



MASTERQUÍMICA XIX

Facultat de Química

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

Del 22 al 30 de maig de 2024

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

Núria Escaja Sánchez, secretària de la Facultat i presidenta de la Comissió
Joan Dosta Parras, representant del professorat de la secció d'Enginyeria Química
Elisabet Fuguet Jordà, representant del professorat de la secció de Química Analítica
Jessica Giró Paloma, representant del professorat de la secció de Ciència i Enginyeria dels Materials
Montserrat Terrazas Martinez, representant del professorat de la secció de Química Orgànica
Xavier Vendrell Villafuela, 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 (pel que fa a assessorament lingüístic i terminologia), i el suport d'Asier Bergara, becari de dinamització lingüística dels Serveis Lingüístics de la Universitat de Barcelona durant el curs 2023-24.

Il·lustració de la portada

Mosaic de la rectoria de la Universitat de Lisboa, Portugal

MASTERQUÍMICA XIX

Facultat de Química

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

Comissió de Dinamització Lingüística



UNIVERSITAT DE
BARCELONA
Facultat de Química

Presentació

Des de la seva primera edició l'any 2005, la Comissió de Dinamització Lingüística de la Facultat de Química organitza les jornades Masterquímica, adreçades a tots els estudiants que cursen estudis de màster a la Facultat. Per participar-hi, els estudiants han de confeccionar un pòster i un resum sobre el seu treball de recerca, íntegrament en català. Durant el transcurs de les jornades, els estudiants exposen el seus pòsters en un format similar al d'un congrés científic, que són avaluats pels membres de la mateixa comissió. L'objectiu original i principal del Masterquímica és promoure la divulgació científica en català i, en aquest sentit, la tria dels treballs de recerca dels màsters és una bona oportunitat ja que permet incidir en els inicis dels futurs investigadors en el món de la recerca.

Més enllà de l'objectiu lingüístic, però, l'increment progressiu del nombre de participants al llarg de totes les edicions, la representació de pràcticament tots els màsters que s'imparteixen a la Facultat i la implicació activa de professorat dels màsters, posen de manifest que aquestes jornades són ahora un molt bon complement a la formació que els estudiants de màster reben a la facultat. A més a més, l'elaboració del pòster i del resum es completa i s'enriqueix amb les explicacions orals del treball que els estudiants tenen l'oportunitat de fer en el punt de trobada que les jornades representen per a estudiants i professorat dels diferents àmbits.

A partir de la setzena edició, se'n publica el llibre de resums en el Dipòsit Digital de la Universitat de Barcelona, dins de la col·lecció Masterquímica, que és una altra molt bona eina de difusió de la recerca desenvolupada per investigadors novells en qualsevol de les

branques de la química, de l'enginyeria química i de l'enginyeria de materials a la Facultat de Química.

Aquest curs, la dinovena edició del Masterquímica ha tingut lloc del 22 al 30 de maig de 2024. Hi han participat un total de 45 estudiants (un 40 % aproximadament del total d'estudiants de màster de la facultat), cosa que el consolida com una activitat acadèmica molt ben valorada. És remarcable mencionar també que, igual que la participació, la qualitat dels pòsters presentats també ha anat millorant edició rere edició, especialment quant al disseny i la capacitat comunicativa, dos dels aspectes que s'avaluen. Tot i que únicament es lliuren tres premis, el grau d'excel·lència dels pòsters exposats en aquesta edició ha estat molt destacable.

En un altre ordre de coses, el Masterquímica té de valuosos que mostra l'ús i el context habitual on apareixen termes nous i que contribueix, sense cap mena de dubte, a l'enriquiment de la terminologia catalana en l'àmbit de la química. La revisió terminològica que els Serveis Lingüístics de la UB fan dels resums deixa en cada edició algunes aportacions que es van recollint.

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, la inclusió de termes en fitxes terminològiques del Cercaterm o l'estudi de termes ja existents gràcies a informació o precisions noves. En trobareu més detalls en l'apartat d'aquesta publicació que hem anomenat «Termes a fons».

Índex de resums

Fatima Aakki Akhnikh; Mohit Kumar

Nanomaterials supramoleculares sensibles a l'heparina per a aplicacions de detecció i diagnòstic

7

P. Álvarez; M. T. Ignazzitto; M. Casas; C. Martínez-Juvés; X. Rovira; A. Llebaria; X. Gómez-Santacana

Desenvolupament de lligands fotocommutables covalents per a l'estudi de GPCR amb llum

8

Emma Autó Van der Hoeven; Pere Llopart Roca; Bernardí Bayarri Ferrer

Biocarbó millorat per tractar microcontaminants de l'aigua: adsorció en lots i columna

9

Berta Bori-Bru; David López; S. Marin; S. Madurga; M. Cascante; P. de Atauri; F. Mas

Identificació de dianes terapèutiques en el metabolisme tumoral mitjançant models computacionals

10

Raúl Cabeza; Sonia Sentellas; José F. García

Seguint les petjades del vi: anàlisi de ceràmiques romanes de Girona

11

Maria Camacho Molina; Alessandro Sorrenti

Marc supramoleculares orgànics controlats per combustibles químics

12

Clara Canals-Martí; Juan Cruz Carrizo; M. Silvia Diaz-Cruz

Anàlisi de contaminants emergents en tomàquets comercials a Barcelona per HPLC-MS

13

Jeanette Carrasco Prieto; Julia Mayans Ayat

Cercant sistemes multipropietat: emissió de llum blanca i relaxació lenta en xarxes metal·loorgàniques

14

M. Carrera; J. L. Garcés; F. Mas; S. Madurga; P. M. Blanco

La influència de l'estirament mecànic en les propietats d'un polielectròlit feble

15

Carlos Cruz; Francisco Javier Luque; Javier Vázquez; Enric Herrero

Desenvolupament d'un model ML per predir distribucions atòmiques 3D d'hidrofobicitat

16

Artur Donlo Benito; Anna M. Costa; Pere Romea; Fèlix Urpí

Reaccions aldòliques creuades organocatalítiques d'aldehids α,β -insaturats

17

Alexandre Escarrà Pont; Joaquim Crusats Aliguer

Porfirines autoassemblables substituïdes amb triazolil com a nous bolaamfífils

18

María Fernández; Ariadna Vila; Montserrat Terrazas

Noves estructures oligonucleotídiques sensibles a estímuls interns i amb potencial terapèutic

19

Jiawei Gao; Guglielmo Spinelli; Ernesto Nicolás; Patrick Gamez

Síntesi de complexos de Ru(II) per a la teràpia fotodinàmica

20

Álvaro García-Cid; Eduard Balaguer-Garcia; Pedro Romea; Fèlix Urpí

Oxidació regioselectiva de compostos carbonílics β,γ -insaturats amb O_2 catalitzada per Cu(II)

21

Mar García Del Amo; Guillermo Romo Islas; Laura Rodríguez Raurell

Estudi de l'autoassemblatge i propietats luminescents d'estructures angulars de Au(I) i Pt(II)

22

Raúl García-García; Aina Mir-Cerdà; Mercè Granados; Sonia Sentellas; Javier Saurina

Caracterització de fulles d'olivera segons la capacitat antioxidant i el perfil polifenòlic

23

Miquel Garcia-Molina; Àlex Tarancón; Anna Rigol

Caracterització α/β de lixiviats de NORM

24

Marta Gil Bonillo ; Narcís Homs Martí; Jarosław Serafin		Laura Meiya Mazo Pirla ; Beatriz Piniello; Olga Moroz; Yu Liu; Gideon Davies; Ben Schumann; Carme Rovira		Andrés Rodríguez Gallego ; Xavier Vendrell Villafruela; Lourdes Mestres Vila	
<i>Cap a una energia neta: fotocatalitzadors innovadors per a la producció d'hidrogen</i>	25	<i>Determinació estructural i simulació computacional d'un enzim dissenyat per a la química bioortogonal</i>	32	<i>Materials ferroelèctrics bicapa per a condensadors d'emmagatzematge d'alta energia</i>	39
Sergi González-Martínez ; Yuzelfy Mendoza-Gamero; Daniel Sainz-Garcia; Albert Romano-Rodríguez		David Mir ; Anton Vidal-Ferran		Mariona Roura Bosch ; Pol Barcelona Pons; Elena Xuriguera Martín	
<i>Xarxes metal·loorgàniques basades en el trifenilè per aplicacions catalítiques</i>	26	<i>Hidroformilació catalítica supramolecular d'al·lens amb complexos de rodi</i>	33	<i>Impressió 3D de silicones bicomponents per a dispositius mèdics</i>	40
Otman Lamrhari Elbiad ; Jordi Garcia; Paul Lloyd-Williams		Danica Mostoles ; Oscar Núñez		Paula Ruiz ; Ferran Campillo i López; Mercè Garí	
<i>Síntesi de lligands per a complexació d'ions metàl·lics com a dispositius moleculars</i>	27	<i>Caracterització i classificació de mels mitjançant empremtes LC-LRMS i quimiometria</i>	34	<i>Exposició a pesticides neuro tòxics en dones embarassades de la Garrotxa</i>	41
Maialen Mancisidor ; Estela Giménez; Victoria Sanz-Nebot		A. Oliveres ; A. Vanrell; B. Limburg		Laura Sánchez-Castillo ; Leah O'Neill; Xènia Tarrach; Anna M. Costa; Pedro Romea; Fèlix Urpí	
<i>Anàlisi de glicans biomarcadors per capLC-MS en malalties inflamatòries</i>	28	<i>Síntesi de díades de porfirines per a la utilització en transport electrònic fotoinduït en liposomes</i>	35	<i>Reaccions directes, catalítiques i asimètriques per a la construcció d'enllaços C—C</i>	42
Joel Martin Morales ; Joan Dosta; Rodrigo Soto		Miquel Ortiz ; Eva María Herrera; Cintia Flores		Aina Serra Vert ; Laura G. Rodríguez; Ben Bradshaw	
<i>Producció d'acetat propionat de cel·lulosa sota diferents temperatures</i>	29	<i>Multianàlisi d'alt rendiment dels compostos de la llista d'observació europea 2022/1307 en aigües</i>	36	<i>Alquilació descarboxilativa activada amb MHAT: accés a productes d'acoblament no ramificats</i>	43
Donna Martínez López ; Ouldouz Gashgaei; Rodolfo Lavilla		Manal Ouchen Lamaiz ; Mercè Granados; Jose Luis Beltrán		Albert Sicre Conesa ; Adrián Gómez-Sánchez; Anna de Juan; Maria Marsal; José-Javier Ruiz; Pablo Loza-Álvarez	
<i>Síntesi de sondes fluorescents amb potencial biomèdic mitjançant reaccions multicomponents</i>	30	<i>Recuperació i purificació de polifenols en residus agroalimentaris amb la resina S7968</i>	37	<i>Fusió d'imatges hiperespectrals de fluorescència i Raman per a l'estudi de mostres cel·lulars</i>	44
Jordi Martínez Morató ; Manuel Martínez; Montserrat Ferrer		Mariana Palape-Oxa ; Albert Contreras-Llin; Jose M. Diaz-Cruz; M. Silvia Diaz-Cruz			
<i>Compostos de valència mixta Co(III)/Fe(II) amb pont cianur i fragments fotodinàmics</i>	31	<i>Estudi de l'adsorció de filtres solars UV sobre microplàstics mitjançant HPLC-MS/MS</i>	38		

Rubén Torres; Yisong Wen; Xavier Verdaguer;
Antoni Riera

*Hidrogenació asimètrica de quinolines i isoquinolines
amb catalitzadors d'iridi* **45**

Adrián Ventura Crespín; Xavier Vendrell Villafruela
Lourdes Mestres Vila

*Metalls de la primera sèrie de transició i fases MAX
suportats sobre feltre de carboni com a catalitzadors en
química sostenible* **46**

David Vera-Rivera; Jessica Giró-Paloma

*Desenvolupament de microcàpsules amb residus
plàstics per contenir PCM* **47**

Lluc Vila; Pau Guillamon; Víctor Maestre;
Víctor Ruiz; Xavier Ariza; Jordi Garcia

*Nova reacció de ciclació d'hemisilacetals via activació
C—H al·lilica* **48**

Pol Vilariño; Jordi Garcia; Xavier Ariza

*Síntesi i avaluació de lligands solubles en aigua selectius
per lantànids* **49**

Berta Vilarrúbies i Palomeras; Àngels Sahuquillo;
Dolores Barrón

*Optimització de l'extracció en fase sòlida dispersiva
per a l'aïllament d'arsenosucres en algues* **50**

Termes a fons **51**

Nanomaterials supramoleculars sensibles a l'heparina per a aplicacions de detecció i diagnòstic

Fatima Aakki Akhnikh; Mohit Kumar

Departament de Química Inorgànica i Orgànica. Secció de Química Orgànica

Comissió de Dinamització Lingüística



UNIVERSITAT DE
BARCELONA

Facultat de Química

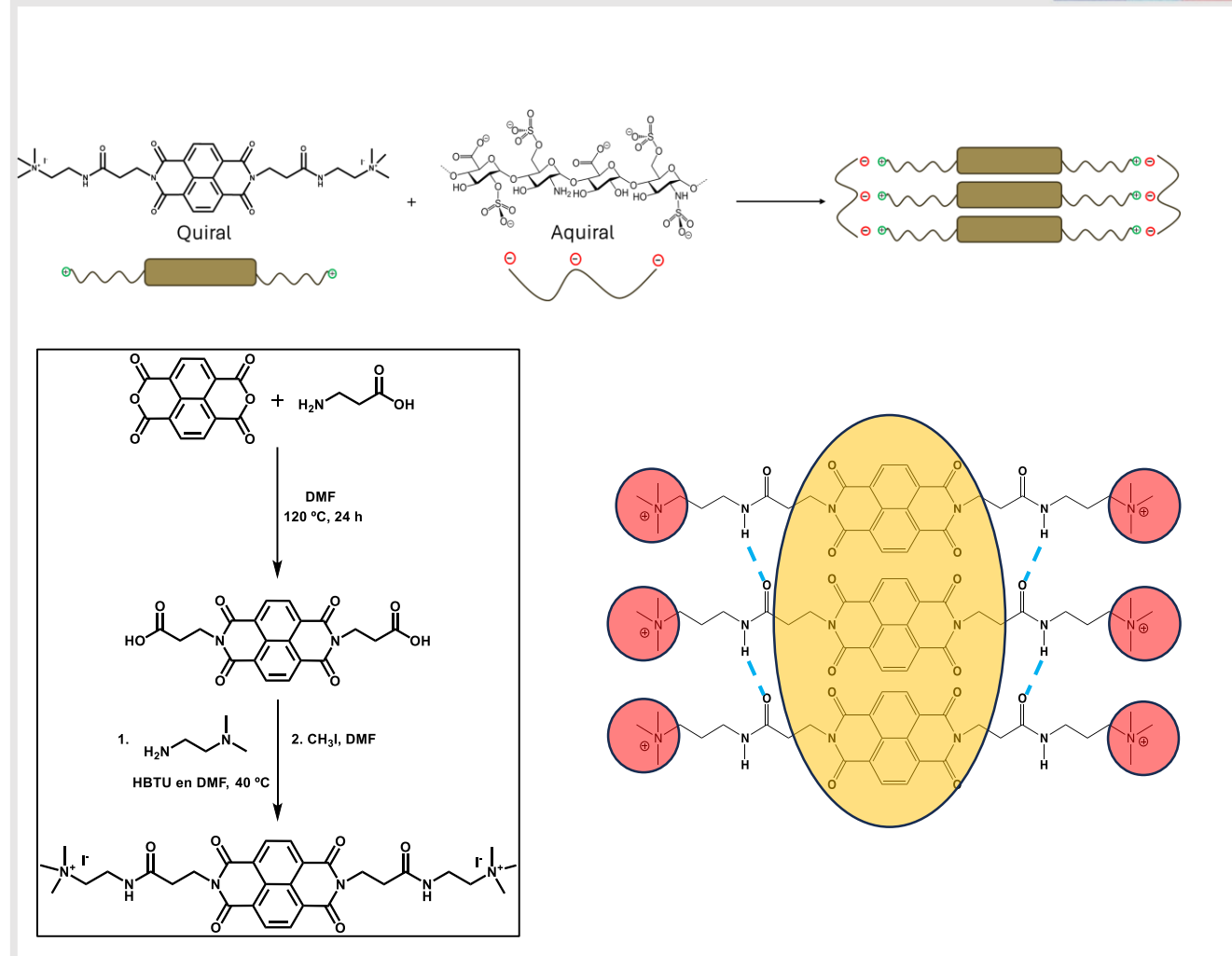


L'heparina serveix com a medicament anticoagulant crucial, i interacciona amb diverses proteïnes per regular les activitats biològiques.

En aquest estudi s'ha investigat la síntesi i l'autoassemblatge de derivats de la naftalendiimida (NDI) i la seva unió amb l'heparina. Aquests derivats es formen mitjançant interaccions d'apilament π - π entre els anells aromàtics i enllaços d'hidrogen entre els grups amida de les cadenes.

