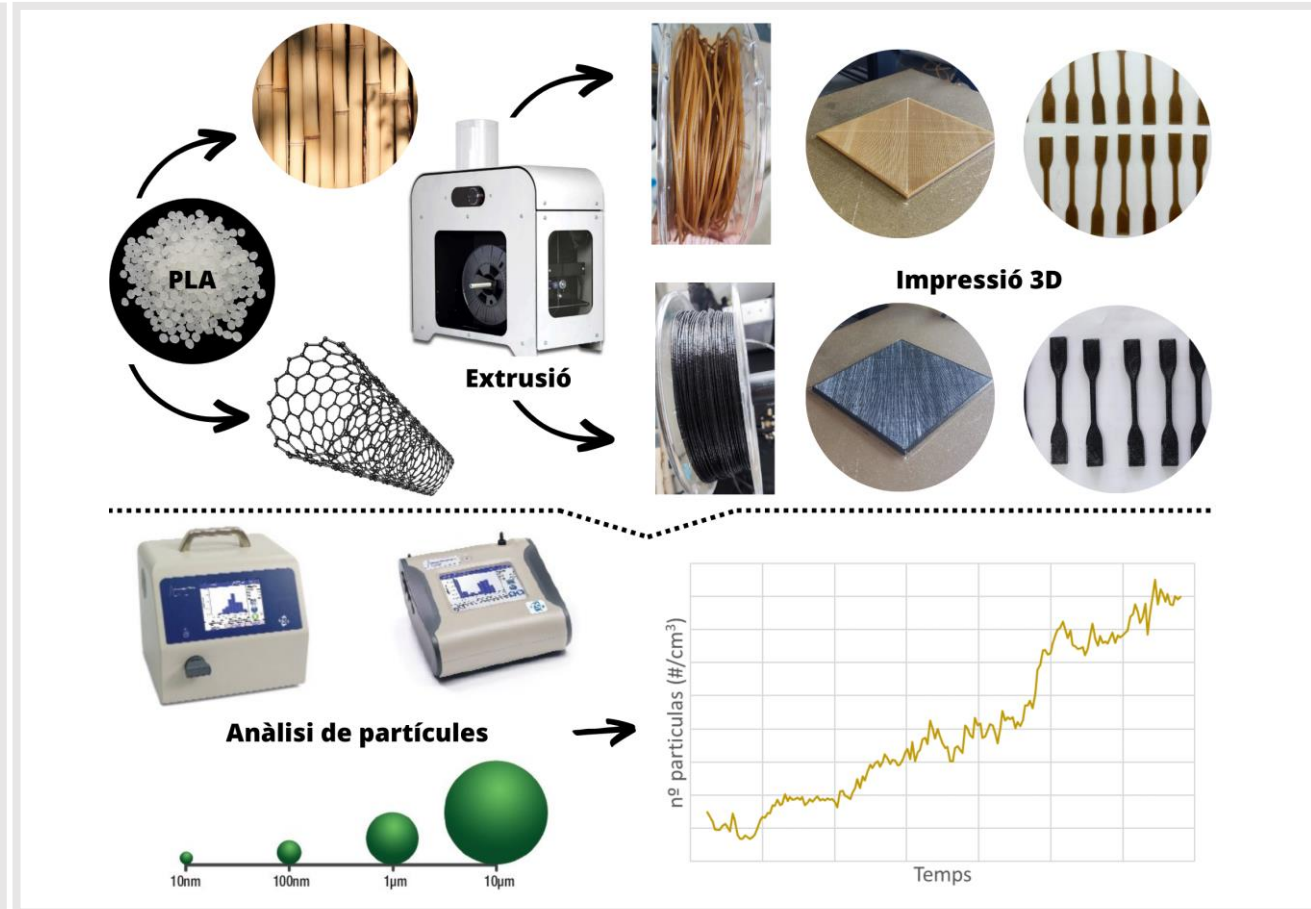
² Leitat Technological Center

Aquest estudi ha avaluat l'ús de fibres de bambú (FB) i nanotubs de carboni (CNT) com a reforç d'una matriu polimèrica d'àcid polilàctic (PLA). Aquest biopolímer d'origen biològic i biodegradable, s'utilitza àmpliament en impressió 3D per les seves propietats reològiques, ja que faciliten el procés d'impressió. El reforç amb fibres naturals pot augmentar la seva utilització en aplicacions amb requeriments mecànics [1].

S'han quantificat les partícules en suspensió (fibres) generades durant les diferents etapes del procés d'obtenció dels filaments i peces impreses. El procés de tamisat és el que mostra una major alliberació de partícules, tot i que la quantitat no és preocupant segons la regulació. Malgrat això, la forma de les partícules i la inhalació a llarg termini podrien causar problemes de salut. També s'ha avaluat l'ecotoxicitat de les peces impreses sotmeses a processos abrasius i ambientals. Es proposa una avaluació de riscos utilitzant eines com *Gracious* i *IATA*.

Referències

[1] Ilyas, R. A., Sapuan, S. M., Harussani, M. M., Hakimi, M. Y. A. Y. et al. Polylactic acid (PLA) biocomposite: Processing, additive manufacturing and advanced applications. *Polymers*. 13 (8), 1326, **2021**. MDPI AG. <https://doi.org/10.3390/polym13081326>

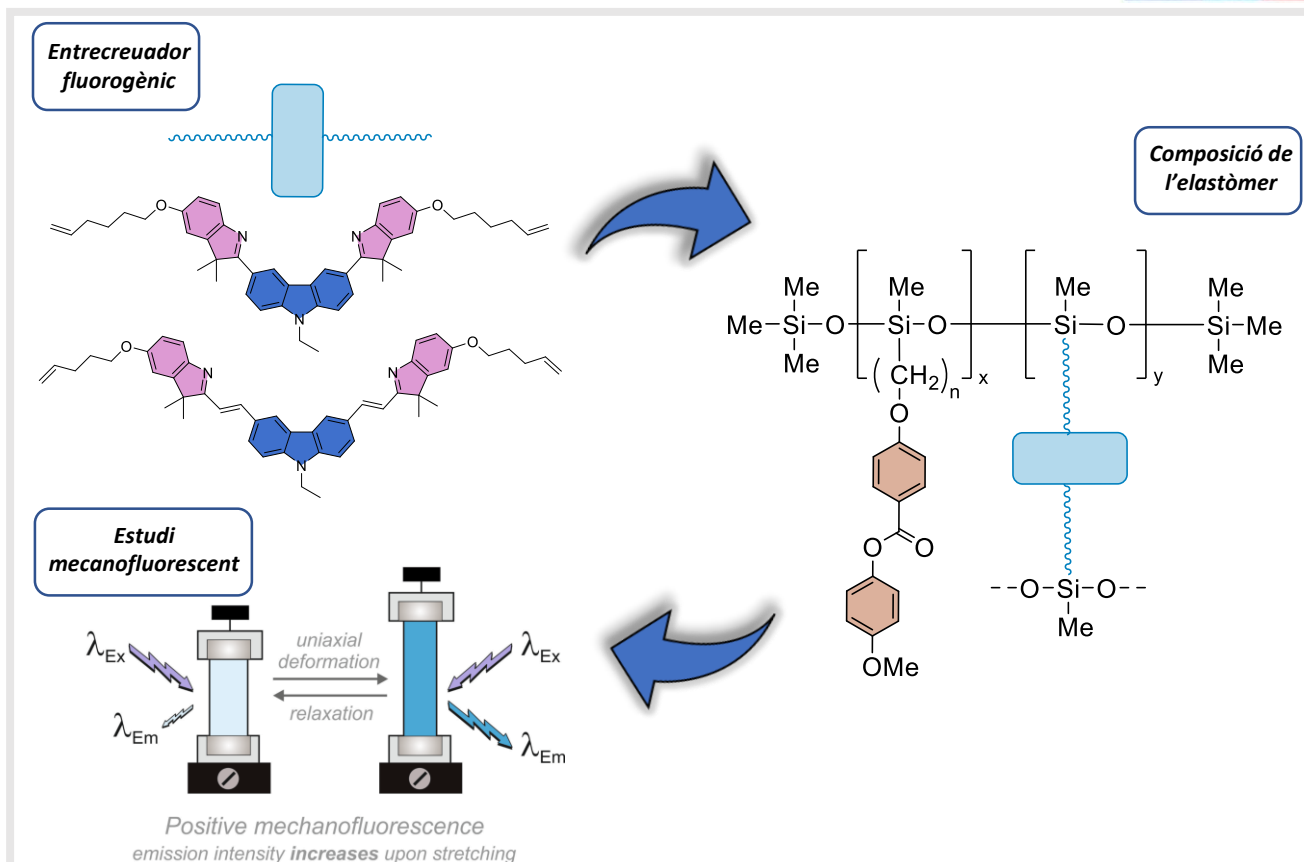


Estudi mecanofluorescent d'LSCE amb nous entrecreuadors

Roger Rafel; Jaume Garcia-Amorós; Dolores Velasco
Departament de Química Inorgànica i Orgànica. Secció de Química Orgànica

Els elastòmers líquids cristal·lins monodomini (de l'anglès *liquid single-crystal elastomer*, LSCE) poden utilitzar-se com a sensors d'estímuls mecànics [1]. Aquests materials estan formats per un mesogen, que atorga la propietat de cristall líquid, una matriu polimèrica i un entrecreuador que li aporta la seva flexibilitat característica [2]. En aquest cas l'entrecreuador serà un derivat del carbazole, fet que farà que aquest monòmer també tingui propietats fluorescents.