En estudis previs aquests derivats no tenien interaccions per pont d'hidrogen; per això, s'han incorporat grups que formen ponts d'hidrogen per veure si tenen un efecte positiu en la consolidació de l'estructura supramolecular.

Per caracteritzar l'estructura helicoidal supramolecular formada s'utilitzaran tècniques com ara l'absorció UV-Vis, la fluorescència, l'espectroscòpia de dicroisme circular (CD), la microscòpia electrònica de transmissió (TEM), la microscòpia de força atòmica (AFM) i la microscòpia de fluorescència confocal (CLSM).



Desenvolupament de lligands fotocommutables covalents per a l'estudi de GPCR amb llum

P. Álvarez; M. T. Ignazzitto; M. Casas; C. Martínez-Juvés; X. Rovira; A. Llebaria; X. Gómez-Santacana

Medicinal Chemistry & Synthesis (MCS), Institut de Química Avançada de Catalunya (IQAC-CSIC)

Comissió de Dinamització Lingüística

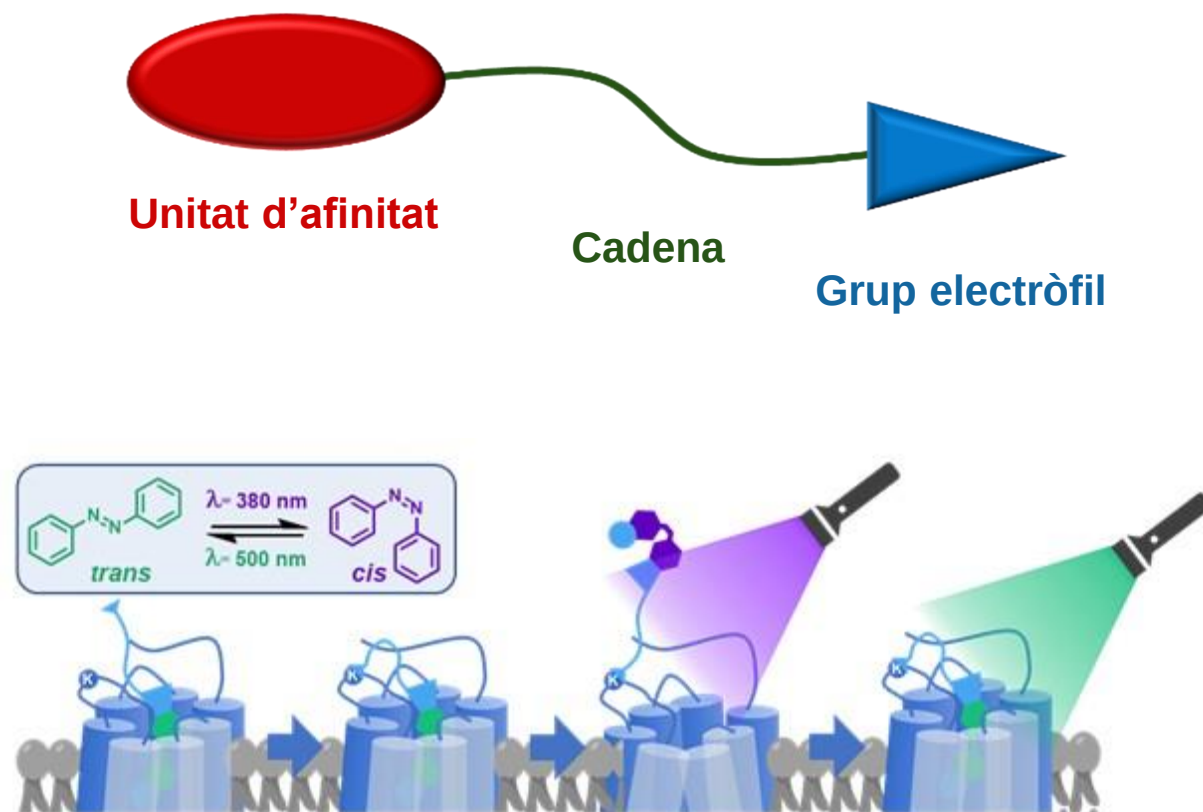


Facultat de Química



Un dels desafiaments principals en el desenvolupament de fàrmacs és aconseguir selectivitat, ja que molts receptors terapèutics tenen una gran expressió en diferents parts d'un organisme. Aquest fet provoca que els fàrmacs no només hagin de ser selectius per a la proteïna diana, sinó també presentar una elevada especificitat espaciotemporal en la zona a tractar. La fotofarmacologia és un camp d'investigació relativament recent, que utilitza lligands fotocommutables, l'activitat dels quals es pot regular a través d'il·luminació amb una longitud d'ona determinada que permet aquest control espaciotemporal de l'activitat de proteïnes diana.

En aquest treball hem desenvolupat diferents lligands fotocommutables covalents els quals tenen com a diana terapèutica els receptors β -adrenèrgics. Els lligands sintetitzats presenten una estructura bifuncional amb dues unitats: 1) una unitat d'afinitat, que interacciona amb el lloc d'unió del receptor, i 2) un grup electròfil, que té la funció de punt d'unió covalent amb la proteïna. Les dues unitats estan unides a través d'una cadena que permet modular la llargada del lligand.



Biocarbó millorat per tractar microcontaminants de l'aigua: adsorció en lots i columna

Emma Autó Van der Hoeven; Pere Llopart Roca; Bernardí Bayarri Ferrer

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

Comissió de Dinamització Lingüística



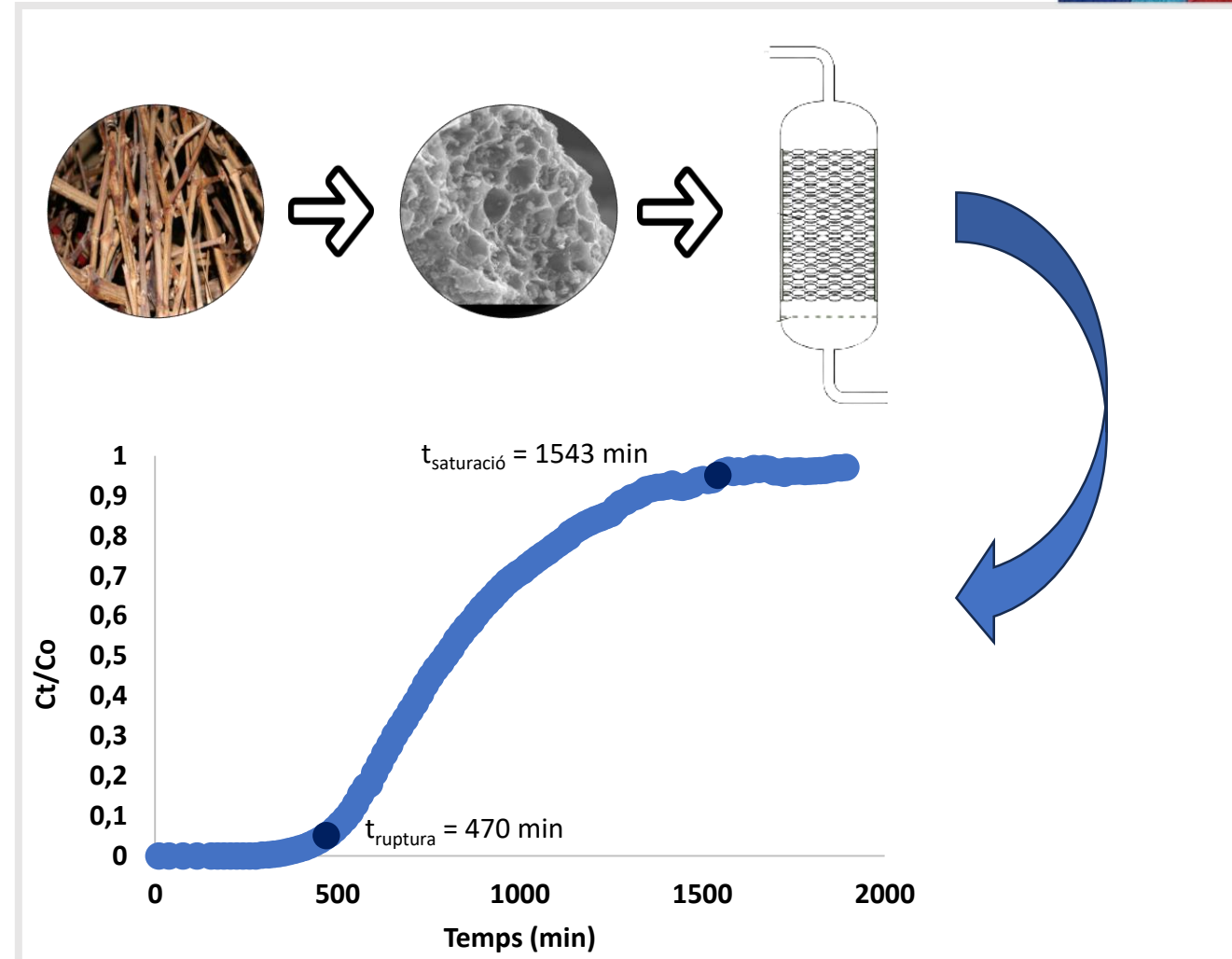
UNIVERSITAT DE
BARCELONA

Facultat de Química



La viticultura genera dos milions de tones de residus de poda de la vinya a Espanya anualment, sovint incinerats malgrat les seves aplicacions sostenibles. Investigacions anteriors han valoritzat aquests sarments per produir biocarbó activat amb CO_2 , optimitzant el rendiment de síntesi i la capacitat d'adsorció de microcontaminants (MC) com ara acetamiprid (ACE), metalaxil (MET) i penconazole (PEN).

Aquest estudi ha utilitzat un disseny experimental per investigar el temps de piròlisi, la temperatura i el temps d'activació. Els resultats mostren que el temps de piròlisi té una influència limitada, cosa que en permet l'eliminació del procés. El disseny experimental ha determinat que les condicions òptimes (800 °C i 80 min) proporcionen capacitats d'adsorció de 203,24 mg/g (ACE), 146,99 mg/g (MET) i 293,11 mg/g (PEN), amb un rendiment de síntesi del 9,92 %. El material ha demostrat una excel·lent retenció de MC en experiments d'adsorció en columna, la qual cosa indica un gran potencial per al tractament d'aigües.





Identificació de dianes terapèutiques en el metabolisme tumoral mitjançant models computacionals

Berta Bori-Bru;¹ David López;² S. Marin;² S. Madurga;¹ M. Cascante;² P. de Atauri;² F. Mas¹

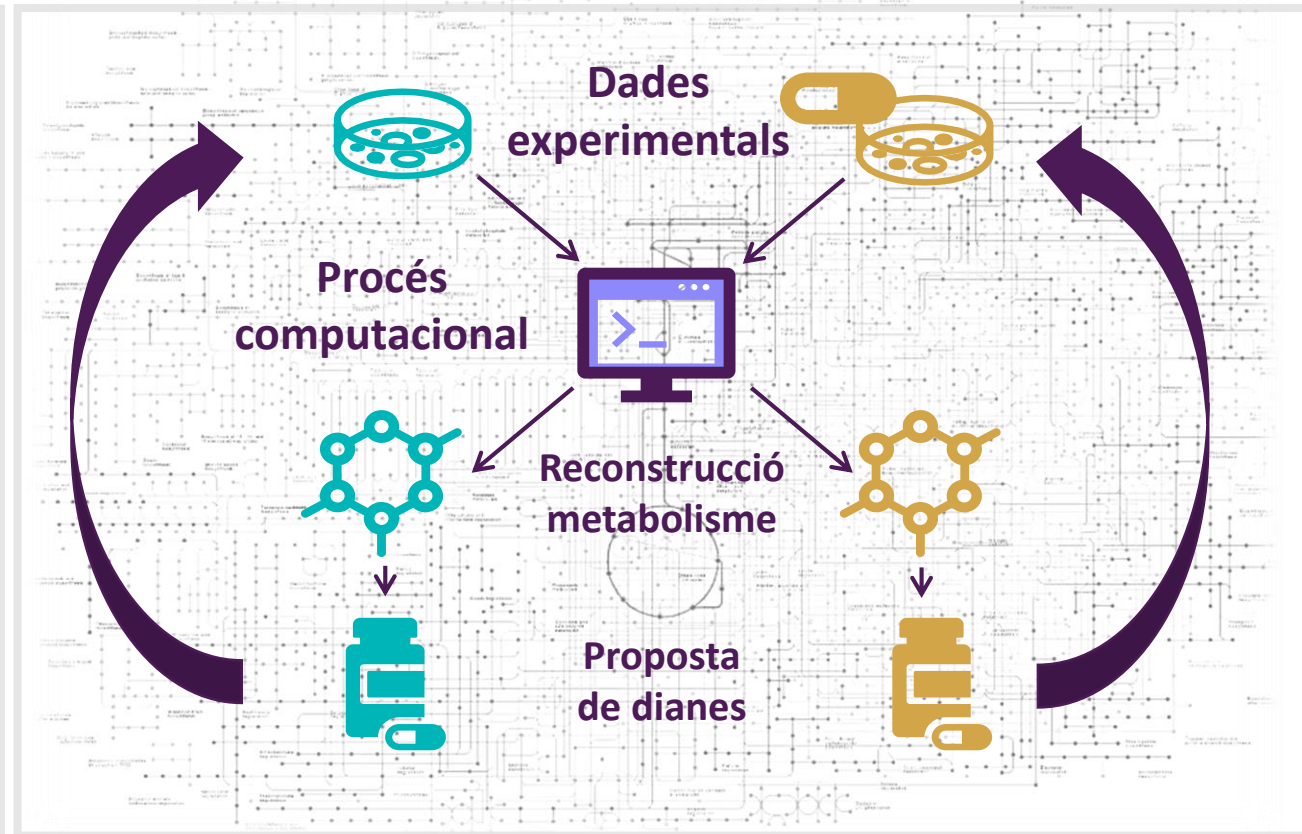
¹ Departament de Ciència de Materials i Química Física. Secció de Química Física

² Departament de Bioquímica i Biomedicina Molecular. Facultat de Biologia

El càncer de còlon és, avui dia, un dels càncers més comuns i mortífers mundialment [1]. Part de la seva elevada mortalitat és causada per una reprogramació metabòlica de les cèl·lules canceroses que deriven cap a l'adquisició de resistència a fàrmacs antitumorals.

Així doncs, l'estudi del metabolisme d'aquestes cèl·lules amb l'objectiu d'identificar possibles dianes terapèutiques és de vital importància. En aquest estudi s'han utilitzat models a escala genòmica (GSMM) [2] per tal de reconstruir computacionalment el metabolisme de cèl·lules de diversos tipus de càncer de còlon, les quals han estat tractades amb una solució control o l'antitumoral FOLFOX.

Aquest estudi ha permès entendre els canvis metabòlics que deriven en l'adquisició de resistència a l'antitumoral, així com facilitar una proposta de possibles dianes farmacològiques, que cal validar experimentalment, per combatre aquesta reprogramació metabòlica.



Referències

[1] H. Sung, J. Ferlay, R. Siegel, *et al.* *CA. Cancer J. Clin.* **2021**, 71 (3), 209.

[2] V. Raškevičius, V. Mikalayeva, I. Antanavičiūtė, *et al.* *PloS One.* **2018**, 13 (1), e0190636.

Seguint les petjades del vi: anàlisi de ceràmiques romanes de Girona

Raúl Cabeza;¹ Sonia Sentellas;^{1,2,3} José F. García^{1,4}

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

² Professora Serra Húnter, Generalitat de Catalunya

³ Institut de Recerca en Nutrició i Seguretat Alimentària; ⁴ Institut de Recerca de l'Aigua (IdRA)

Comissió de Dinamització Lingüística



UNIVERSITAT DE
BARCELONA

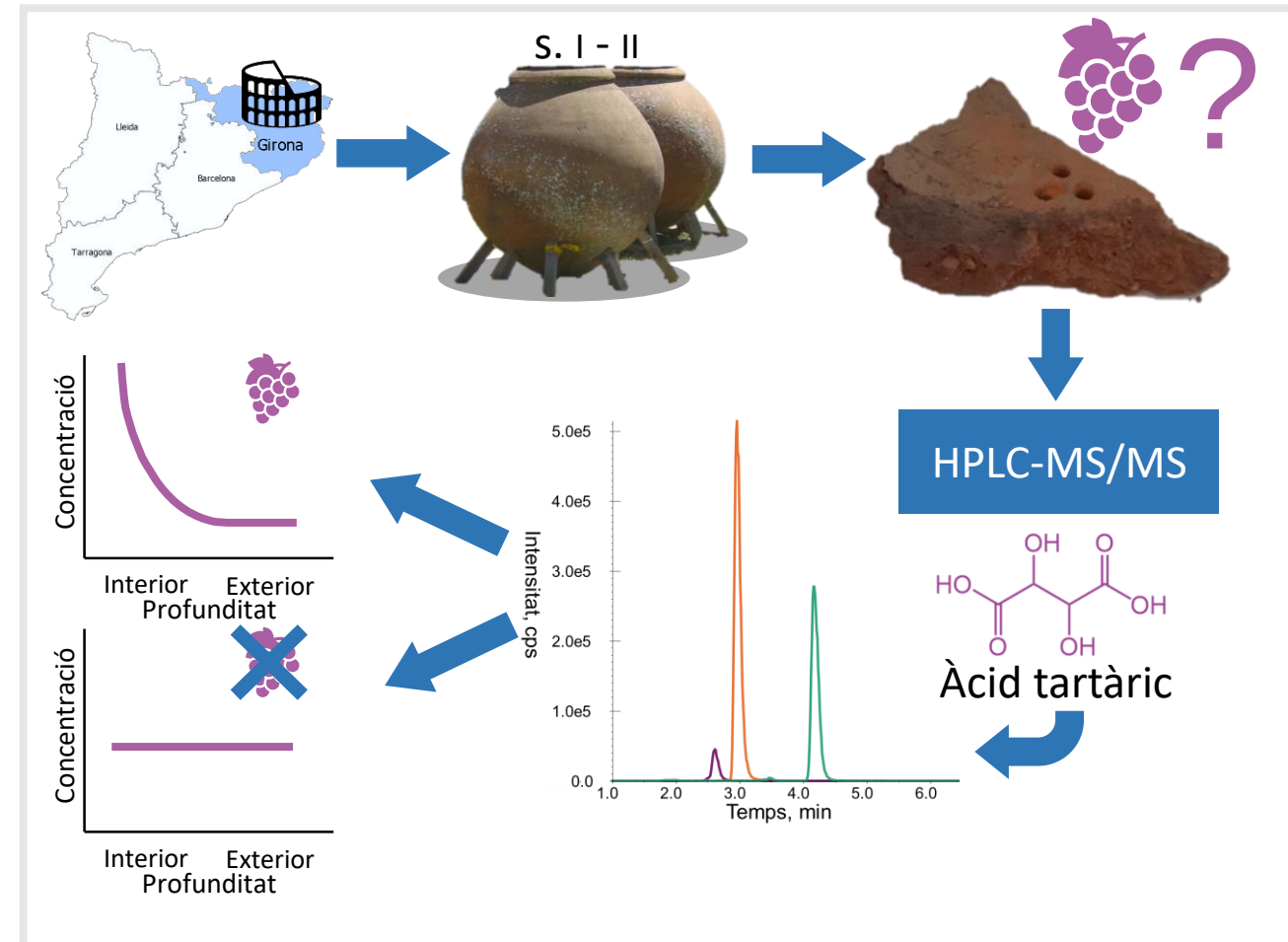
Facultat de Química



El vi era molt valorat pels romans, cosa que el va convertir en un producte clau en el comerç mediterrani. Els romans l'emmagatzemaven en recipients ceràmics anomenats *dolia*, que són troballes habituals en les viles romanes. La identificació de l'ús dels *dolia* és clau per entendre les activitats econòmiques i el mode de vida del passat.

En aquest treball s'ha establert un mètode HPLC-MS/MS per a la determinació de l'àcid tartàric, que és un biomarcador important del vi, en fragments de *dolia* procedents de jaciments romans de l'àrea de Girona.

Alguns dels fragments estudiats han mostrat un clar gradient de concentració d'àcid tartàric de l'interior a l'exterior de la peça, cosa que suggereix que podrien haver contingut vi en el passat. Contràriament, la concentració d'àcid tartàric ha estat per sota del nivell del blanc en altres fragments, per la qual cosa es pot descartar la possibilitat que continguessin vi.



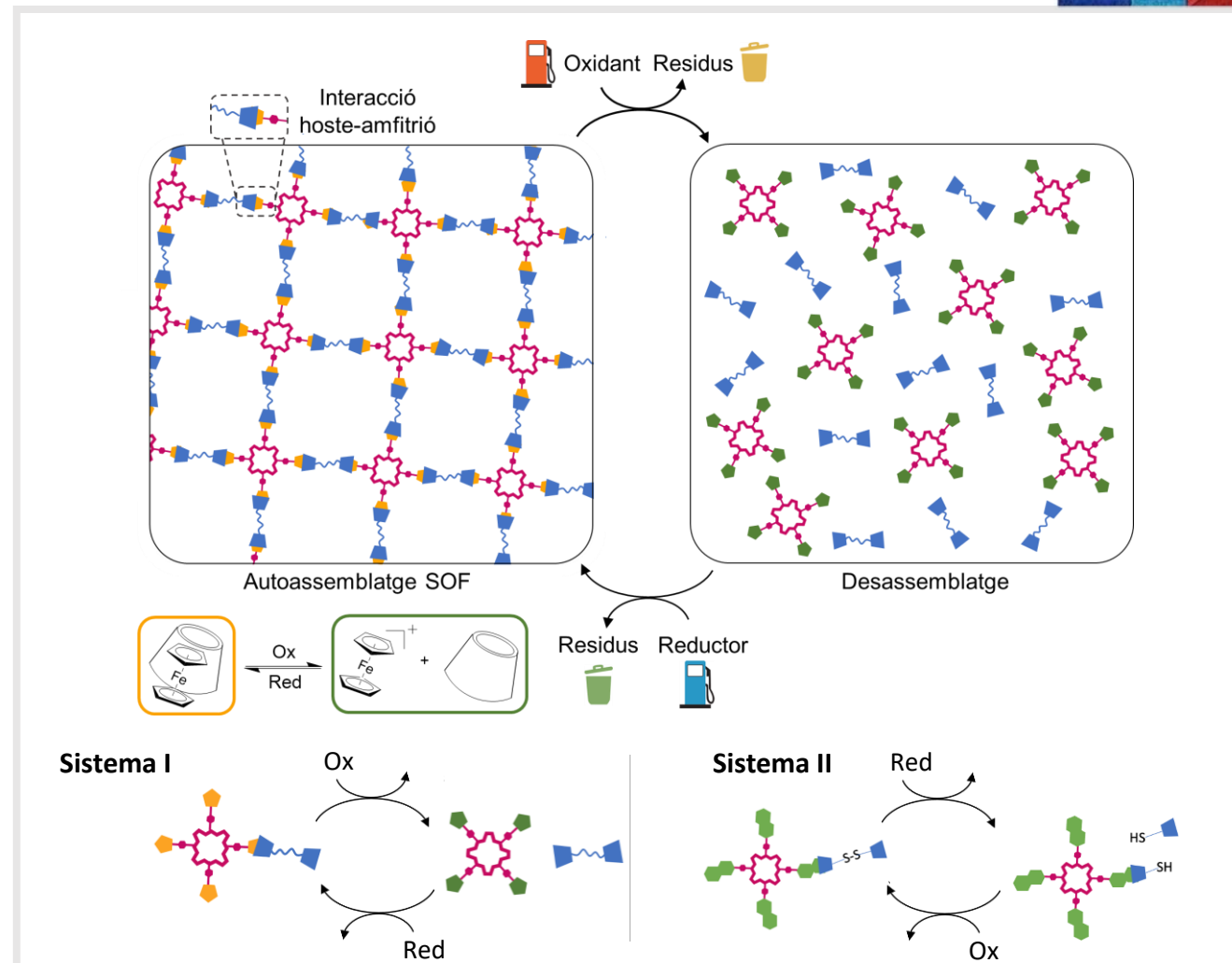
Marc supramoleculars orgànics controlats per combustibles químics

Maria Camacho Molina; Alessandro Sorrenti

Departament de Química Inorgànica i Orgànica. Secció de Química Orgànica



Els marcs supramoleculars orgànics (SOF) són estructures poroses solubles formades per l'autoassemblatge de blocs de construcció moleculars mitjançant interaccions no covalents. Els SOF es poden dissenyar de manera que puguin respondre a estímuls. Tradicionalment, els materials supramoleculars artificials s'han format en condicions d'equilibri termodinàmic, però, en els darrers anys, s'ha implementat l'autoassemblatge dissipatiu controlat per combustibles químics (DSA) en aquests sistemes. Això permet aconseguir un control temporal sobre l'assemblatge molecular. En aquest treball, hem desenvolupat dos nous SOF 2D basats en diferents interaccions hoste-amfitrió: el primer, format per porfirines funcionalitzades amb ferrocè i dímers de β -ciclodextrina no responsius; el segon, basat sobre porfirines funcionalitzades amb naftalè sulfonat i dímers de β -CD, que porten un enllaç disulfur al centre de la molècula. Gràcies a la naturalesa redox-responsiva dels dos SOF, el seu autoassemblatge i el temps de vida de l'estat assemblat es podran regular modulant el subministrament de combustibles químics redox.



Anàlisi de contaminants emergents en tomàquets comercials a Barcelona per HPLC-MS

Clara Canals-Martí; Juan Cruz Carrizo; M. Silvia Diaz-Cruz

Institut de Diagnòstic Ambiental i Estudis de l'Aigua (IDAEA), Consell Superior d'Investigacions Científiques (CSIC)

Comissió de Dinamització Lingüística



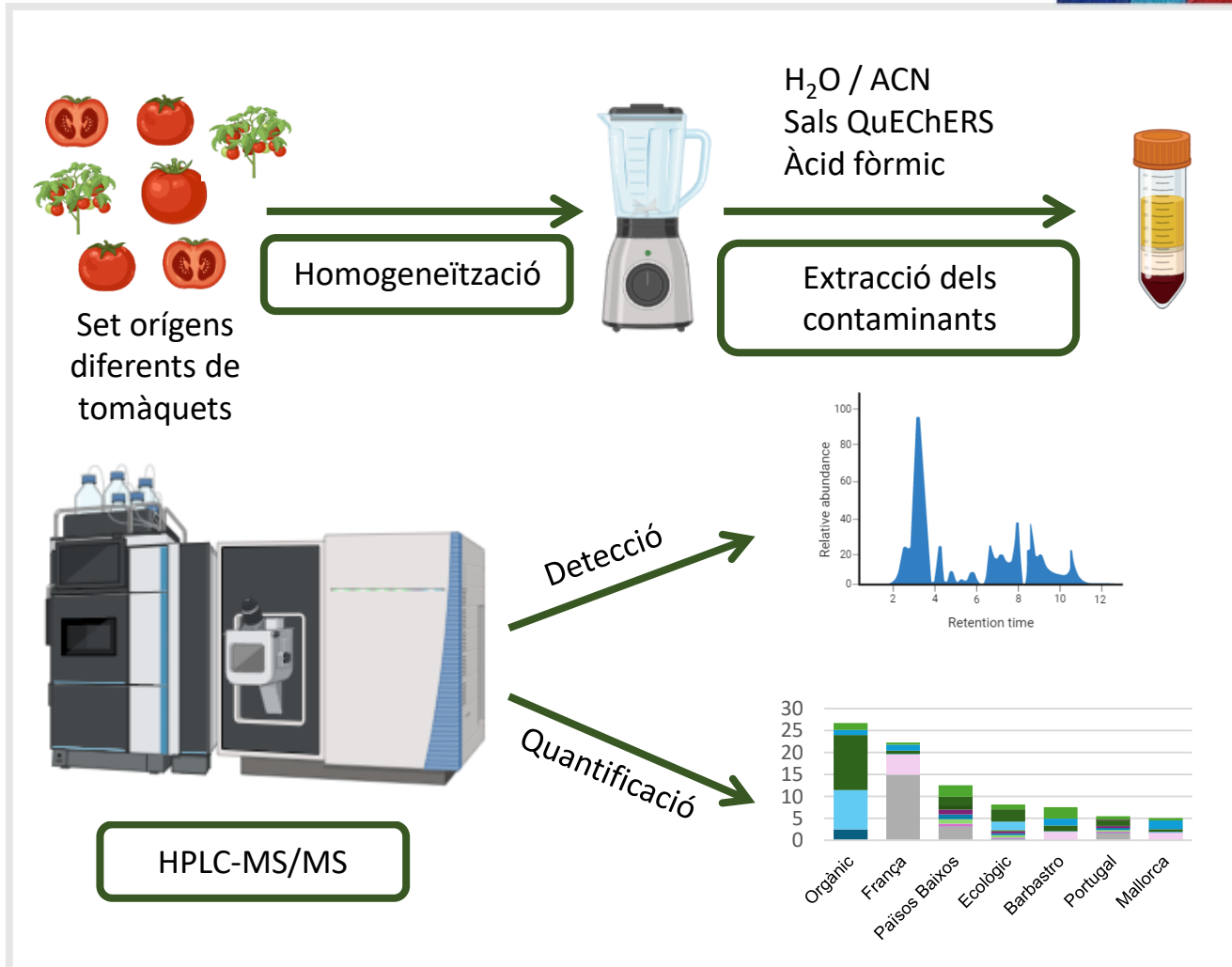
UNIVERSITAT DE
BARCELONA

Facultat de Química



En aquest estudi s'analitza la presència de contaminants de preocupació emergent (CEC) en tomàquets comercials de mercats de Barcelona a través d'un mètode d'extracció de QuEChERS i una anàlisi de detecció i quantificació mitjançant HPLC-MS/MS. L'estudi abasta 76 compostos químics i troba 16 CEC diferents en les mostres analitzades, incloent-hi antibiòtics, parabens, filtres UV i pesticides.

Els resultats mostren que els tomàquets d'origen orgànic estudiats tenen els nivells més alts de contaminants, a causa dels filtres solars com ara l'octinoxat i l'octisalat, probablement a causa de l'ús d'aigües de regadiu contaminades. També es van detectar altes concentracions d'acetamiprid en tomàquets «cor de bou» d'origen francès. Tot i això, els nivells de CEC trobats no representen un risc significatiu per a la salut. Aquest treball subratlla la necessitat de continuar monitorant aquests contaminants per garantir la seguretat alimentària i desenvolupar regulacions adequades.





Cercant sistemes multipropietat: emissió de llum blanca i relaxació lenta en xarxes metal·loorgàniques

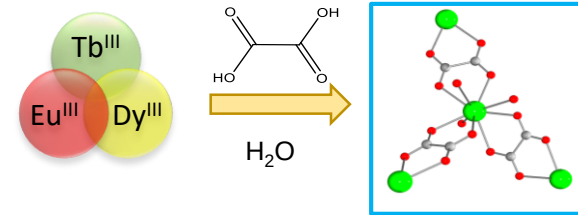
Jeanette Carrasco Prieto; Julia Mayans Ayat

Departament de Química Orgànica i Inorgànica. Secció de Química Inorgànica

L'objectiu d'aquest treball és la síntesi de xarxes metal·lo-orgàniques, a partir de sals de lantànids, grup 4f de la taula periòdica, combinades amb l'àcid oxàlic, per a l'estudi de les seves propietats magnètiques i luminescents.

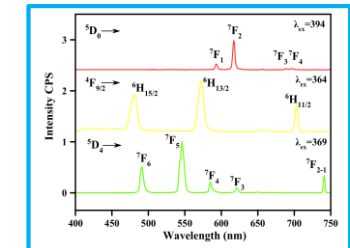
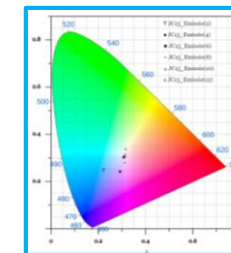
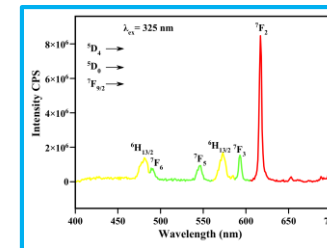
Els lantànids utilitzats han estat: Ce^{III} , Pr^{III} , Eu^{III} , Tb^{III} i Dy^{III} .

S'ha aconseguit sintetitzar xarxes metal·loorgàniques multifuncionals amb lantànids (4f). A més, se n'han estudiat les propietats magnètiques, les quals ens indiquen que hi ha una resposta de la magnetització i, per tant, el nostre compost es comporta com un imant molecular. Tot seguit, en les propietats luminescents s'observa que hi ha una emissió al visible per part del compost de Tb, Eu i Dy. I que amb la seva combinació a una determinada concentració s'aconsegueix l'emissió de llum blanca.