Actualment, en el grup s'estudia la síntesi de molècules les quals poden induir a una mecanofluorescència positiva, és a dir, que la fluorescència s'incrementa en estirar el material. Per això s'ha proposat la síntesi d'un compost amb comportament de rotor molecular que es compararà amb un altre que no ho és. La diferència principal entre aquests dos recau en la presència d'un doble enllaç (rotor molecular) en què més rotació implica menys fluorescència, ja que la molècula es desexcita via un camí no radiatiu.



Referències

- [1] Eva-Kristina Fleischmann, Rudolf Zentel, *Angew. Chem. Int Ed.*, **2013**, 52, 8810-8827.
- [2] Mark Warner, Eugene Michael Terentjev, *Liquid Crystal Elastomers*, 978019852671, Clarendon Press, Oxford, UK, **2007**.



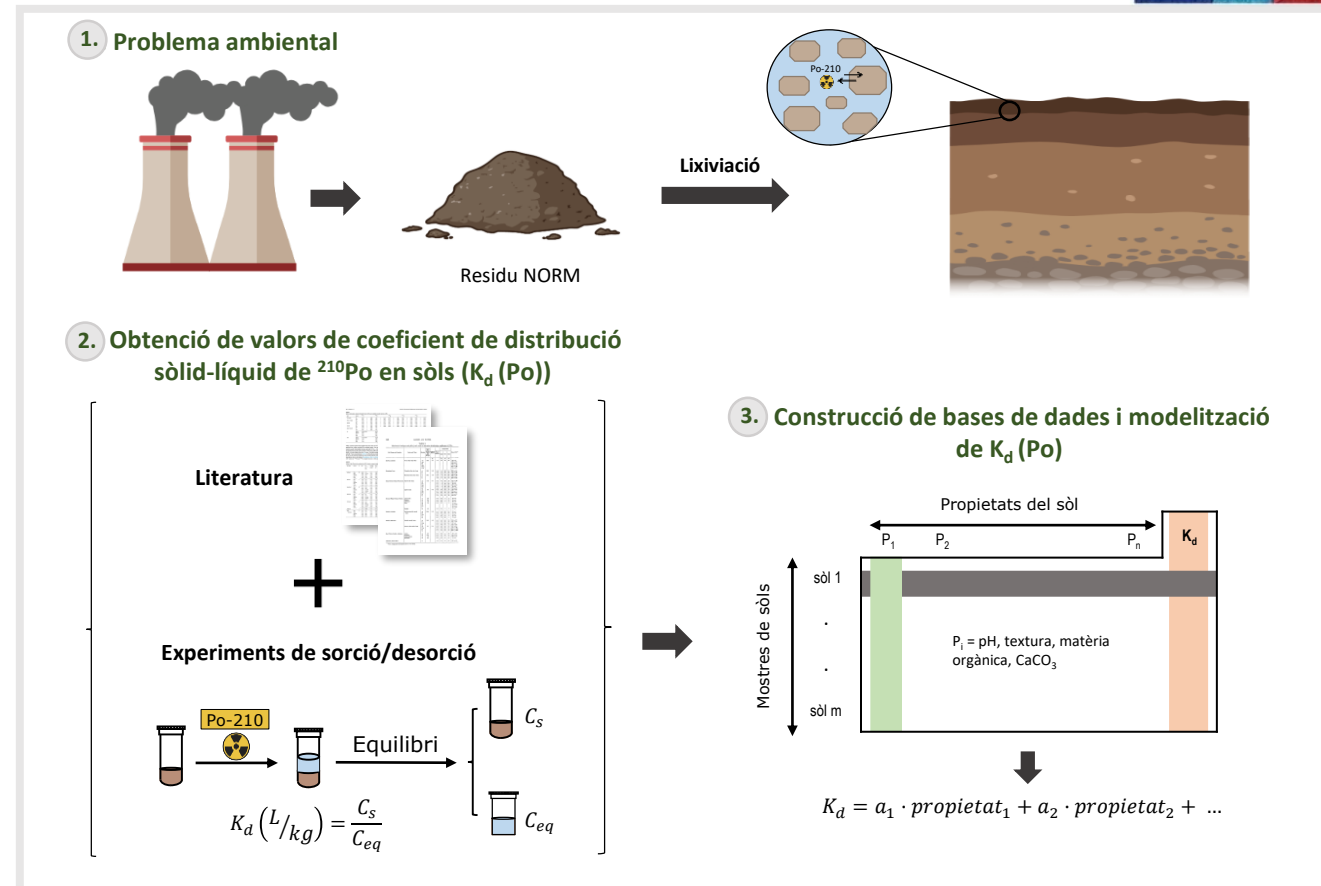
Modelització de la sorció del ^{210}Po en sòls

Laura Ribas; D. Serraïma; M. Vidal; A. Rigol

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

Els residus industrials amb un alt contingut de radionúclids d'origen natural (NORM), com ara U, Ra o Po, poden suposar una font d'exposició radioactiva en els humans. Els lixiviats dels NORM poden incorporar-se al sòl i passar a altres compartiments ambientals i, en conseqüència, a la cadena tròfica [1]. Cal quantificar i modelitzar, doncs, la interacció d'aquests radionúclids en sòls, via per exemple el càlcul del coeficient de distribució sòlid-líquid (K_d), per predir-ne la mobilitat i el risc derivat [2].

Aquest paràmetre és força variable i de difícil predicció, atès que depèn de les característiques del radionúclid i del sòl en estudi. En aquest treball s'ha creat una base de dades de K_d de ^{210}Po , a partir de dades pròpies i de la literatura. L'anàlisi multivariant de les correlacions entre $K_d(\text{Po})$ i propietats de sòl ha permès identificar els factors que afecten la variabilitat del $K_d(\text{Po})$ i predir-ne els valors.



[1] Carvalho, F., Fernandes, S., Fesenko, S., Holm, E., Howard, B., Martin, P., Phaneuf, M., Porcelli, D., Pröh, G., Twining, J. The environmental behaviour of polonium. International Atomic Energy Agency, Technical Reports Series No. 484, Vienna (2017).

[2] Vandenhove, H., Gil-García, C., Rigol, A., Vidal, M. New best estimates for radionuclide solid-liquid distribution coefficients in soils. Part 2. Naturally occurring radionuclides. J. Environ. Radioact. 100, 697-703 (2009).

$\text{Al}(\text{C}_6\text{F}_5)_3$, un nou àcid de Lewis per a la isomerització regioselectiva d'oxetans

Carlos Riego-Mejías;¹ Marina Bellido;¹ Xavier Verdaguer;^{1,2} Antoni Riera^{1,2}

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

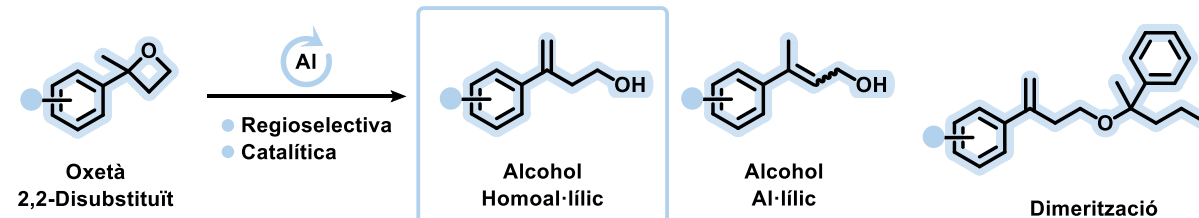
² Departament de Química Inorgànica i Orgànica. Secció de Química Orgànica



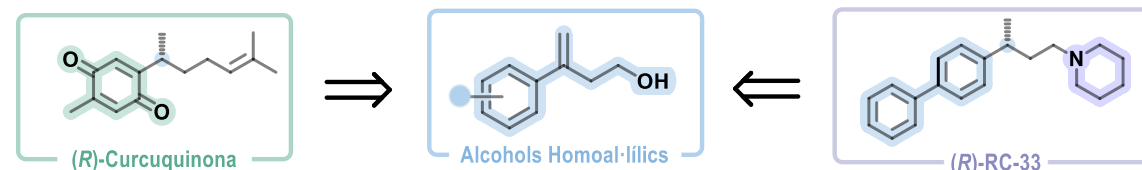
La isomerització d'heterocicles tensionats s'ha convertit en una reacció freqüent i útil en la síntesi orgànica. Prèviament, el nostre grup va descriure l'obertura regioselectiva d'oxetans en alcohols homoal·lílics catalitzada pel voluminós $\text{B}(\text{C}_6\text{F}_5)_3$. Tot i que la reacció era altament diastereoselectiva, alguns alcohols homoal·lílics eren difícils de separar del seu isòmer al·lílic, cosa que feia disminuir les enantioselectivitats en la hidrogenació asimètrica. A més, en el cas dels oxetans més rics en electrons, la formació d'un dímer feia disminuir notablement el rendiment de la reacció. Per resoldre-ho, es va optar per l'ús del $\text{Al}(\text{C}_6\text{F}_5)_3$ com un àcid de Lewis més voluminós i més fort que $\text{B}(\text{C}_6\text{F}_5)_3$, de manera que permetia una obertura més ràpida i més regioselectiva dels oxetans i n'evitava la reactivitat lateral.

Aquesta metodologia modificada s'ha aplicat en la síntesi total asimètrica de dos productes d'interès farmacològic: (*R*)-curcuquinona i (*R*)-RC-33.

Isomerització regioselectiva



Aplicacions sintètiques



Síntesi de porfirines amfifíliques *meso*-5,15-bis(triazol-4-il)substituïdes autoacoblables

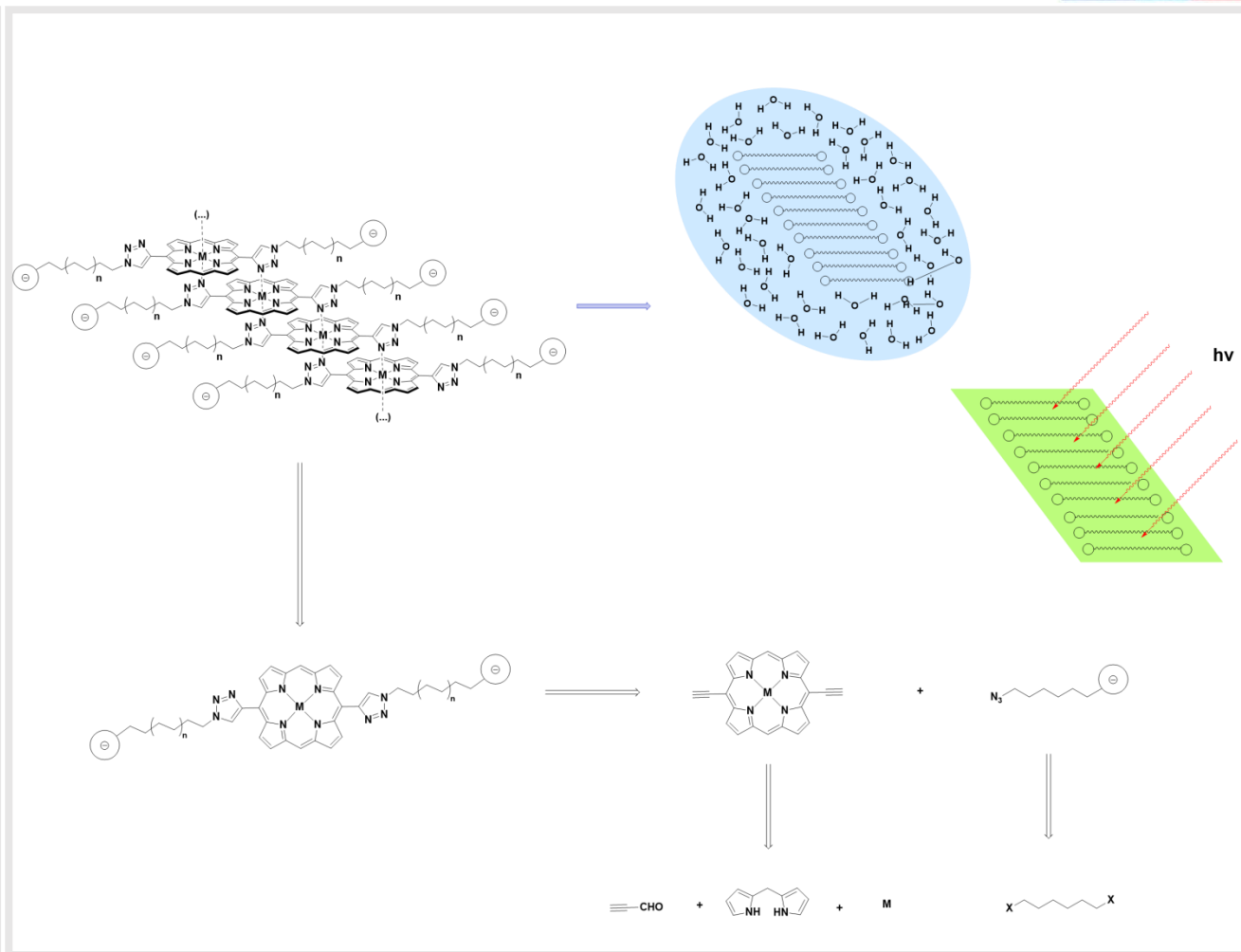
Miguel Rodríguez Fórneas; Joaquim Crusats Aliguer

Departament de Química Inorgànica i Orgànica. Secció de Química Orgànica



Les porfirines són macrocicles àmpliament estudiats per les seves propietats, sobretot aquelles relacionades amb les derivades de la seva aromaticitat. També presenten una cavitat en la qual es pot inserir un metall mitjançant la química de coordinació. Llavors, depenent de la seva estructura, algunes poden agregar-se i formar estructures amb funció antena per fotocaptació.

L'objectiu d'aquesta investigació, doncs, és sintetitzar les porfirines amfifíliques *meso*-5,15-bis(triazol-4-il)substituïdes autoacoblables fent ús de la «química de clic». D'aquesta manera, es disposarà d'un mètode convenient per funcionalitzar l'anell de porfirina amb un ventall de cadenes que els atorguin un caràcter bolaamfifílic. Al mateix temps, els anells de triazole formats permetran disposar d'un motiu supramolecular que conduirà cap a agregats col·loïdals multimoleculars amb una disposició ordenada dels cromòfors dins de les seves estructures per tal de modular les seves propietats.





Desenvolupament d'un nou mètode electrocatalític per a l' α -arilació d'oxazolones

Paula Rodríguez Marijuán; Xavier Companyó

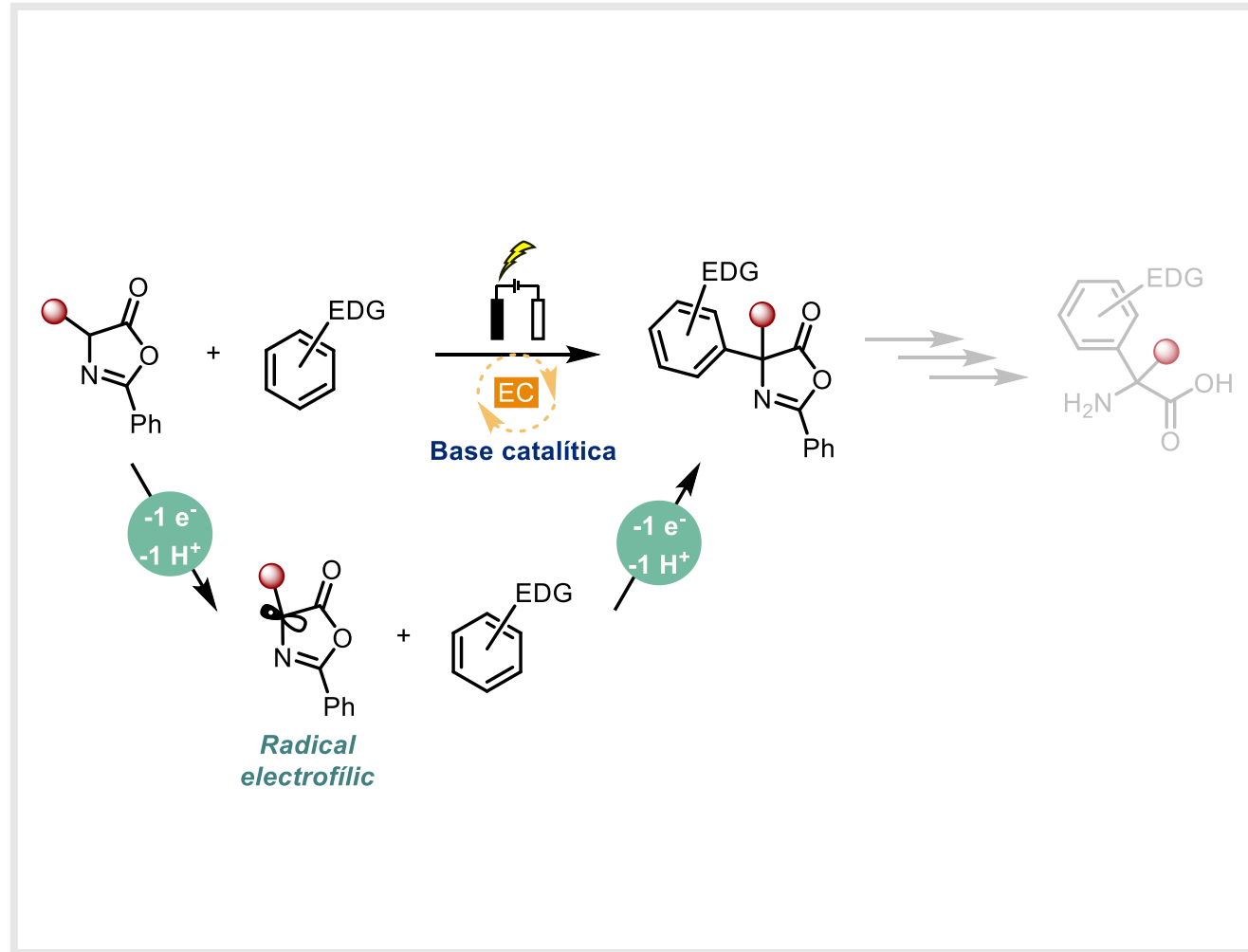
Departament de Química Inorgànica i Orgànica. Secció de Química Orgànica

Aquest treball de final de màster té com a objectiu el desenvolupament d'un nou mètode electrooxidatiu per a la síntesi d'aminoàcids quaternaris, que tenen una gran importància en química mèdica i farmacèutica.