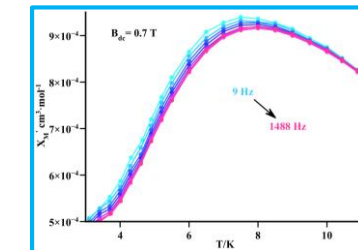
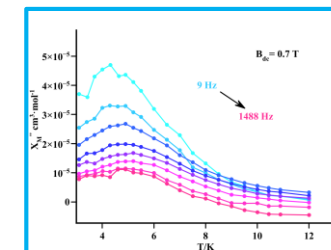


Propietats estudiades:

Luminescència



Magnetisme



La influència de l'estirament mecànic en les propietats d'un polielectròlit feble



M. Carrera;¹ J. L. Garcés;² F. Mas;¹ S. Madurga;¹ P. M. Blanco³

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

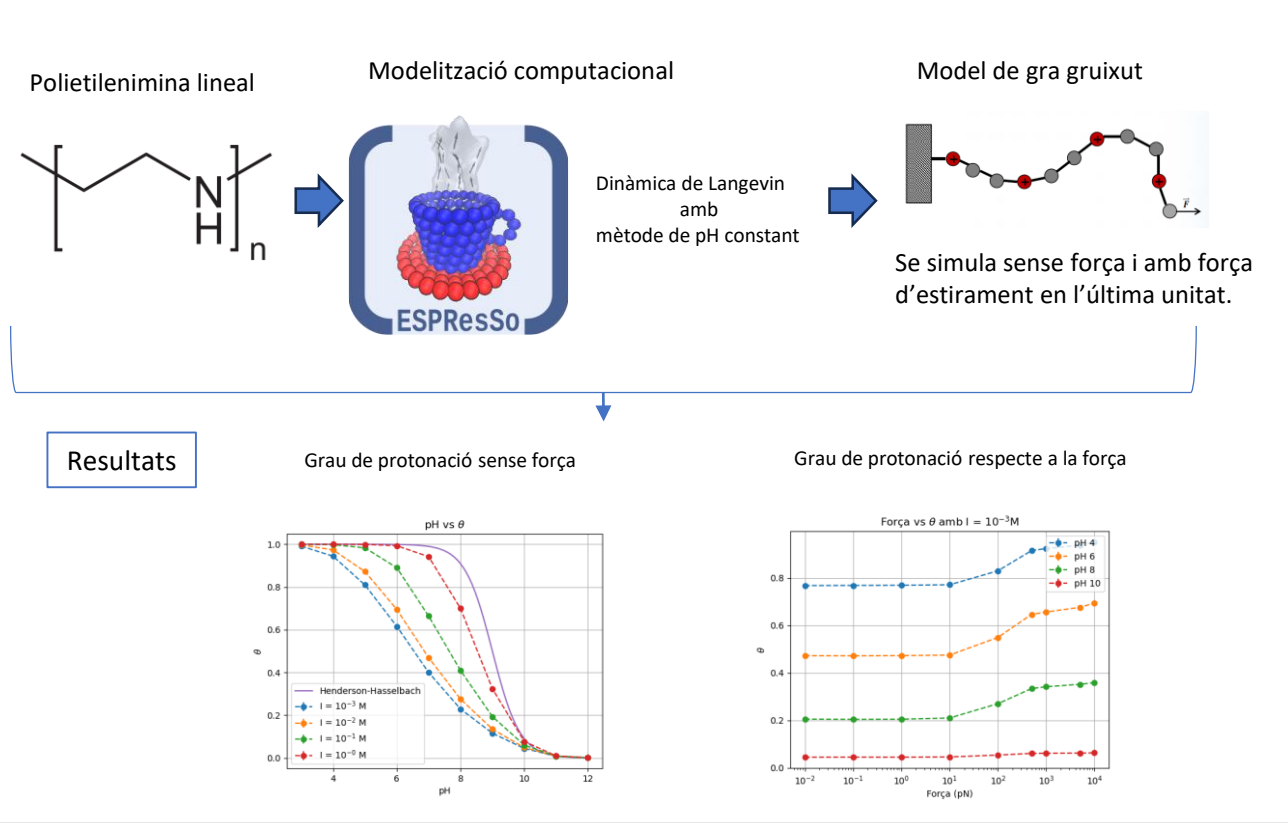
² Departament de Química, Física, Ciències Ambientals i del Sòl. Universitat de Lleida

³ Departament de Física, Facultat de Ciències Naturals, Universitat Noruega de Ciència i Tecnologia (Trondheim, Noruega)

Els polielectròlits febles són capaços d'adaptar la seva càrrega sota estímuls externs, com ara variacions del pH, la força iònica del medi o interaccions electroestàtiques amb altres espècies carregades [1]. El problema principal d'aquest fenomen és que els polielectròlits febles són usualment flexibles i, per tant, els graus de llibertat conformacionals es troben fortament lligats a la ionització.

En aquest treball s'ha fet un enfocament per comprendre la intricada interacció entre la regulació de càrrega i l'estirament mecànic a nivell de gra gruixut de la polietilenimina lineal (LPEI) [2], un aspecte que és crític per a diferents aplicacions, com ara la transfecció gènica i sistemes d'administració de fàrmacs.

Per assolir els objectius s'han generat diferents models amb grups protonables, de manera que el model computacional permet simular corbes de valoració alhora que es realitza l'evolució dinàmica del sistema, i és possible la predicció de paràmetres com ara el grau de protonació o l'elongació.



Referències

[1] Blanco. P. M., Narambuena. C. F., Madurga. S., Mas. F., Garcés. J.L., *Polymers*, **2023**, 15, 2680 .

[2] Blanco. P. M., Madurga. S., Mas. F., Garcés. J.L., *Macromolecules*, **2019**, 52, 8017-8031.

Desenvolupament d'un model ML per predir distribucions atòmiques 3D d'hidrofobicitat

Carlos Cruz;^{1,2} Francisco Javier Luque;² Javier Vázquez;¹ Enric Herrero¹

¹ Departament de Recerca a Pharmacelera

² Dept. de Nutrició, Ciències de l'Alimentació i Gastronomia, Institut de Química Teòrica i Computacional, Universitat de Barcelona

Comissió de Dinamització Lingüística



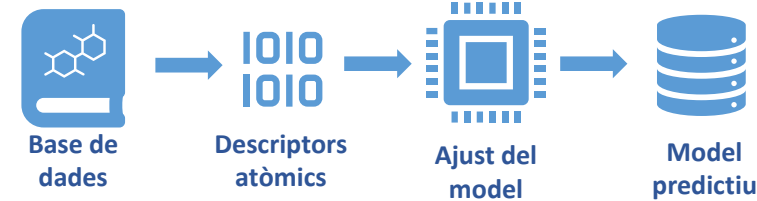
UNIVERSITAT DE
BARCELONA

Facultat de Química

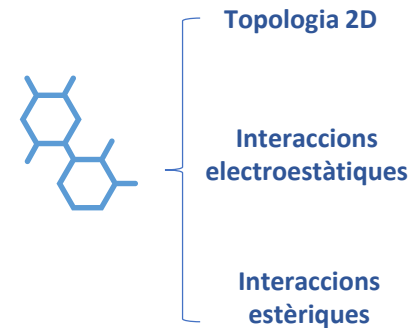


L'enorme expansió de l'espai químic disponible en quimiotèques fa necessari desenvolupar eines eficients per obtenir descripcions acurades de propietats moleculars. En aquest context, s'ha desenvolupat una metodologia d'aprenentatge automàtic (*machine learning*, ML) per predir distribucions 3D d'hidrofobicitat fent ús de descriptors locals específics de cada tipus d'element. Aquests descriptors es deriven de càlculs fets amb el model de solvatació IEFPCM/MST [1]. Els resultats presenten una correlació d'un 90 % amb els valors calculats a nivell QM amb el mètode IEFPCM/MST-RM1 [2], amb una gran reducció del cost de computació. Aquesta metodologia permet accelerar l'assignació de paràmetres necessaris per al cribatge de quimiotèques de millions de compostos, tal com requereix l'evolució actual del disseny de fàrmacs.

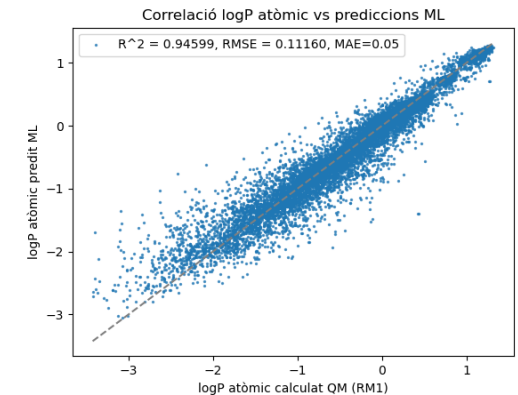
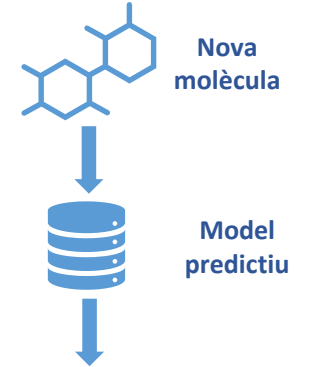
a) Fase d'entrenament



> Descriptors atòmics



b) Fase productiva



Referències

[1] Javier Luque F., Barril X., Orozco M., *J. Comput. Aided Mol. Des.*, **1998**.

[2] Gerd B. Rocha, Ricardo O. Freire, Alfredo M. Simas, James J. P. Stewart, *J. Comput. Chem.*, **2005**.

Reaccions aldòliques creuades organocatalítiques d'aldehids α,β -insaturats

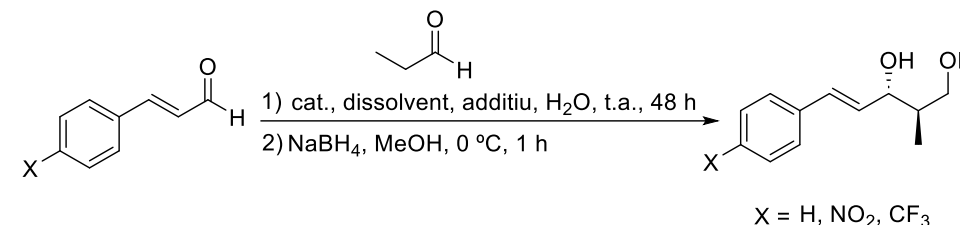


Artur Donlo Benito; Anna M. Costa; Pere Romea; Fèlix Urpí

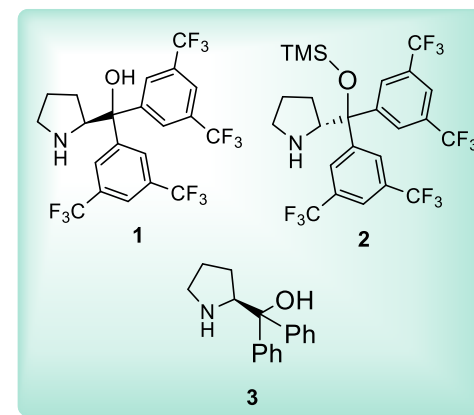
Departament de Química Inorgànica i Orgànica. Secció de Química Orgànica

L'organocatàlisi asimètrica empra compostos orgànics senzills per facilitar i accelerar reaccions químiques, sense fer ús de metalls. Entre els organocatalitzadors més habituals destaquen les amines secundàries quirals. Tot i que l'aminocatàlisi asimètrica ha experimentat avenços espectaculars en els darrers vint anys, encara presenta algunes limitacions. Per exemple, hi ha molt pocs precedents a la literatura de reaccions aldòliques aminocatalítiques amb aldehids α,β -insaturats (enals) [1,2]. En aquesta reacció es formen alcohols al·lílics enantiopurs, estructures molt versàtils en síntesi orgànica.

En aquest treball hem estudiat l'abast de la reacció aldòlica entre un aldehyd alifàtic (propanal) amb aldehids α,β -insaturats emprant diferents aminocatalitzadors (**1-3**). Com que els rendiments que s'obtenen són de baixos a moderats, s'ha estudiat l'ús de diferents additius com a cocatalitzadors (catàlisi dual cooperativa) [3]. Emprant l'oxima **6** s'han obtingut bons rendiments del producte desitjat. El pas següent serà estudiar la possibilitat d'emprar àcids de Lewis com a cocatalitzadors en aquestes reaccions.

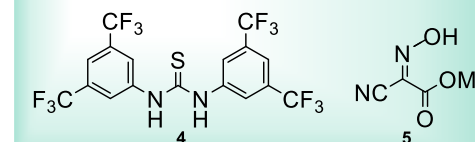


Aminocatalitzadors utilitzats

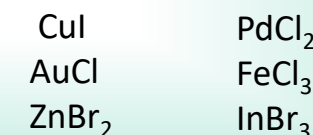


Additius

Donadors de pont d'hidrogen:



Àcids de Lewis utilitzats:



Referències

- [1] Y. Hayashi, K. Nagai, S. Umeyama. *Chem. Asian J.* **2019**, 14(23), 4146-4149.
- [2] T. Kano, H. Maruyama, R. Sakamoto, K. Maruoka. *Chem. Commun.* **2015**, 51(49), 10062-10065.
- [3] A. Del Vecchio, et al. *Chem. Eur. J.* **2022**, 28(49), e2022008.

Porfirines autoassemblables substituïdes amb triazolil com a nous bolaamfíls

Alexandre Escarrà Pont; Joaquim Crusats Aliguer

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

Comissió de Dinamització Lingüística



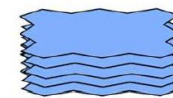
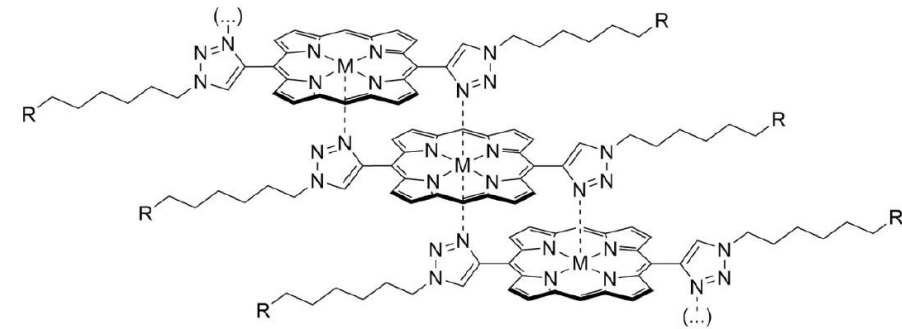
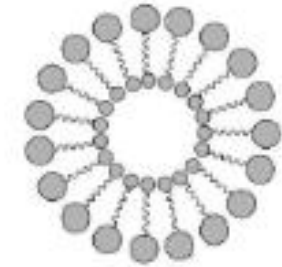
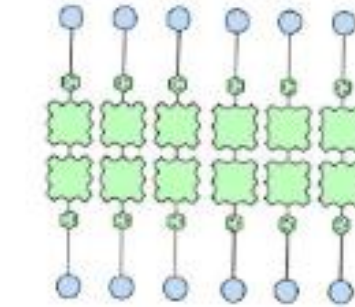
UNIVERSITAT DE
BARCELONA

Facultat de Química



Les porfirines són macrocicles tetrapirròlics conjugats units per ponts de metí ($-\text{CH}=\text{}$) amb una gran estabilitat deguda a la seva aromaticitat. Els macrocicles tetrapirròlics de les porfirines formen una gran estructura plana π -conjugada en el marc carboni-nitrogen, cosa que permet a les porfirines exhibir una transferència d'electrons eficient i propietats fotoelectroquímiques interessants.

En els darrers cent anys, s'ha fet una exploració exhaustiva de la química de coordinació que implica àtoms metàl·lics i els nitrògens pirròlics. El nostre equip de recerca ha investigat àmpliament les capacitats d'autoassemblatge de les porfirines, tant en presència com en absència d'àtoms metàl·lics. Aprofitant la química de clic, que facilita la funcionalització fàcil d'aquestes estructures, estem treballant activament per establir una metodologia sintètica. El nostre objectiu principal és desenvolupar un procediment fàcil i fiable que permeti la funcionalització flexible de sintons supramoleculars de les porfirines. Mitjançant aquesta metodologia pretenem introduir un cap polar, transformant l'estructura en un bolaamfífil amb propietats semblants a una funció d'antena per a sistemes de captació de llum.