Les oxazolones són heterocicles emprats tradicionalment en síntesi orgànica com a nucleòfils. El seu enolat pot reaccionar amb una àmplia gamma d'espècies electròfiles.

La metodologia proposada consisteix en l' α -funcionalització oxidativa d'oxazolones mitjançant electròlisi indirecta, cosa que permet invertir la polaritat reactiva d'aquests heterocicles. L'enolat, format per l'acció d'una base catalítica, és oxidat mitjançant un electrocatalitzador (EC) i genera un radical electrofílic que pot ser atrapat per compostos aromàtics rics en electrons. Una segona oxidació i rearomatització permeten la formació de l'oxazolona arilada α,α -disubstituída.

Mitjançant l'ús de voltamperometria cíclica (CV), s'ha fet un estudi racional de les condicions òptimes tant de formació de l'enolat com de la seva oxidació directa i indirecta.



Separació i identificació de PFAS mitjançant IMS integrat a UHPLC-MS/MS

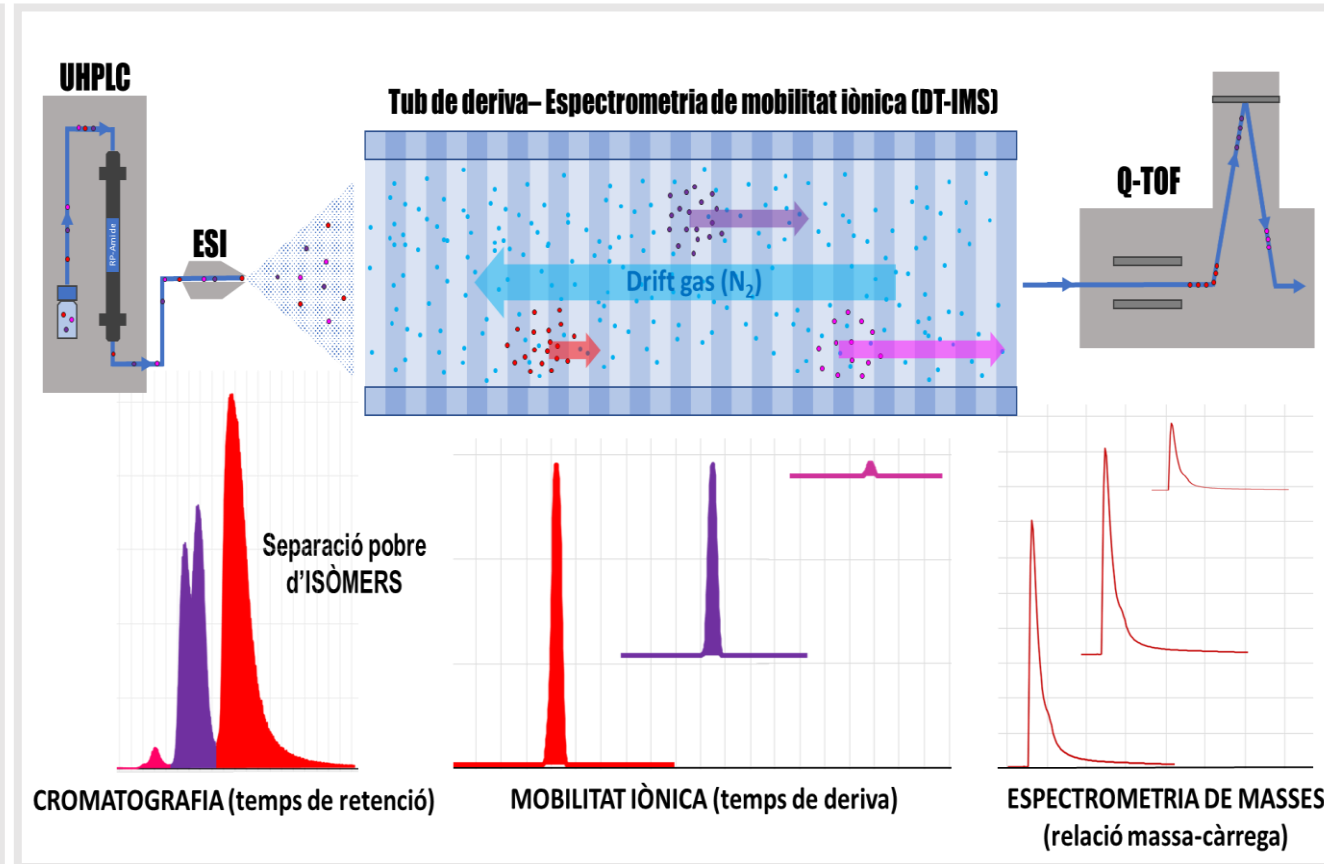
Daniel Rozúa;¹ Olga Jáuregui;² Francisco Javier Santos;¹ Encarnación Moyano¹

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

² Serveis Científics i Tecnològics de la Universitat de Barcelona



Les substàncies perfluoroalquilades (PFAS) són una família molt àmplia de substàncies antropogèniques amb aplicacions industrials. En els darrers anys s'han convertit en una de les principals preocupacions mediambientals degut a la seva persistència i toxicitat [1]. Les tècniques més comunes per a la determinació de PFAS són la cromatografia acoblada a l'espectrometria de masses, però tenen moltes limitacions a l'hora de distingir entre isòmers. Una nova tècnica instrumental emergent, la integració de l'espectrometria de mobilitat iònica (IMS) en sistemes de cromatografia-espectrometria de masses, permet obtenir dades selectives i ortogonals que faciliten la identificació i separació d'isòmers [2]. En aquest treball s'han estudiat 19 PFAS, identificades a partir de la seva massa exacta (m/z) i mobilitat iònica (*collision cross section*, CCS). S'ha estudiat també la seva confirmació amb AIF (*all ion fragmentation*) i s'ha comparat i optimitzat la viabilitat dels diferents modes de treball de la IMS (*single pulse vs. multiplexing mode*).



Referències

[1] Ellen T. Chang, Hans-Olov Adami, Paolo Boffetta, *Crit. Rev. Toxicol.*, **2016**, *46*, 279-331.

[2] James N. Dodds, Zachary R. Hopkins, Detlef R. U. Knappe, *Anal. Chem.*, **2020**, *92*, 4427-4435.