H-aggregate

Monomer



J-aggregate

Noves estructures oligonucleotídiques sensibles a estímuls interns i amb potencial terapèutic

María Fernández; Ariadna Vila; Montserrat Terrazas

Departament de Química Inorgànica i Orgànica. Secció de Química Orgànica

Comissió de Dinamització Lingüística



UNIVERSITAT DE
BARCELONA

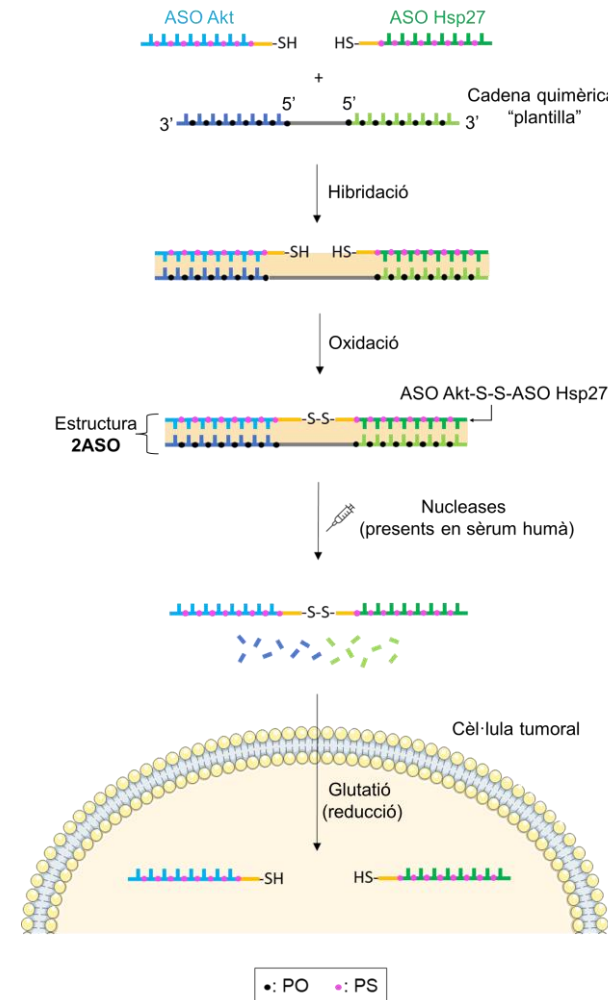
Facultat de Química



Les patologies complexes com el càncer són conseqüència de diversos factors que actuen sinèrgicament dins l'organisme. Per exemple, en el càncer de mama HER2+ se sobreexpressen proteïnes com Akt i Hsp27, cosa que n'empitjora el pronòstic i afavoreix la resistència als medicaments.

Una possible solució sol ser l'administració de combinacions de fàrmacs de molècula petita, però la interacció entre ells pot comportar toxicitat, fet que en limita l'ús clínic.

En aquest treball presentem una alternativa prometedora que consisteix a unir mitjançant un enllaç disulfur dos oligonucleòtids terapèutics (oligonucleòtids antisentit, ASO) diferents en una única estructura (2ASO), que està especialment dissenyada perquè l'enllaç disulfur sigui específicament reduït dins de la cèl·lula tumoral, cosa que permet administrar els dos fàrmacs ASO simultàniament. Cadascun d'aquests dos ASO ha estat dissenyat específicament per degradar l'ARNm d'una proteïna diana diferent (Akt i Hsp27), i evitar així la seva traducció.



Síntesi de complexos de Ru(II) per a la teràpia fotodinàmica

Jiawei Gao;¹ Guglielmo Spinelli;² Ernesto Nicolás;¹ Patrick Gamez²

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

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

Comissió de Dinamització Lingüística



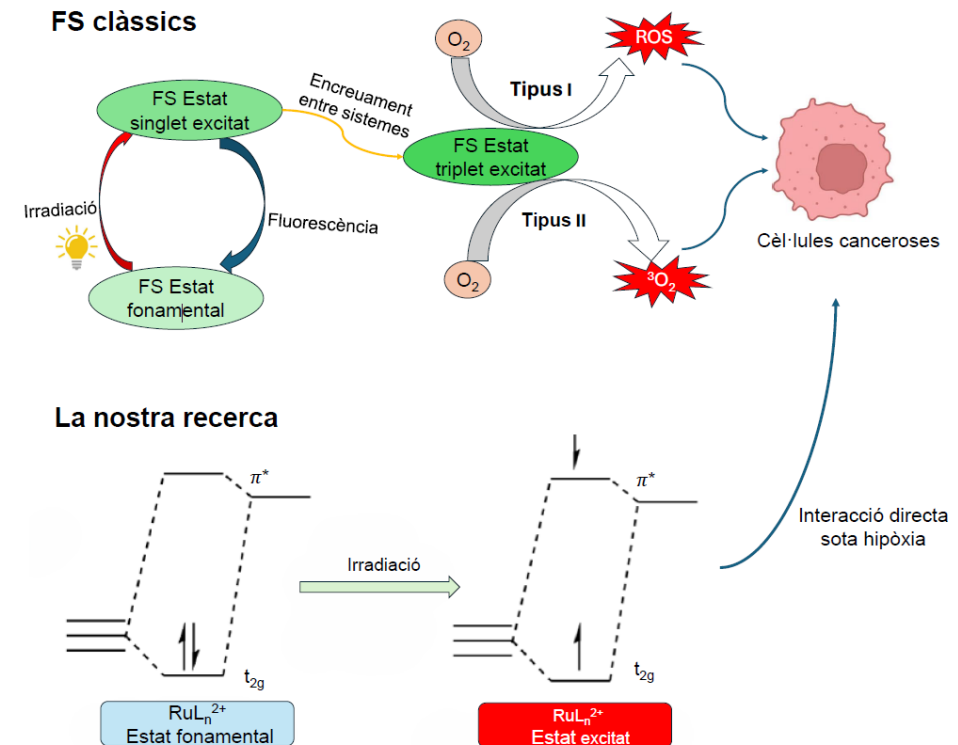
UNIVERSITAT DE
BARCELONA

Facultat de Química



La teràpia fotodinàmica (TFD) és una tècnica terapèutica que implica un agent fotosensibilitzador (FS) i l'aplicació de llum d'una longitud d'ona específica sobre la zona afectada. Hi ha dues vies d'acció: l'FS de tipus I genera radicals que reaccionen amb oxigen molecular per produir intermediaris reactius d'oxigen (ROS) citotòxics, i l'FS de tipus II genera oxigen singlet citotòxic [1]. La teràpia fotodinàmica és efectiva per tractar diverses malalties de la pell, especialment el càncer [2], però és menys eficaç contra tumors interns per la necessitat d'oxigen.

Recentment s'han explorat nous agents fotosensibilitzadors, com ara els complexos de Ru(II), adequats per a entorns hipòxics. Hem sintetitzat quinze nous complexos de Ru(II) amb 1,10-fenantrolina i 2,2'-bipiridina i n'hem seleccionat sis per a la presentació. No obstant això, no en podem divulgar les estructures moleculars completes ni la ruta sintètica per motius de patents.



Referències

[1] Elena Gómez, *Environ. Sci. Technol.*, **2012**, 46, 4, 1955-1963.

[2] Colin Hopper, *Lancet Oncol.*, **2000**, 1.4, 212-219.

Oxidació regioselectiva de compostos carbonílics β,γ -insaturats amb O_2 catalitzada per Cu(II)



Álvaro García-Cid; Eduard Balaguer-Garcia; Pedro Romea; Fèlix Urpí

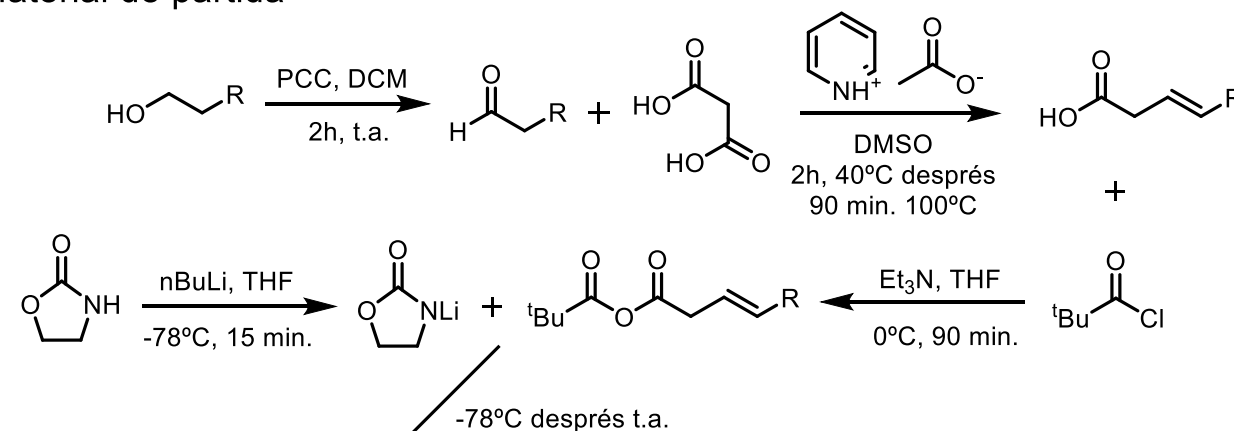
Departament de Química Inorgànica i Orgànica. Secció de Química Orgànica

L'interès del grup de recerca per les reaccions catalitzades per complexos metàl·lics ha portat a l'estudi d'oxidacions regioselectives de compostos carbonílics β,γ -insaturats catalitzats per Cu(II) [1].

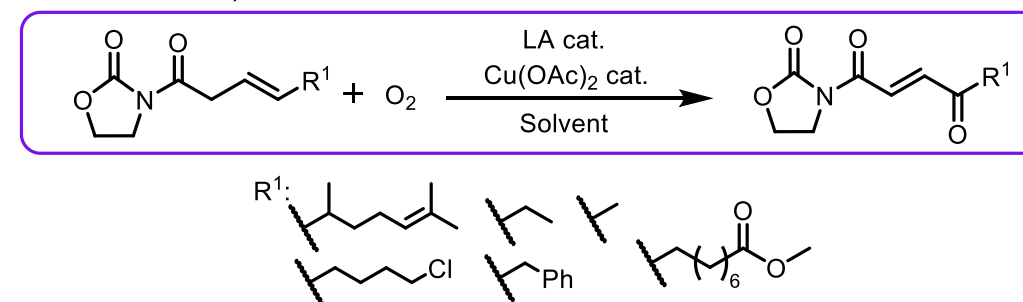
Al grup de recerca s'ha desenvolupat recentment una metodologia per aminoxilar la posició γ d'un sistema carbonílic β,γ -insaturat emprant TEMPO, un radical estable, aprofitant un possible procés homolític catalitzat per Cu(II) [2].

L'interès per desenvolupar transformacions el més simples possible ens va empènyer a explorar la mateixa reacció, però ara simplement utilitzant O_2 en lloc de TEMPO. De nou, el producte es va obtenir amb un regiocontrol extraordinari, però en aquesta ocasió es va generar el derivat carbonílic. L'objectiu d'aquest treball consistirà a optimitzar aquest procés per comprovar l'abast de la metodologia amb una gamma de reactius.

Material de partida



Reacció objectiu



[1] Moreira, I.D.P.R.; Bofill, J.M.; Anglada, J.M.; Solsona, J.G.; Nebot, J.; Romea, P.; Urpí, F. *J. Am. Chem. Soc.* **2008**, 130, 3242–3243.

[2] Pérez-Palau, M. Tesi doctoral, Universitat de Barcelona, **2022**.

Estudi de l'autoassemblatge i propietats luminescents d'estructures angulars de Au(I) i Pt(II)

Comissió de Dinamització Lingüística



UNIVERSITAT DE
BARCELONA

Facultat de Química

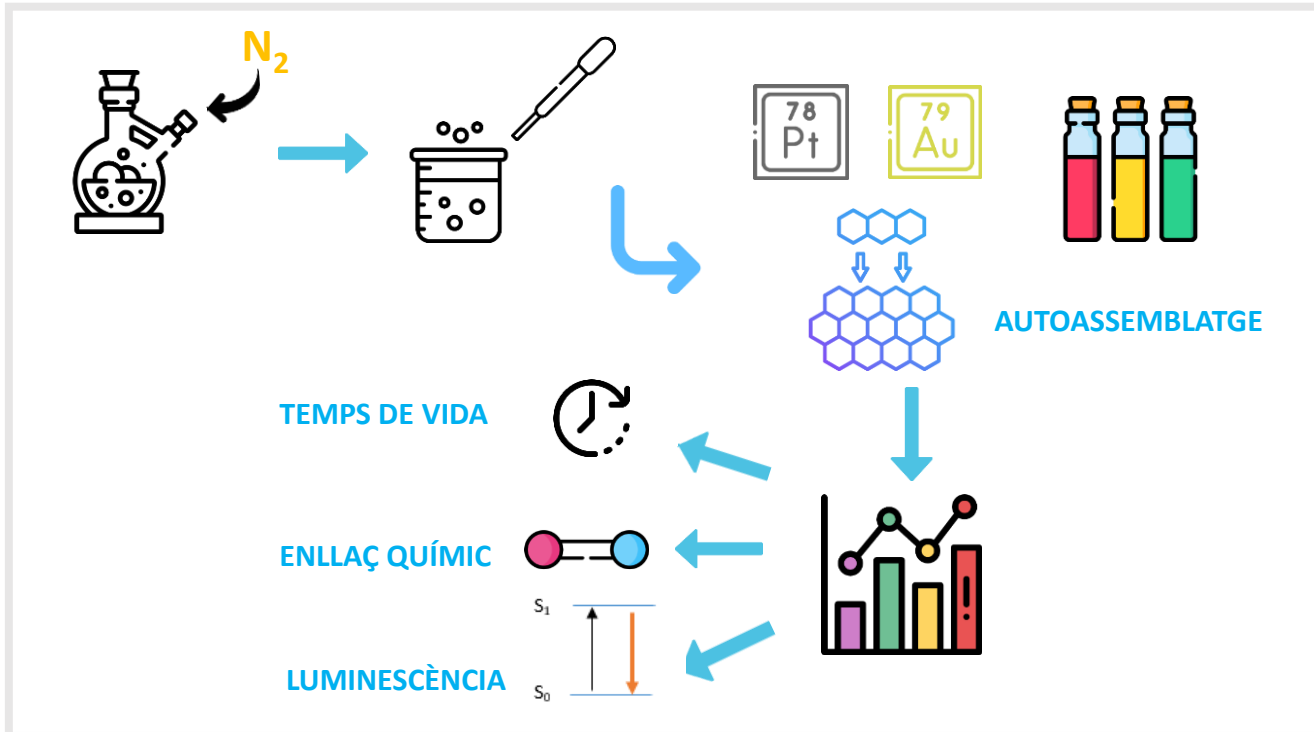


Mar García Del Amo;¹ Guillermo Romo Islas;^{1,2} Laura Rodríguez Raurell^{1,2}

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

² Institut de Nanociència i Nanotecnologia (IN 2UB). Universitat de Barcelona

El mètode de l'autoassemblatge molecular consisteix en la creació de supra- i/o nanoestructures amb unes propietats determinades per mitjà de l'organització d'unitats moleculars que exhibeixen unes interaccions intra- i/o intermoleculars adequades [1]. En aquest context, els complexos de Au(I) i de Pt(II) representen una àrea d'investigació emergent ja que mostren interaccions febles metall—metall i metall—ligand, que permeten modular les propietats resultants en un gran nombre d'aplicacions diferents, com és el cas concret de la luminescència [2-4]. Aquest és un procés en el qual una molècula emet llum quan absorbeix fonons o altres formes de radiació magnètica. El fet d'incloure un àtom pesant en l'estructura de la molècula, com ara els compostos sintetitzats en aquest treball, comporta un augment de dit fenomen [5,6]. És per aquesta raó que s'ha estudiat l'efecte de la concentració i de l'àtom pesant en les propietats luminescents i estructures supramoleculares dels compostos de Au(I) i Pt(II) sintetitzats.



Referències

- [1] Darrin Pochan, et al., *Chem. Rev.*, **2021**, 121, 13699-13700.
- [2] Elisabet Aguiló, et al., *Inorg. Chem.*, **2018**, 57, 1017-1028.
- [3] Ka-Chung Tong, et al., *Che. Chem. Sci.*, **2021**, 12, 15229-15238.
- [4] J. A. Gareth Williams, et al., *Coord. Chem. Rev.*, **2008**, 23, 2596-2611.
- [5] Wendy Yuqing Heng, et al., *Organometallics*, **2007**, 26, 6760-6768.
- [6] Camino Bartolomé, et al., *Inorg. Chem.*, **2008**, 47, 11391-11397.



MINISTERIO
DE CIENCIA, INNOVACIÓN
Y UNIVERSIDADES

Els autors agraïeixen al Ministeri de Ciència i Innovació d'Espanya (Projecte número PID2022-139296NB-I00)

Caracterització de fulles d'olivera segons la capacitat antioxidant i el perfil polifenòlic

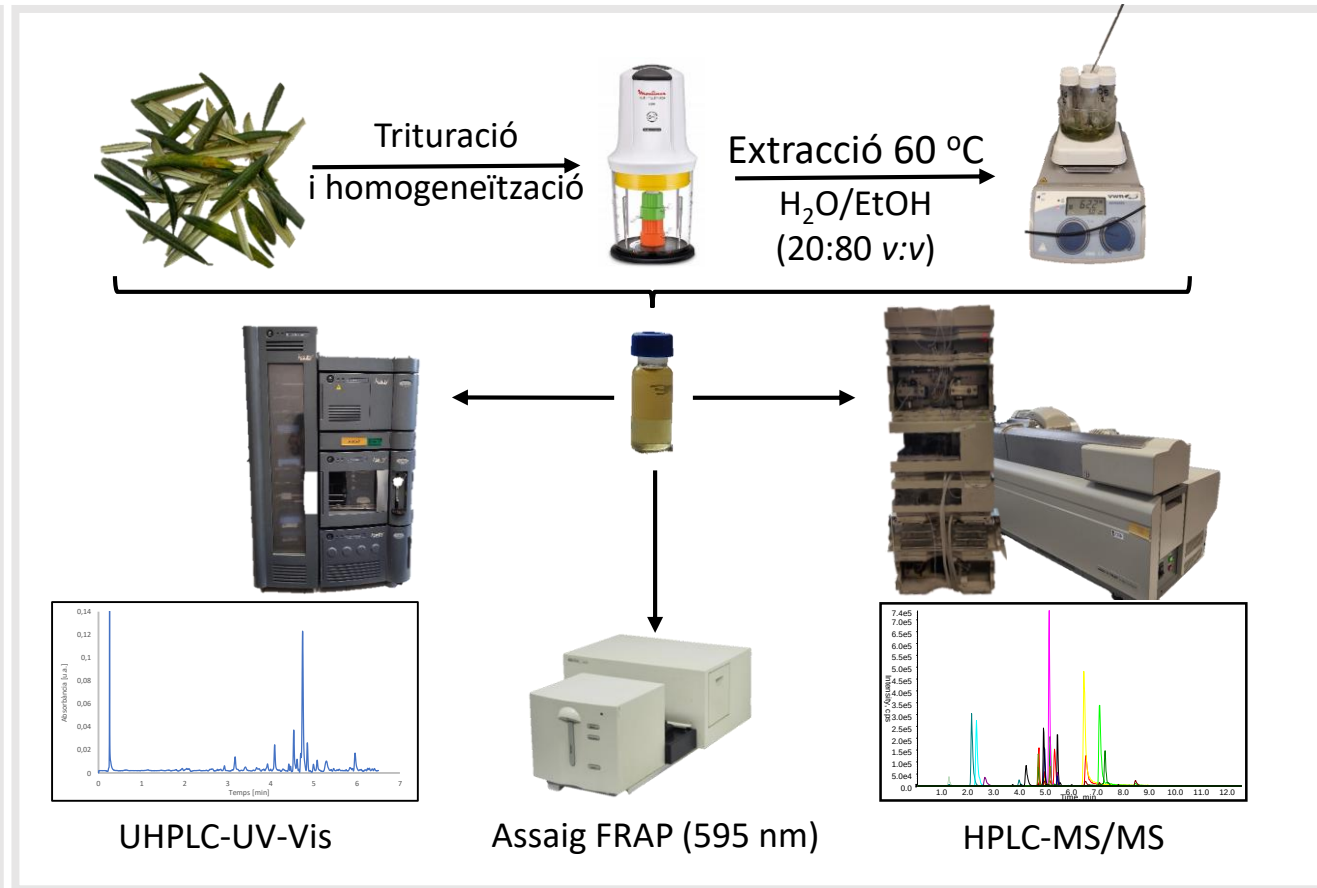


Raúl García-García;¹ Aina Mir-Cerdà;^{1,2} Mercè Granados;^{1,2} Sonia Sentellas;^{1,2,3} Javier Saurina^{1,2}

¹ Departament d'Enginyeria Química i Química Analítica. Secció de Química Analítica ² Institut de Recerca en Nutrició i Seguretat Alimentària (INSA-UB) ³ Professora Serra Húnter, Generalitat de Catalunya

Durant la collita i el processament de l'oliva es poden generar grans quantitats de residus, com ara les fulles o la pinyolada, que contenen concentracions elevades de compostos bioactius rellevants, entre els quals hi ha els polifenols propis de l'oli d'oliva [1]. Els polifenols són metabòlits vegetals amb propietats antioxidants beneficioses per a la salut; s'ha trobat que poden reduir el risc de patir certes malalties i ajuden a regular la pressió arterial [2]. En el marc de l'economia circular, l'estudi de l'extracció dels polifenols d'aquests residus pot ser interessant, no només per pal·liar l'impacte mediambiental sinó també per revaloritzar-los en altres indústries.

En aquest estudi es pretén caracteritzar extractes de fulles d'olivera de diferent origen i varietat mitjançant UHPLC-UV-Vis, HPLC-MS/MS i la capacitat antioxidant amb l'assaig FRAP (*ferric reducing antioxidant power*). Posteriorment es vol crear un model que permeti diferenciar les mostres segons atributs geogràfics o botànics.



Referències

- [1] P. Tapia-Quirós, M.F. Montenegro-Landívar, M. Reig, et al. *Antioxidants*, 9, 2020, 1074
- [2] A. Rana, M. Samtiya, T. Dhewa, et al. *J. Food Biochem.*, 46, 2022, e14264



Caracterització α/β de lixiviats de NORM

Miquel Garcia-Molina; Àlex Tarancón; Anna Rigol

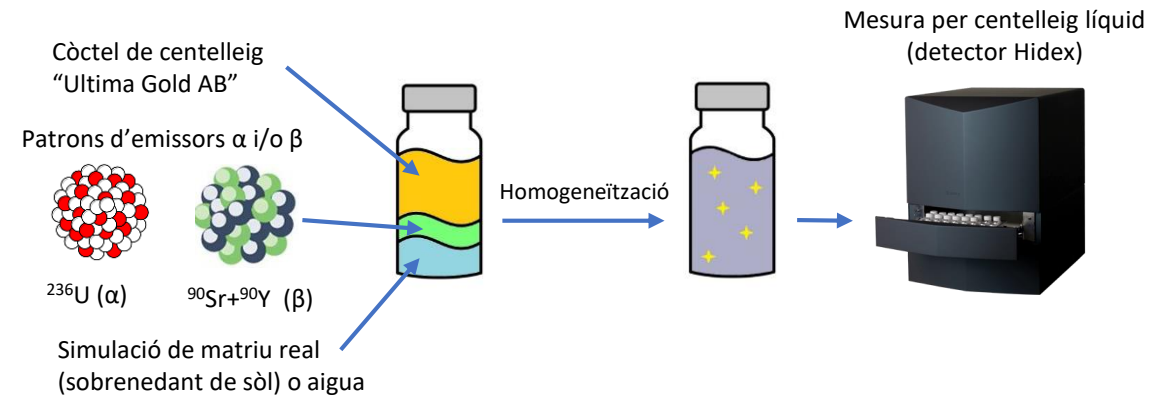
Departament d'Enginyeria Química i Química Analítica. Secció de Química Analítica

Els radionúclids d'origen natural són fonts de radiació presents a la geosfera. Aquests radionúclids formen part de materials coneguts com a NORM (*naturally occurring radioactive materials*). L'explotació d'aquests materials per a usos industrials pot comportar la generació de residus amb una major concentració d'aquests radionúclids i la possibilitat de la seva lixiviació i percolació a través del sòl entrant en contacte amb les aigües subterrànies, la qual cosa constitueix un risc mediambiental.

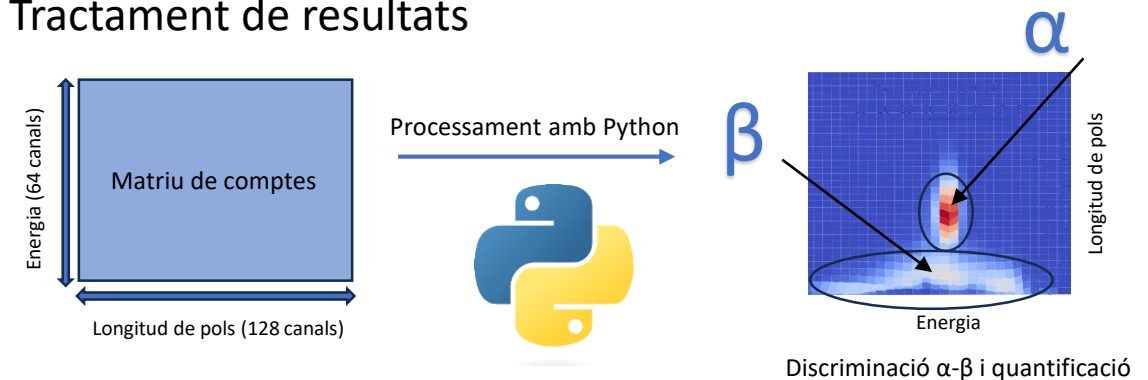
La caracterització radioquímica d'aquests lixiviats presenta un repte analític per l'efecte matriu causat per la incorporació de substàncies del material al lixiviat, i la varietat de radionúclids que s'hi poden trobar en concentracions variables.

El centelleig líquid amb mesura de longitud de pols permet generar gràfics 3D de les emissions radioactives d'una mostra de lixiviat i pot ser una opció per a una quantificació ràpida de l'activitat alfa i beta total que serveixi com a cribratge o per a la comparació entre mostres.

1 Anàlisi de mostres



2 Tractament de resultats



Cap a una energia neta: fotocatalitzadors innovadors per a la producció d'hidrogen

Marta Gil Bonillo; Narcís Homs Martí; Jarosław Serafin

Departament de Química Inorgànica i Orgànica. Secció de Química Inorgànica

Comissió de Dinamització Lingüística



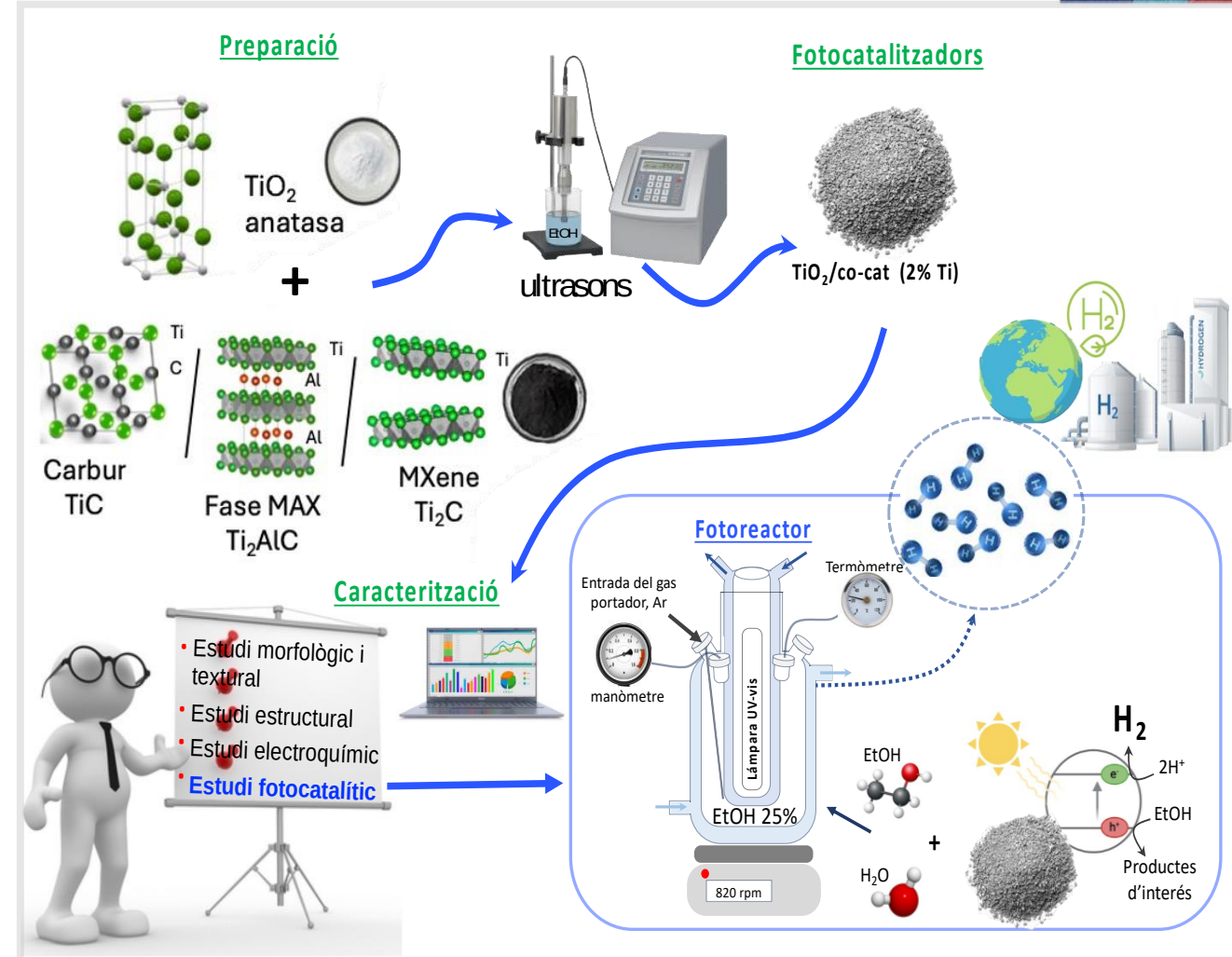
UNIVERSITAT DE
BARCELONA

Facultat de Química



Aquest treball de fi de màster està impulsat per la necessitat d'avançar en la descarbonització del sector energètic, d'acord amb les directrius del Pacte Verd Europeu 2050. Aquest objectiu està clarament definit en l'estratègia europea de l'hidrogen, així com en el «full de ruta de l'hidrogen» espanyol.

El treball se centra en el desenvolupament de fotocatalitzadors basats en compostos de TiO_2 amb diversos cocatalitzadors de titani: carburs, fases MAX i MXens. Els compòsits (TiO_2 /cocatalitzador) amb un contingut del 2 % en pes de Ti del cocatalitzador es van obtenir emprant ultrasons. Se'n van examinar els paràmetres morfològics, texturals, estructurals i fotoelectroquímics. Se'n va avaluar l'eficiència per a la producció d'hidrogen fotocatalític a partir d'una solució d'etanol (25 % v/v), i es va aconseguir una producció de H_2 màxima de 132 mmol/g al cap de 4 hores. Els resultats indiquen que els fotocatalitzadors obtinguts tenen el potencial de produir H_2 com a energia verda.



Xarxes metal·loorgàniques basades en el trifenilè per a aplicacions catalítiques

Sergi González-Martínez;¹ Yuzelfy Mendoza-Gamero;^{1,2,3} Daniel Sainz-Garcia;^{1,2} Albert Romano-Rodríguez^{2,3}

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

Comissió de Dinamització Lingüística

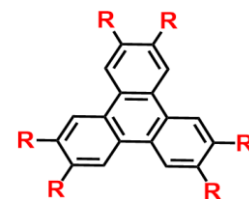


Facultat de Química



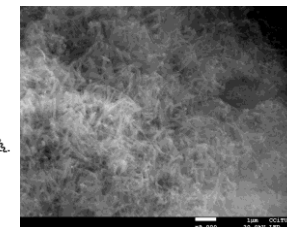
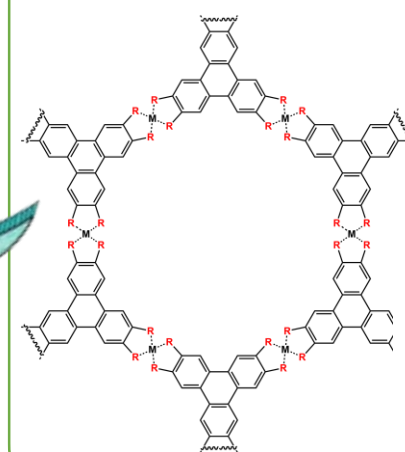
La gran demanda de materials de tot tipus de la societat actual fa temps que genera un consum excessiu de substàncies químiques provinents de fonts no renovables. Aquesta gran explotació de compostos químics, els quals sovint es troben dins del cicle del carboni, està provocant problemes mediambientals greus [1]. Una de les vies que s'estudia per mitigar aquest problema és convertir la biomassa en productes químics de valor afegit [2]. L'objectiu de la recerca que es presenta és desenvolupar xarxes metal·loorgàniques (MOF: *metal-organic frameworks*) bidimensionals basades en l'hidrocarbur trifenilè per a aplicacions catalítiques. Fins ara s'ha sintetitzat un petit grup de lligands els quals s'han emprat en la síntesi de MOF a partir de sals de níquel(II), coure(II) i pal·ladi(II). Els MOF resultants presenten estructures ideals per immobilitzar centres metàl·lics actius i mostren una alta activitat en reaccions catalítiques. Es presenta la síntesi dels diferents lligands i els corresponents MOF.

1. Síntesi dels lligands

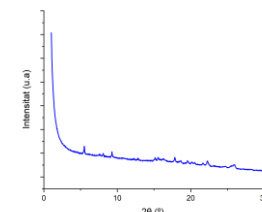


R = Tert-butil amina
p-Anilina
Adamantilamina

2. Síntesi dels MOF

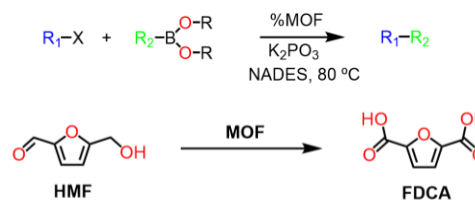


MER



DPXR

3. Catàlisi



Referències

[1] Wu, X.; Fan, X.; Xie, S.; Lin, J.; Cheng, J.; Zhang, Q.; Chen, L.; Wang, Y. Solar energy-driven lignin-first approach to full utilization of lignocellulosic biomass under mild conditions. *Nat. Catal.* **2018**, 1(10), 772–780.