Síntesi i estudi d'azocompostos fotoactius per al seu ús en dispositius TFT

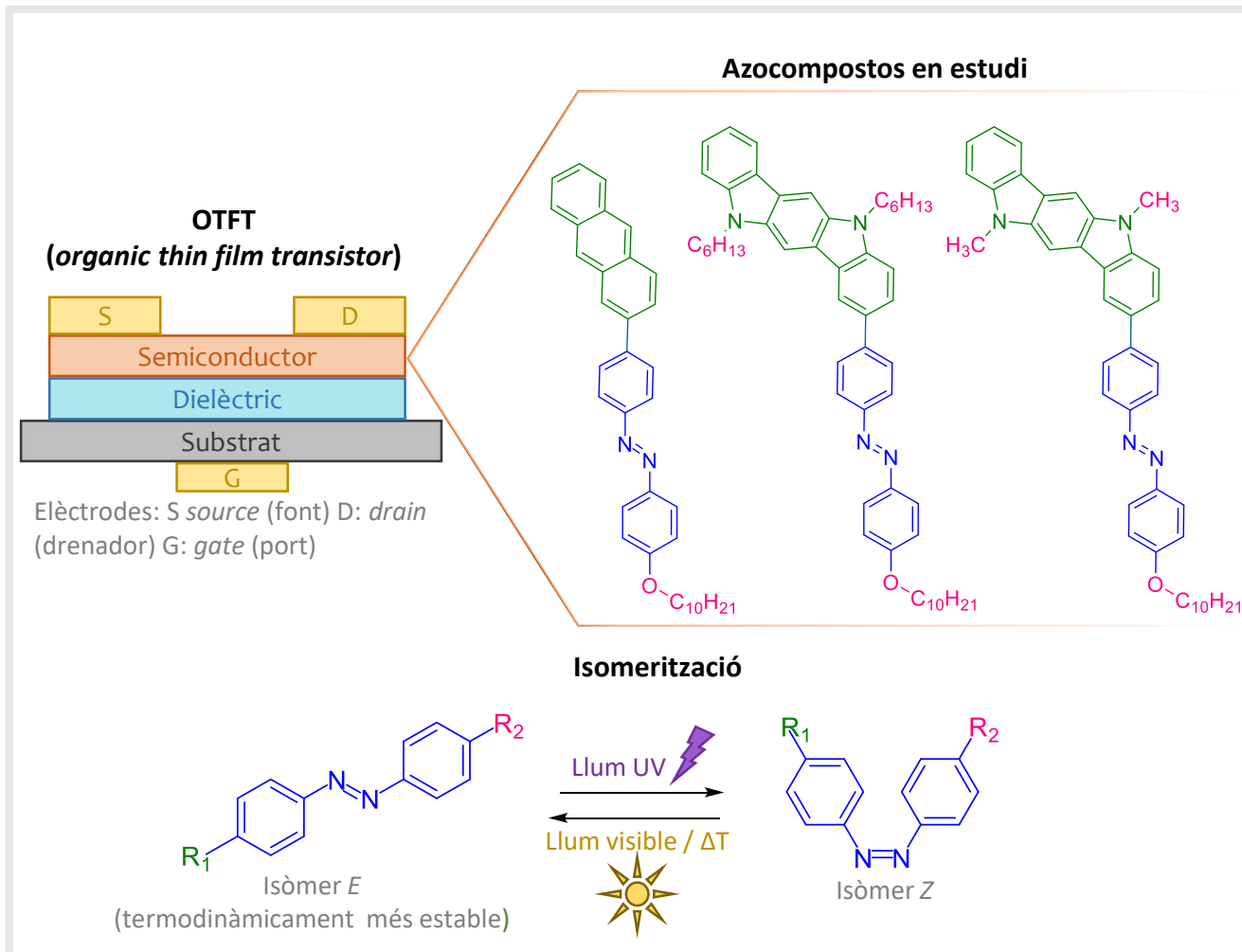
Camila Sánchez; Jaume Garcia; Dolors Velasco

Departament de Química Inorgànica i Orgànica. Secció de Química Orgànica



Els azocompostos són molècules orgàniques amb la unitat estructural $R-N=N-R'$. El doble enllaç $N=N$ genera dos possibles diastereoisòmers (E o Z) amb propietats físiques diferenciades. L'isòmer termodinàmicament més estable és generalment el E i, en irradiar-lo amb llum UV, s'isomeritza a l'isòmer Z . La regeneració de l'isòmer E es produeix en presència de llum visible o tèrmicament en absència de llum.

Els derivats d'azobenzè són cromòfors que es poden unir covalentment a unitats d'antracè o bisindole per donar lloc a nous sistemes de semiconductors fotoactius, que ofereixen la possibilitat de variar de manera controlada les propietats elèctriques del transistor sota la irradiació amb llum de la longitud d'ona adequada. Els compostos en estudi contenen extensos sistemes π , que els confereixen propietats semiconductoras, i cadenes alquílques que en milloren la solubilitat i afavoreixen la disposició òptima de les molècules en el dispositiu TFT.



Síntesi de 3,3-diarilpropilamines quirals i derivats biològicament actius

Martí Sidro;¹ Yisong Wen;¹ Antoni Riera;^{1,2} Xavier Verdaguer^{1,2}

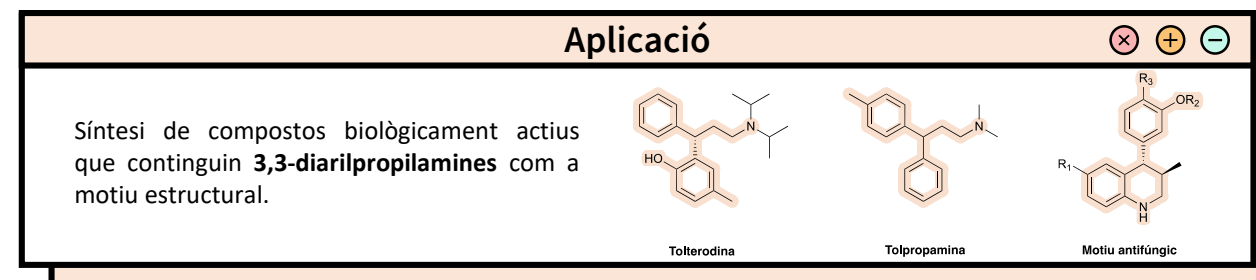
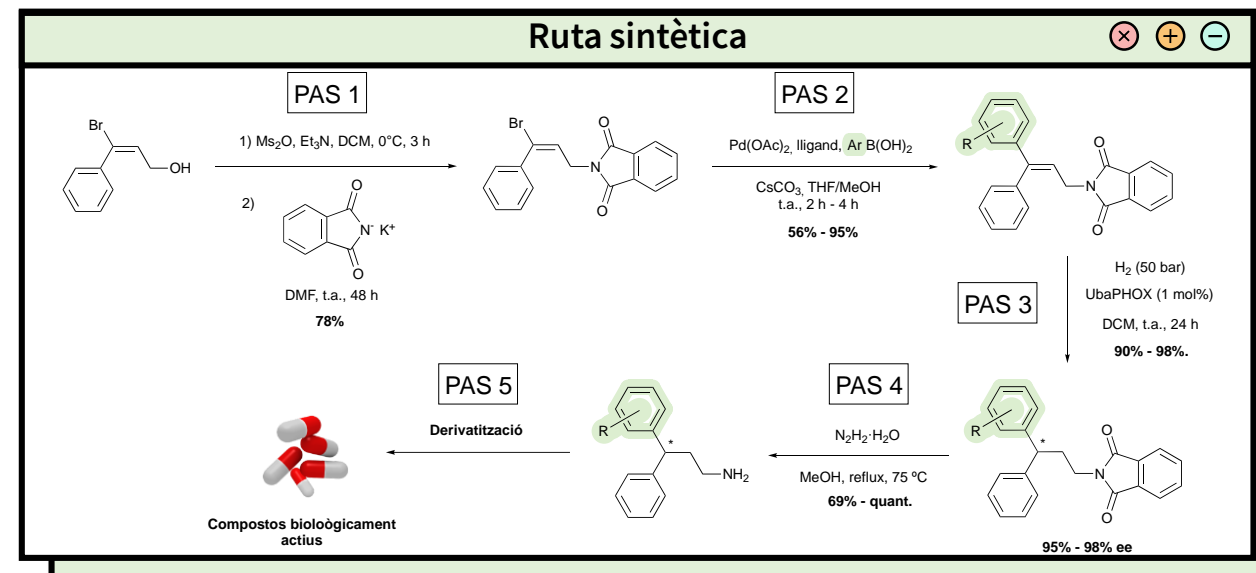
¹ Institut de Recerca Biomèdica (IRB Barcelona), Institut de Ciència i Tecnologia de Barcelona

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



Les amines quirals són estructures clau presents en nombrosos compostos biològicament actius ara fàrmacs, productes naturals o agroquímics [1,2]. En conseqüència, la síntesi enantioselectiva d'aquests motius estructurals és objecte de gran interès i esforços. No obstant això, hi ha certes estructures per a les quals encara no s'ha descrit un mètode sintètic general. Dins aquest grup s'encabeixen les 3,3-diarilpropilamines i els seus derivats.

En aquest projecte s'ha desenvolupat una metodologia innovadora per sintetitzar aquests compostos quirals amb alta enantioselectivitat i se n'ha estudiat la derivatització per mostrar l'aplicabilitat del mètode. Primer, es genera una bromoolefina *E* amb alta diastereoselectivitat (1). Tot seguit, un acoblament de Suzuki genera la diversitat de substrats (2). El pas clau del mètode és la reducció enantioselectiva de l'olefina amb el catalitzador UbaPHOX (3). Finalment, es desprotegeix l'amina (4) i es derivatitzen els substrats obtinguts (5).