[2] Lu, Y.; Dong, C. L.; Huang, Y. C.; Zou, Y.; Liu, Z.; Liu, Y.; Li, Y.; He, N.; Shi, J.; Wang, S. Identifying the geometric site dependence of spinel oxides for the electrooxidation of 5-hydroxymethylfurfural. *Angew. Chem., Int. Ed.* **2020**, 59 (43), 19215–19221.

Síntesi de lligands per a complexació d'ions metàl·lics com a dispositius moleculars

Otman Lamrhari Elbiad; Jordi Garcia; Paul Lloyd-Williams

Departament de Química Inorgànica i Orgànica. Secció de Química Orgànica

Comissió de Dinamització Lingüística



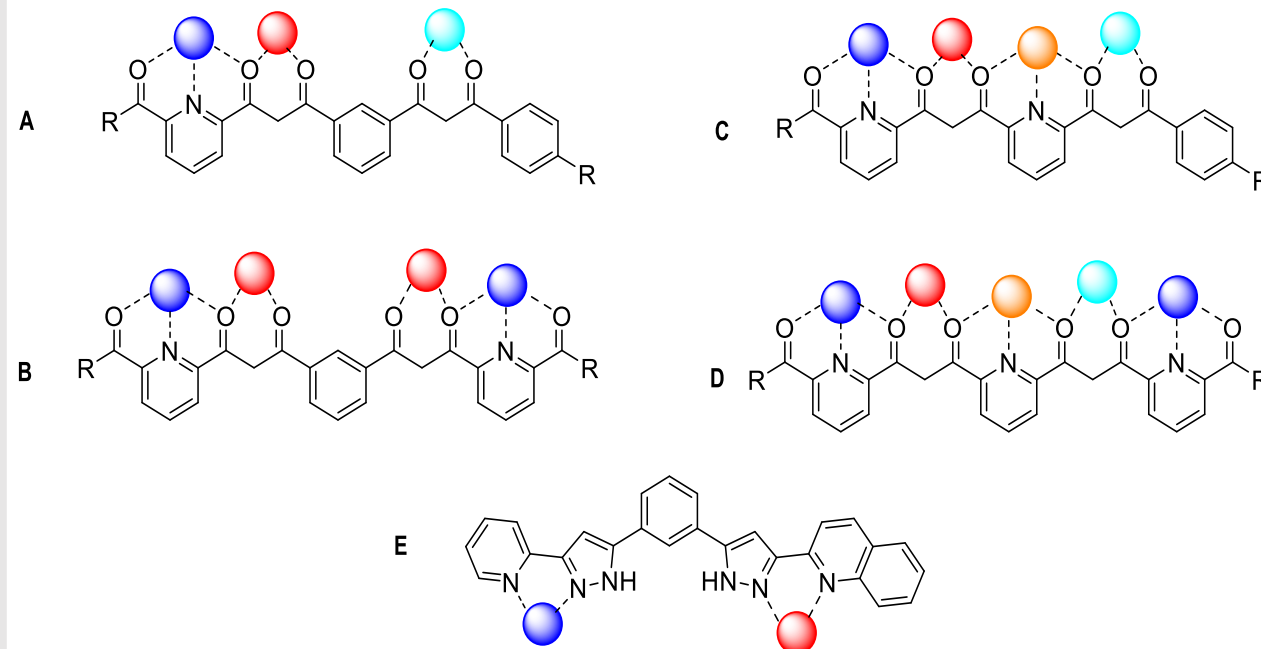
UNIVERSITAT DE
BARCELONA

Facultat de Química



La tecnologia quàntica, en ple desenvolupament, destaca per la computació quàntica, que utilitza les lleis físiques quàntiques per simplificar tasques computacionals difícils. Els qubits poden estar en superposició d'estats 0 i 1, i, mitjançant l'aplicació de les operacions sobre aquests qubits (portes quàntiques), es poden fer càlculs i operacions quàntiques. Aquest camp promet resoldre problemes complexos de manera més eficient que els ordinadors clàssics, pel fet de processar múltiples resultats simultàniament.

L'objectiu principal d'aquest projecte és la síntesi de diversos lligands policetònics, tant simètrics com no simètrics, mitjançant condensacions de Claisen. Aquests lligands són capaços de formar complexos amb ions metàl·lics de forma selectiva. Tal com es mostra, depenent del nombre de grups funcionals que tingui el lligand, es complexarà amb dos, quatre o fins i tot cinc ions metàl·lics diferents [1].



[1] Aguilà, D., Velasco, V., Barrios, L. A., González-Fabra, J., Bo, C., Teat, S. J., Roubeau, O., & Aromí, G. (2018). Selective Lanthanide Distribution within a Comprehensive Series of Heterometallic [LnPr] Complexes. *Inorg. Chem*, 57(14), 8429–8439.

Anàlisi de glicans biomarcadors per capLC-MS en malalties inflammatòries

Maialen Mancisidor; Estela Giménez; Victoria Sanz-Nebot

Departament d'Enginyeria Química i Química Analítica, Institut de Recerca en Nutrició i Seguretat Alimentària (INSA-UB)

Comissió de Dinamització Lingüística

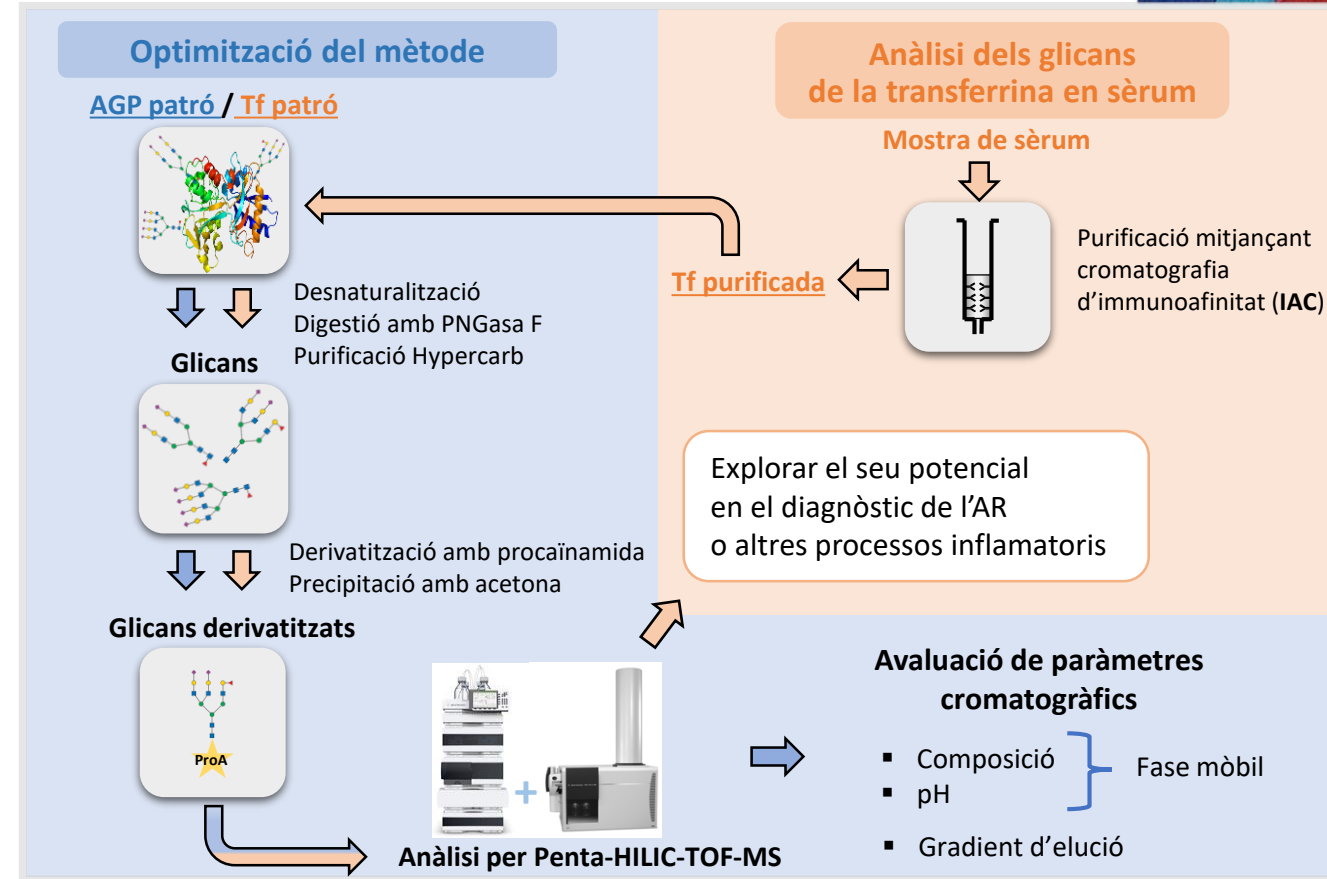


UNIVERSITAT DE
BARCELONA

Facultat de Química



Les glicoproteïnes tenen un paper crucial en molts processos biològics, en els quals solen estar implicats els oligosacàrids units a la cadena peptídica. Aquestes estructures, també conegudes com a *glicans*, es poden alterar en presència de moltes malalties. Per aquest motiu, la seva correcta caracterització en mostres biològiques ha esdevingut de gran interès en molts camps de recerca [1]. La transferrina humana (Tf) és la glicoproteïna responsable del transport de ferro a través del plasma sanguini, i la seva glicosilació es pot veure alterada en algunes malalties inflammatòries com ara l'artritis reumatoide (AR) [2]. En aquest estudi es va desenvolupar un mètode de cromatografia de líquids capil·lar acoblada a l'espectrometria de masses (capLC-MS) per a la correcta separació i detecció d'isòmers de glicans mitjançant una columna Penta-HILIC emprant la glicoproteïna alfa-1-àcida humana (AGP) com a model. Un cop establert el mètode, es va aplicar a l'anàlisi de glicans de Tf en patrons i mostres de sèrum de controls sans i pacients amb artritis reumatoide.



Referències

[1] E. Giménez, V. Sanz-Nebot, A. Rizzi, *Anal. Bioanal. Chem.*, **2013**, 405, 7307.

[2] S. Albrecht, L. Unwin, M. Muniyappa, P. Rudd, *Cancer Biomarkers*, **2014**, 14, 17.

Producció d'acetat propionat de cel·lulosa sota diferents temperatures

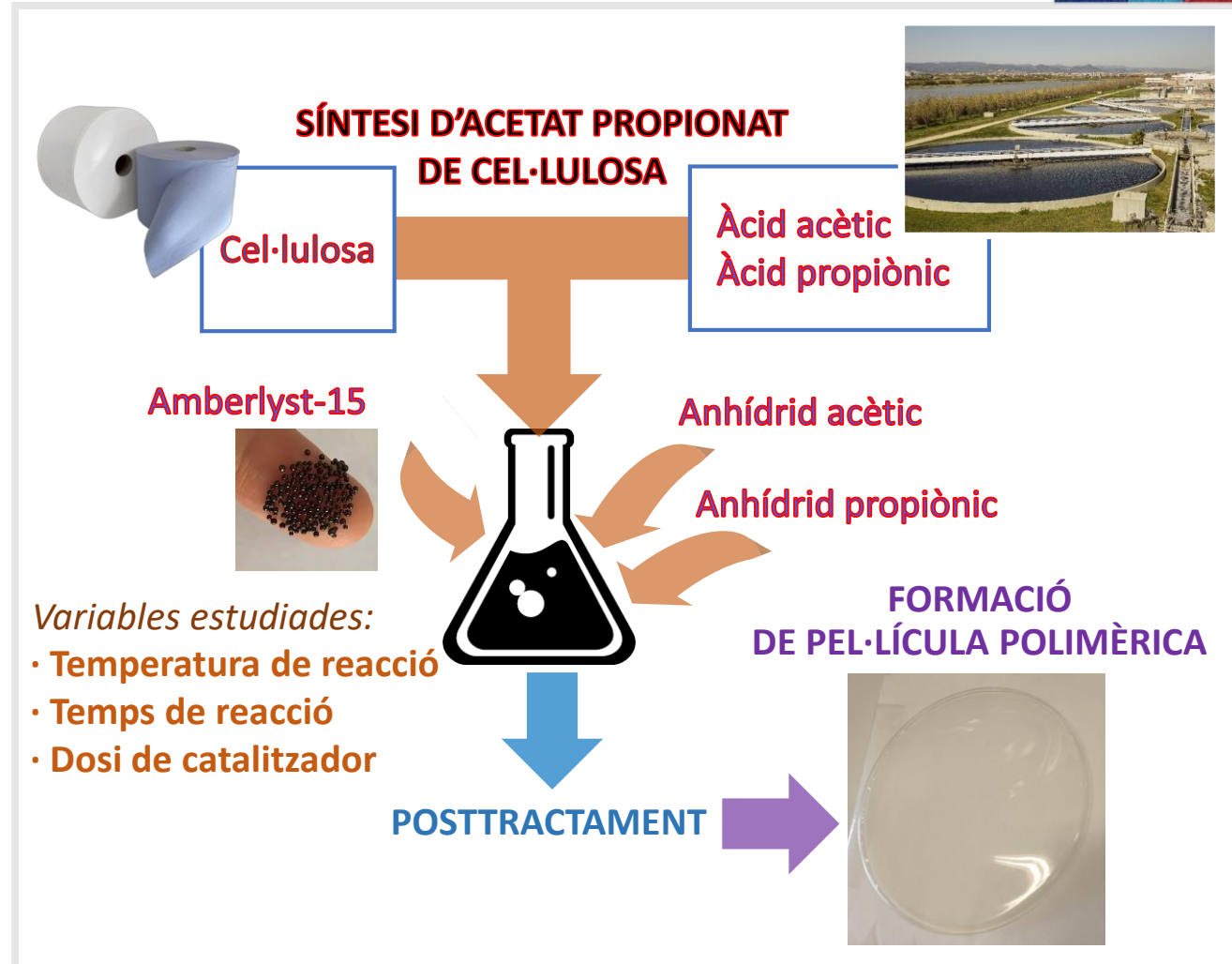
Joel Martin Morales; Joan Dosta; Rodrigo Soto

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



Dins el context d'economia circular, l'acetat propionat de cel·lulosa (CAP, de l'anglès *cellulose acetate propionate*) podria ser una alternativa sostenible als plàstics de base petroquímica, gràcies als reactius que el formen. D'una banda, la cel·lulosa és un material natural relativament fàcil d'obtenir o recuperar, i els àcids grassos volàtils (AGV), com l'àcid acètic o l'àcid propiònic, es poden generar mitjançant processos de fermentació acidogènica de residus orgànics.

En aquest treball s'ha estudiat la síntesi de CAP en forma de pel·lícula polimèrica a partir de l'esterificació de la cel·lulosa amb AGV a diferents temperatures (35, 45 i 55 °C). El catalitzador emprat ha estat l'Amberlyst-15 i el temps de reacció per generar el polímer ha estat com a màxim de 6 hores. Igualment, per cadascuna de les temperatures assajades, s'ha avaluat l'impacte de la dosi de catalitzador i el temps de reacció sobre les característiques del polímer generat.