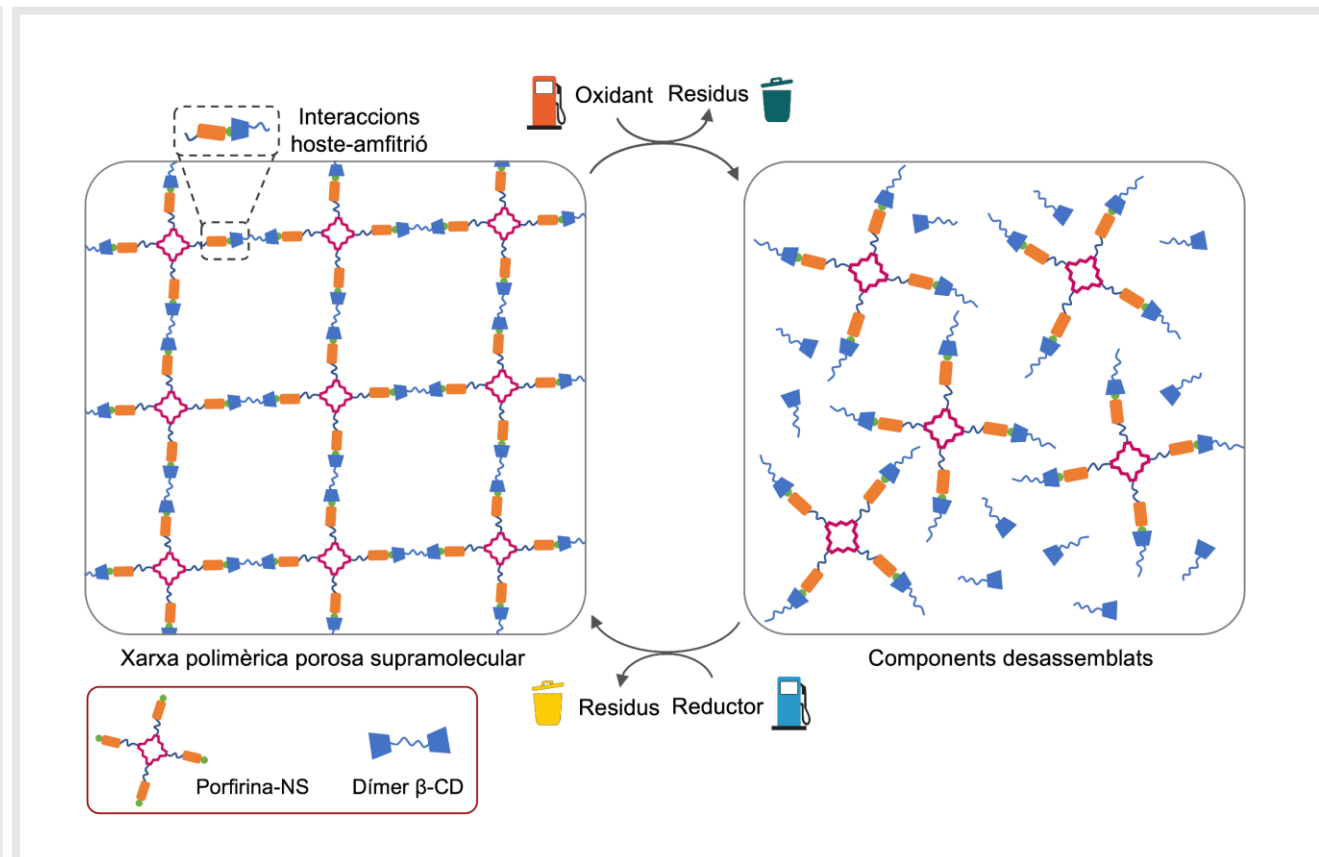
Autoassemblatge dissipatiu de porfirina basat en una xarxa polimèrica supramolecular porosa

Júlia Soler Vilà; Alessandro Sorrenti

Departament de Química Inorgànica i Orgànica. Secció de Química Orgànica



Avui dia, per superar les limitacions dels marcs metal·lo-orgànics cristal·lins, hi ha un interès creixent en el desenvolupament de xarxes poroses solubles formades per l'autoassemblatge en solució de blocs de construcció moleculars dissenyats oportunament. L'autoassemblatge dissipatiu (DSA) pot conduir a estructures i materials que existeixen lluny de l'equilibri termodinàmic mitjançant l'intercanvi continu d'energia amb l'entorn extern en forma de combustibles químics. El sistema que hem estudiat consisteix en una nova porfirina derivatitzada a la seva perifèria amb quatre fragments de naftalè sulfonat (NS), que es pot utilitzar com a unitat de construcció per al DSA de xarxes supramoleculares poroses en presència d'un dímer de β -ciclodextrina (β -CD). La formació de la xarxa és possible gràcies a interaccions β -CD/NS hoste-amfitrió, mentre que el DSA es pot controlar gràcies a la naturalesa *redox-responsive* d'un enllaç disulfur que es troba al centre del dímer de β -CD, en presència de combustibles químics redox.



Referències

- [1] J. Tian, H. Wang, D. W. Zhang, Y. Liu and Z. T. Li, *Natl. Sci. Rev.*, **2017**, 4, 426-436.
- [2] J. Tian, L. Chen, D. W. Zhang, Y. Liu and Z. T. Li, *Chem. Commun.*, **2016**, 52, 6351-6362.



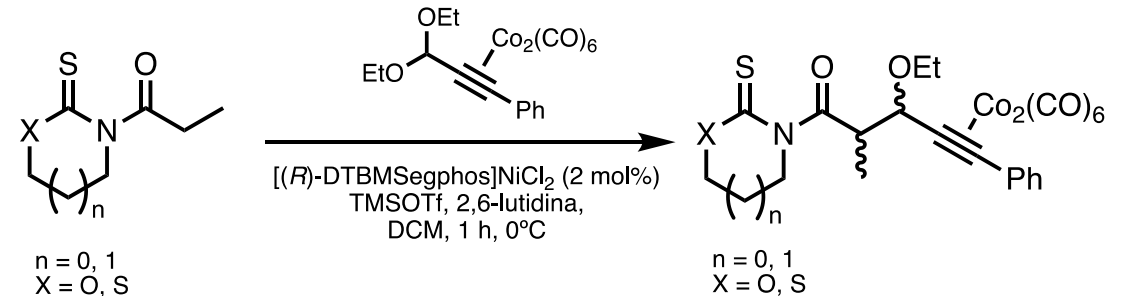
Síntesi enantioselectiva d'aldols protegits a partir de *N*-acil-tioimides i acetals propargílics

Xènia Tarrach; Miguel Mellado-Hidalgo; Pedro Romea; Fèlix Urpí

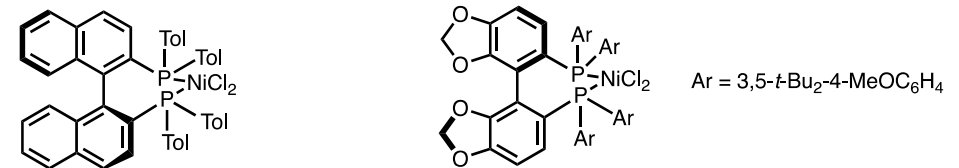
Departament de Química Inorgànica i Orgànica. Secció de Química Orgànica

La formació enantioselectiva d'enllaços C–C és encara avui un dels grans reptes de la síntesi orgànica. En aquest sentit, els compostos carbonílics, i més concretament els enolats metàl·lics, són d'especial interès gràcies a la seva rica reactivitat.

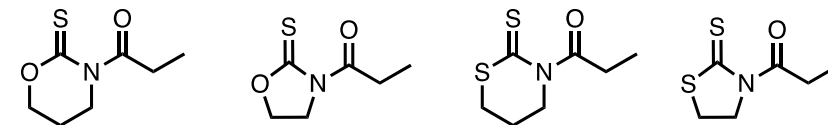
En el passat, el grup de recerca ha desenvolupat diferents metodologies enantioselectives mitjançant auxiliars quirals [1] i, durant els darrers anys i gràcies a l'avenç de la catàlisi asimètrica, s'han reportat reaccions directes amb *N*-acil-tioimides aquirals i acetals aromàtics catalitzades per compostos quirals de Ni(II) [2]. En el marc del present projecte s'ha desenvolupat una metodologia en què s'empren com a electròfils acetals propargílics, que obren la porta a un ampli ventall de funcionalitats: alcans i alquens per reducció, grups carbonil per hidratació i cicles saturats a través d'una Pauson-Khand.



> Optimització del catalitzador



> Optimització del material de partida



Referències

[1] J. Fernández-Valparis, P. Romea, F. Urpí, M. Font-Badia, *Org. Lett.*, **2017**, *19*, 6400-6403.

[2] M. Mellado-Hidalgo, P. Romea, F. Urpí *et. Al.*, *Org. Lett.*, **2023**, *25*, 659-664.

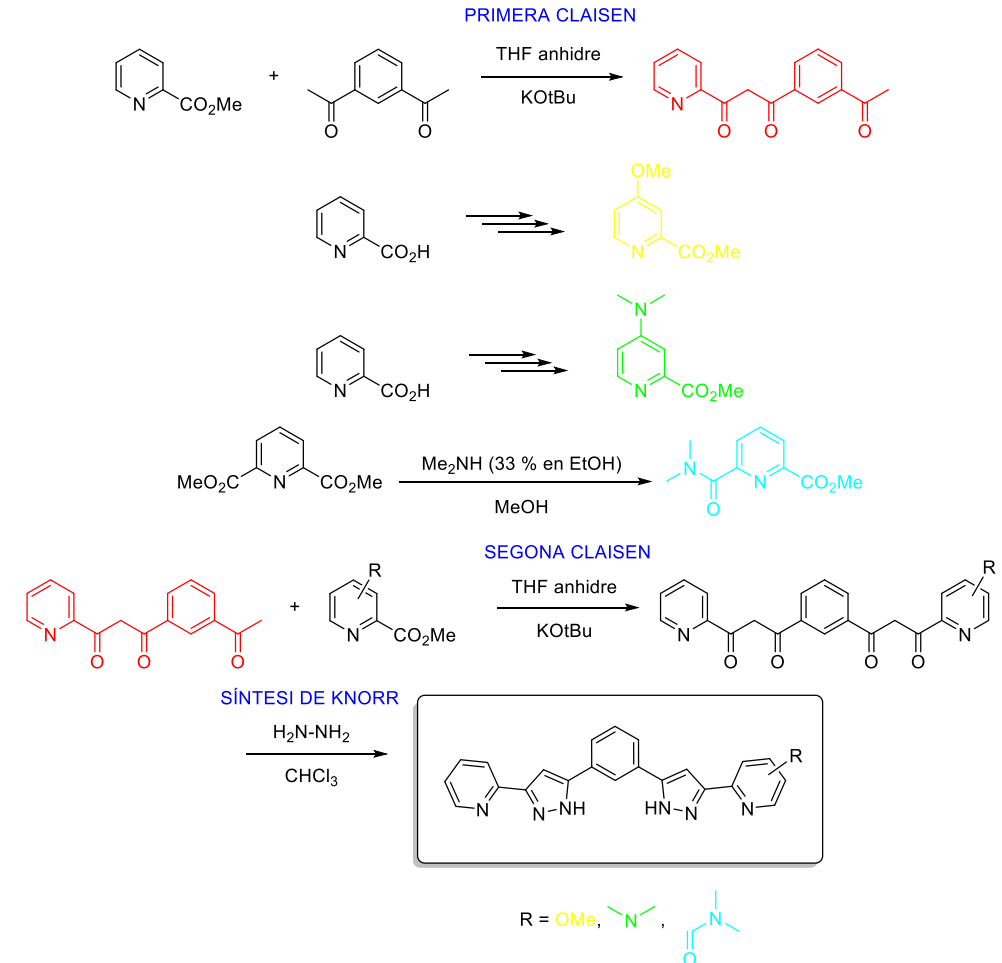


Síntesi de lligands pirazòlics per a la complexació amb metalls i aplicació posterior com a suport físic per a qbits

Diana Maria Tenica; Paul Lloyd-Williams; Jordi García Gómez

Departament de Química Inorgànica i Orgànica. Secció de Química Orgànica

Es reporta la síntesi de tres lligands pirazòlics per a la complexació amb metalls iònics. Aquests lligands són polidentats, consten de quatre àtoms d'*N*-donadors, i són asimètrics. La ruta sintètica escollida consisteix en dues condensacions de Claisen, que donen lloc a un compost tetracarbonílic; i dues síntesis de pirazole de Knorr, que porten al lligand pirazòlic final. Els lligands resultants es destinen a la formació de complexos que serviren de suport físic per a qbits, que podrien ser clau per construir ordinadors més potents que els actuals. Els qbits són una alternativa als bits, el sistema actual d'emmagatzematge i processament de les dades dels aparells informàtics. Els qbits necessiten un sistema físic amb dos estats quàntics contraris. Hi ha diverses alternatives que compleixen aquesta característica, com ara els circuits quàntics o els fotons. Una altra opció és fer ús de molècules. Aquest mètode ofereix avantatges importants comparat amb els altres.



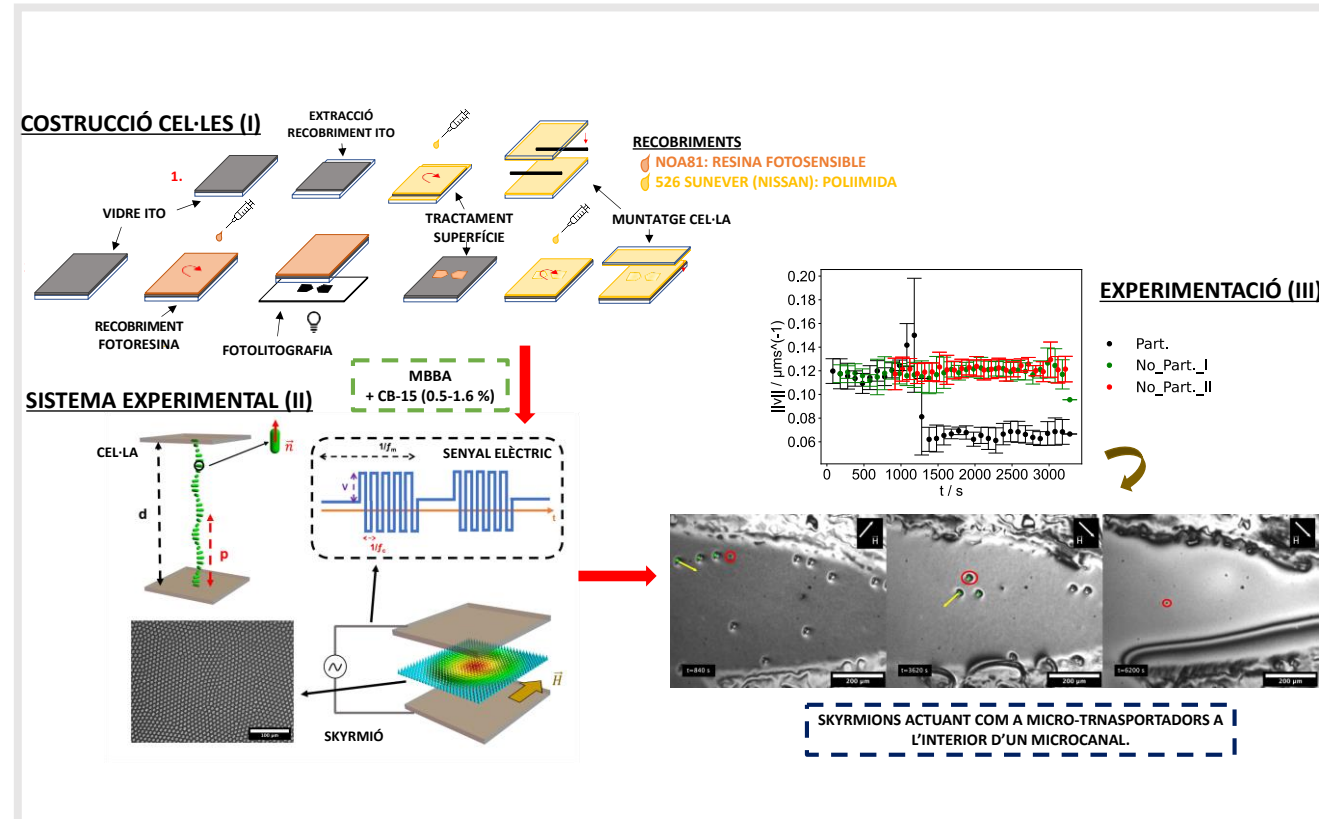


Partícules col·loïdals virtuals en cristalls líquids quirals

Joel Torres Andrés; Jordi Ignés-Mullol

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

Els skyrmions són estructures tipològicament protegides [1] on el director del cristall líquid fa un gir de 180° cosa que dona lloc a l'aparició d'una estructura toroidal. Aquests solitons metaestables sorgeixen en sistemes de cristall líquid quiral on s'ha provocat una frustració a través d'imposar un confinament (introduint-lo a l'interior d'una cel·la), que sigui comparable al pas de rosca dels mesògens del cristall líquid. El grau de frustració es determina a partir de la relació entre el gruix de la cel·la i el pas de rosca del cristall líquid. Aquestes quasipartícules poden ser mogudes a través de l'aplicació d'un camp elèctric alternant i modulad. El moviment es produeix per canvis en la rotació de l'eix principal dels skyrmions i en la seva pèrdua de simetria axial. Els skyrmions es mouen perpendicularment al camp director del cristall líquid. Per tant, un control del camp director permet un control del seu moviment.



Referències

[1] Sohn, H. R. O.; Liu, C. D.; Smalyukh, I. I. (2019). Schools of skyrmions with electrically tunable elastic interactions. *Nature Communications* 10(1), 4744.

Simulació de nanogels termosensibles a la mesoescala

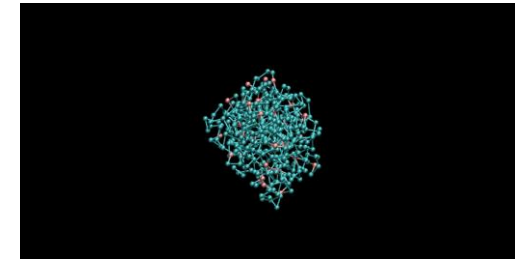
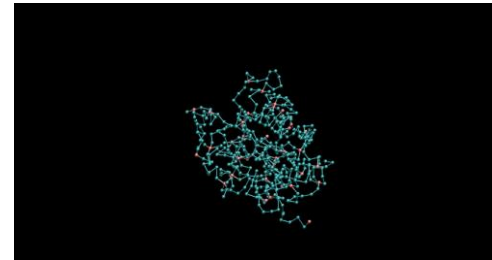


Daniel Valero; Pablo M. Blanco; Francesc Mas; Sergio Madurga

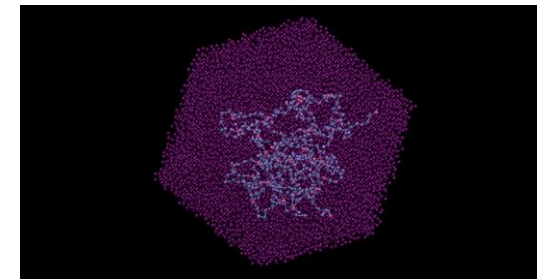
Departament de Ciències de Materials i Química Física. Secció de Química Física

Els nanogels termosensibles consisteixen en aquells gels en què es produeix un canvi conformacional amb la variació de la temperatura d'un estat expandit a un de col·lapsat. Aquest comportament dona lloc a la possibilitat d'actuar com a portadors i lliuradors de fàrmacs [1].

En aquest treball provem de reproduir aquest comportament mitjançant simulacions en la mesoescala a diferents nivells de descripció del sistema, on totes les simulacions es fan dins d'un model *coarse-grained* del nanogel, i cada monòmer del polímer que forma el nanogel ve descrit per un *bead*. El model menys descriptiu correspon a dinàmiques de Langevin on les molècules d'aigua es tracten de forma implícita. D'altra banda, també utilitzem un model amb un major nivell de descripció: simulacions de dinàmica de partícules dissipatives (DPD) on les molècules d'aigua es tracten de forma explícita i són modelades com a agrupacions de molècules d'aigua en forma de *beads* [2].



Dinàmica de Langevin: $m\ddot{Q} = -\nabla U(Q) - \gamma m\dot{Q} + \sqrt{2m\gamma k_b T} R(t)$



$$\text{DPD: } f_i = \sum_{i \neq j} (F_{ij}^C + F_{ij}^D + F_{ij}^R)$$

Referències

- [1] M. Quesada-Pérez, S. Ahualli, A. Martín-Molina, J. Chem. Phys., **2014**, 141 (12), 124903.
 [2] M. B. Liu, G. R. Liu, L. W. Zhou, J. Z. Chang, Arch. Computat. Methods. Eng., **2015**, 22 (4), 529-556.

Identificació i caracterització de proantocianidines en extracte natural per UHPLC-Ion mobility-HRMS

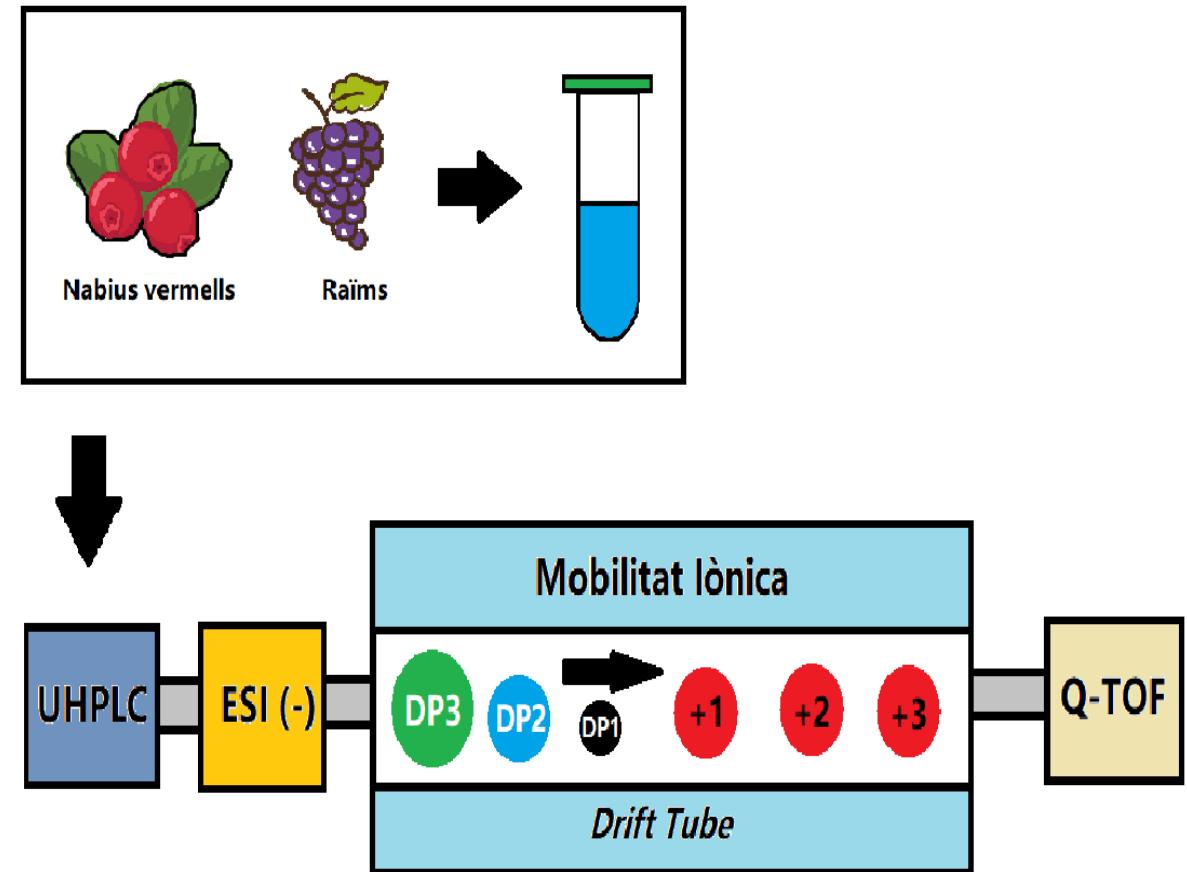


Ruiyuan Wang;¹ Olga Jáuregui;² Luis Puignou;¹ Encarnación Moyano¹

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

² Centres Científics i Tecnològics de la Universitat de Barcelona

Les procianidines són flavan-3-ols oligomèrics i polimèrics, amb la catequina i l'epicatequina com a unitats monomèriques comunes. Aquesta família de compostos presenta propietats bioactives i s'ha detectat en una gran varietat d'aliments com ara raïm i nabius vermells. Segons el tipus d'enllaç interflavànic entre les unitats monomèriques adjacents, es classifiquen com a tipus A o tipus B. Les variacions en el grau de polimerització, la unitat monomèrica i el tipus d'enllaç porten a una complexitat estructural considerable i a un gran nombre d'isòmers, fet que en dificulta la caracterització i identificació. L'objectiu d'aquest estudi és utilitzar la cromatografia líquida d'ultraalta resolució (fase inversa) acoblada a espectrometria de masses d'alta resolució amb electroesprai (mode negatiu) i mobilitat iònica en tub de deriva (DTIMS) per identificar i caracteritzar procianidines de diferent grau de polimerització en extractes d'aliments, i obtenir alhora dades de CCS (secció de col·lisió transversal) per incloure-les en les bases de dades existents.



Termes a fons

Aquest apartat recull algunes aportacions que han sorgit en matèria de terminologia de l'àmbit de la química en l'edició de 2023 del Masterquímica:

- propostes denominatives (*coformador*, *química de clic*) i l'explicació de la formació o procedència d'un terme (*skyrmió*, *mesogen*);
- la publicació d'entrades noves al Cercaterm (*elastòmer de cristall líquid* i *elastòmer líquid cristal·lí monodomini*).

Els termes estan continguts al Sens Dubte (ub.edu/sens-dubte), el gestor de consultes lingüístiques i terminològiques dels Serveis Lingüístics de la Universitat de Barcelona. Es poden consultar des del cercador, restringint la cerca seleccionant la temàtica [Masterquímica](#) perquè apareguin les entrades vinculades específicament a aquestes jornades, o [Química](#), si es vol consultar el conjunt d'entrades corresponents a aquest àmbit.

- [coformador](#)
- [mesogen](#)
- [química de clic](#)
- [skyrmió](#)
- [elastòmer de cristall líquid](#)
- [elastòmer líquid cristal·lí monodomini](#)

Enllaços d'interès

[Multicercadors](#)

UBTERM:

[Diccionari de materials: ciència i tecnologia](#)

[Vocabulari d'enginyeria química](#)

[Vocabulari de química](#)

TERMCAT:

[Cercaterm](#)

[Diccionari de química](#)

elastòmer de cristall líquid

 **termcat**
[Font]

ca **elastòmer de cristall líquid**, n m

ca **elàstomer líquid cristal·lí**, n m

en **liquid crystal elastomer**, n

en **liquid crystalline elastomer**, n

en **LCE**, n *sigla*

<Química > Química orgànica>

Definició

Polímer de cristall líquid lleugerament reticulat que combina l'elasticitat d'un elastòmer amb l'autoorganització de la fase cristal·lina líquida.



elastòmer líquid cristal·lí monodomini

 **termcat**
[Font]

ca **elastòmer líquid cristal·lí monodomini**, n m

ca **elastòmer de monocristall líquid**, n m *sin.*
compl.

en **liquid single-crystal elastomer**, n

en **LSCE**, n *sigla*

<Química > Química orgànica>

Definició

Polímer líquid cristal·lí lleugerament reticulat que combina l'elasticitat d'un elastòmer amb l'autoorganització de la fase líquida cristal·lina orientada en una única direcció.



MASTERQUÍMICA XVIII

Facultat de Química

Jornades de presentació de treballs experimentals de màster
de la Facultat de Química (del 23 de maig a l'1 de juny de 2023)

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

Amb la col·laboració dels Serveis Lingüístics de la Universitat de Barcelona

Edició: desembre de 2023



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