Síntesi de sondes fluorescents amb potencial biomèdic mitjançant reaccions multicomponents

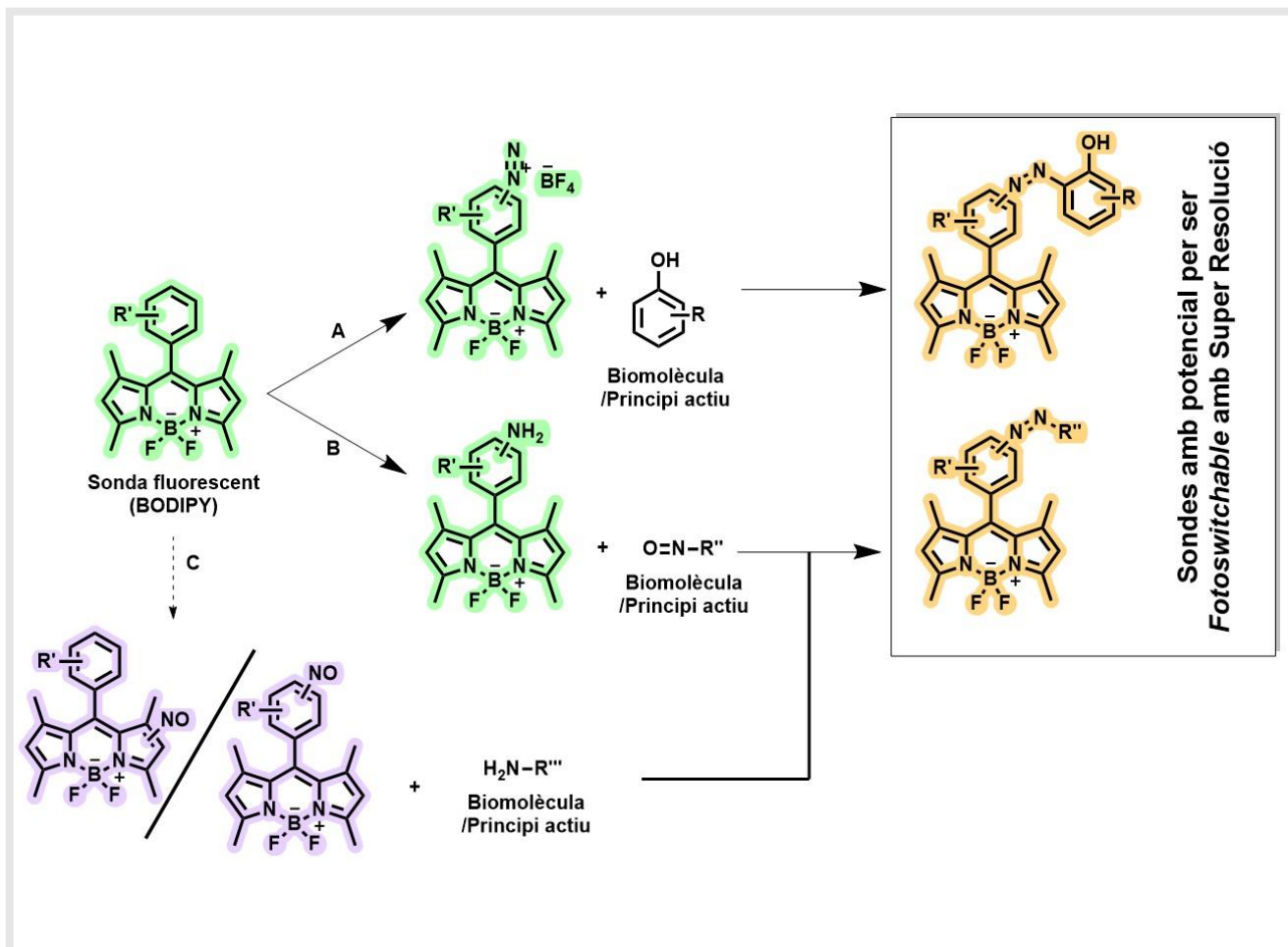


Donna Martínez López;¹ Ouldouz Gashgaei;¹ Rodolfo Lavilla¹

¹ Departament de Farmacologia, Toxicologia i Química Terapèutica. Facultat de Farmàcia i Ciències de l'Alimentació

El projecte desenvolupa sondes fluorescents BODIPY amb potencial biomèdic per a la detecció en temps real. Aquestes sondes permeten una supervisió precisa de *targets* específics i superen el límit de difracció de la microscòpia convencional (superresolució) mitjançant l'ús de *photoswitches*, que canvien la seva geometria i les seves propietats en resposta a la llum.

Es van sintetitzar i caracteritzar compostos azo-BODIPY, i es van explorar noves rutes sintètiques per obtenir mostres pures i suficients per al testatge biològic i fisicoquímic. Es van aconseguir sintetitzar i purificar dos compostos (B.1 i B.2), a més de dos conjugats amb dietilestilbestrol (E.1 i E.2). Tanmateix, alguns compostos van presentar dificultats de purificació. Aquests resultats destaquen el potencial de les sondes fluorescents en aplicacions mèdiques i diagnòstiques avançades.



Compostos de valència mixta Co(III)/Fe(II) amb pont cianur i fragments fotodinàmics

Jordi Martínez Morató; Manuel Martínez; Montserrat Ferrer

Departament de Química Orgànica i Inorgànica. Secció de Química Inorgànica

Comissió de Dinamització Lingüística



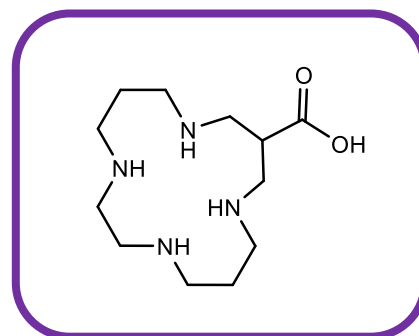
UNIVERSITAT DE
BARCELONA

Facultat de Química

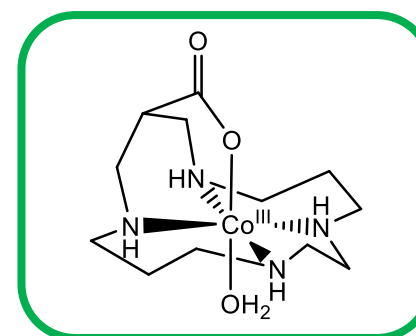


Els compostos de valència mixta són espècies amb més d'un centre metàl·lic que pot assolir més d'un estat d'oxidació. Generalment, presenten transferències de càrrega metall-metall (MMCT) que poden produir-se en la regió de la llum visible, i donar lloc a la possibilitat d'un fenomen d'electrocromisme reversible en oxidat o reduir un dels centres metàl·lics [1]. D'altra banda, la presència de derivats de l'azobenzè en els complexos els pot atorgar activitat com a fotointerruptors, ja que poden presentar reaccions d'isomerització reversibles que, a més, podran resultar afectades per la presència de la MMCT [2].

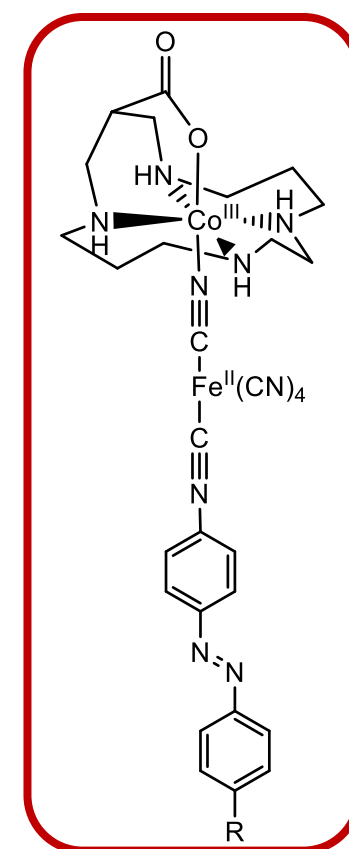
L'abast del projecte comprèn inicialment la síntesi dels lligands macrocíclics encapsulants pentadentats i l'obtenció dels seus complexos de Co^{III}, així com la preparació d'azoderivats connectats a centres de Fe^{II}. La combinació d'aquestes dues unitats ha de donar lloc a compostos de valència mixta Co^{III}/Fe^{II} dels quals es podran estudiar les propietats redox i fotoquímiques.



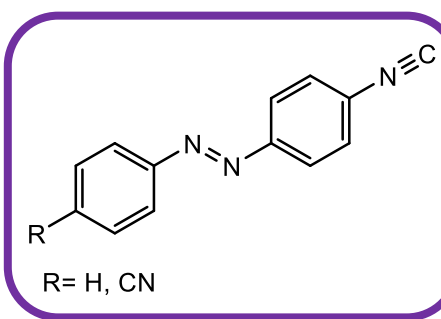
Síntesi de
ligands



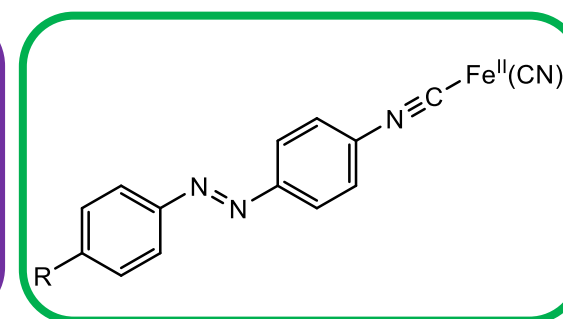
Coordinació
a metalls



Compostos
Co^{III}/Fe^{II}



R = H, CN



Referències

[1] B. Macpherson, B. Alzoubi, P. Bernhardt, M. Martínez, P. Tregloan. *Dalton Trans.*, **2005**, 1459-1467.

[2] M. Bardají, M. Font-Badia, A. Gallen, B. Garcia-Cirera, M. Ferrer, M. Martínez. *Dalton Trans.*, **2023**, 52, 1720-1730.

Determinació estructural i simulació computacional d'un enzim dissenyat per a la química bioortogonal

Laura Meiya Mazo Pirla;¹ Beatriz Piniello;¹ Olga Moroz;² Yu Liu;³ Gideon Davies;² Ben Schumann;³ Carme Rovira¹

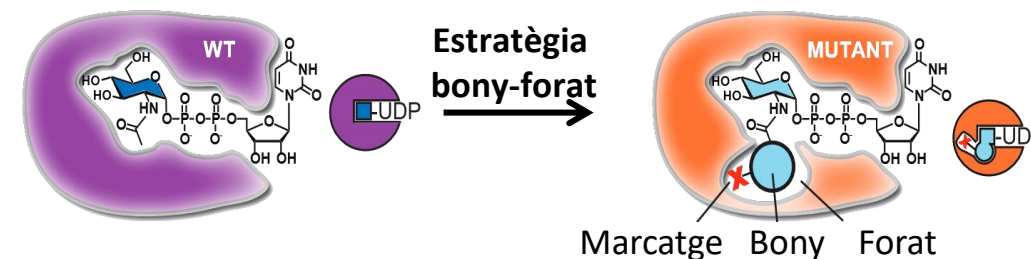
¹ Departament de Química Inorgànica i Orgànica (Secció de Química Orgànica) i Institut de Química Teòrica i Computacional (IQTC)

² Departament de Química, Universitat de York, York, Regne Unit

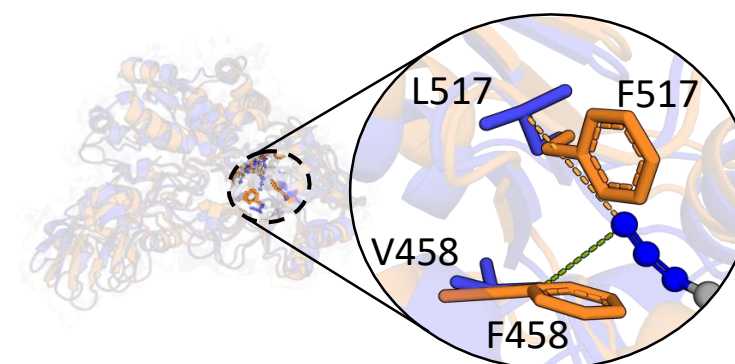
³ Imperial College London i Institut Francis Crick, Londres, Regne Unit

L'estratègia del bony-forat consisteix a modificar genèticament certs residus voluminosos d'un enzim perquè contingui un «forat» en la seva estructura, complementari a un «bony» que presentarà el seu substrat. Aquest *bony* permet aplicar la química bioortogonal a través del seguiment del producte al llarg de la seva via metabòlica [1]. Un estudi previ va revelar que quan es fan les mutacions F458V i F517L a l'enzim glicosiltransferasa MGAT5, aquest mostra una clara selectivitat pel lligand UDP-GlcNButAz, que conté un grup azida com a *bony* [2]. En aquest projecte s'ha estudiat l'estabilitat del grup azida en el forat de l'enzim mutat, mitjançant simulacions de dinàmica clàssica.

També s'ha determinat experimentalment l'estructura de l'enzim mutat sense substrat, a fi de poder dur a terme més estudis computacionals en el futur.



Esquema del bony-forat aplicat a l'enzim MGAT5.^[1]



● MGAT5 mutat ● MGAT5 natiu

Superposició de l'enzim mutat amb la seva estructura nativa.

Referències

[1] Ben Schumann, Stacy A. Malaker, et al., *Molecular cell*, **2020**, 78(5), 824–834.e15

[2] Yu Liu, Ganka Bineva-Todd, Richard Meek, et al., *ChemRxiv*, (article en procés de publicació), **2024**

Hidroformilació catalítica supramolecular d'al·lens amb complexos de rodi

David Mir; Anton Vidal-Ferran

Departament de Química Inorgànica i Orgànica. Secció de Química Inorgànica

Comissió de Dinamització Lingüística

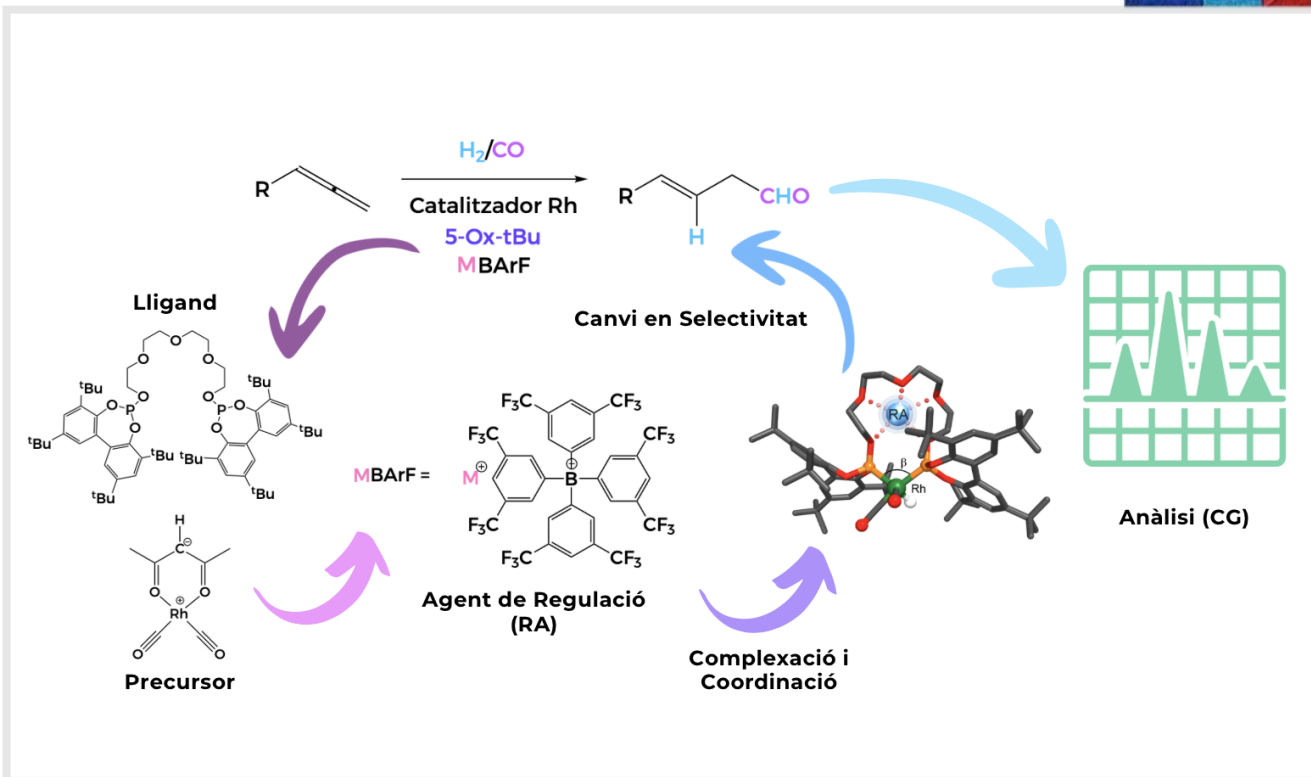


Facultat de Química



La hidroformilació d'al·lens amb catalitzadors de rodi regulables supramolecularment [1] representa una transformació sintètica altament interessant. Aquest procés transforma al·lens en aldehids insaturats mitjançant l'addició de monòxid de carboni i hidrogen, utilitzant complexos de rodi organitzats supramolecularment. Aquests sistemes supramoleculars [2] superen els mètodes tradicionals i ofereixen un control precís i una major selectivitat en les reaccions d'hidroformilació.

La investigació demostra que els catalitzadors regulables supramolecularment milloren l'eficiència de la reacció i redueixen subproductes. Aquest enfocament innovador té potencial per a aplicacions industrials perquè permet la producció de compostos d'alt valor afegit de manera més sostenible. Els resultats obtinguts obren noves perspectives en el camp de la catàlisi i presenten una alternativa prometedora per a la síntesi de productes químics, entre els quals destaquen valuosos intermedis sintètics.



Referències

- [1] Gregorio, G.; Montrasi, G.; Tampieri, M.; Cavalieri d'Oro, P.; Pagani, G.; Andreetta, A. Chim. Ind. (Milan) 1980, 62, 389.
- [2] Llorente, N.; Fernández-Pérez, H.; Núñez-Rico, J. L.; Carreras, L.; Martínez-Carrión, A.; Iniesta, E.; Romero-Navarro, A.; Martínez-Bascuñana, A.; Vidal-Ferran, A. Pure Appl. Chem. 2019, 91, 3-15.

Caracterització i classificació de mels mitjançant empremtes LC-LRMS i quimiometria



Danica Mostoles;¹ Oscar Núñez^{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 Professor Serra Húnter, Generalitat de Catalunya

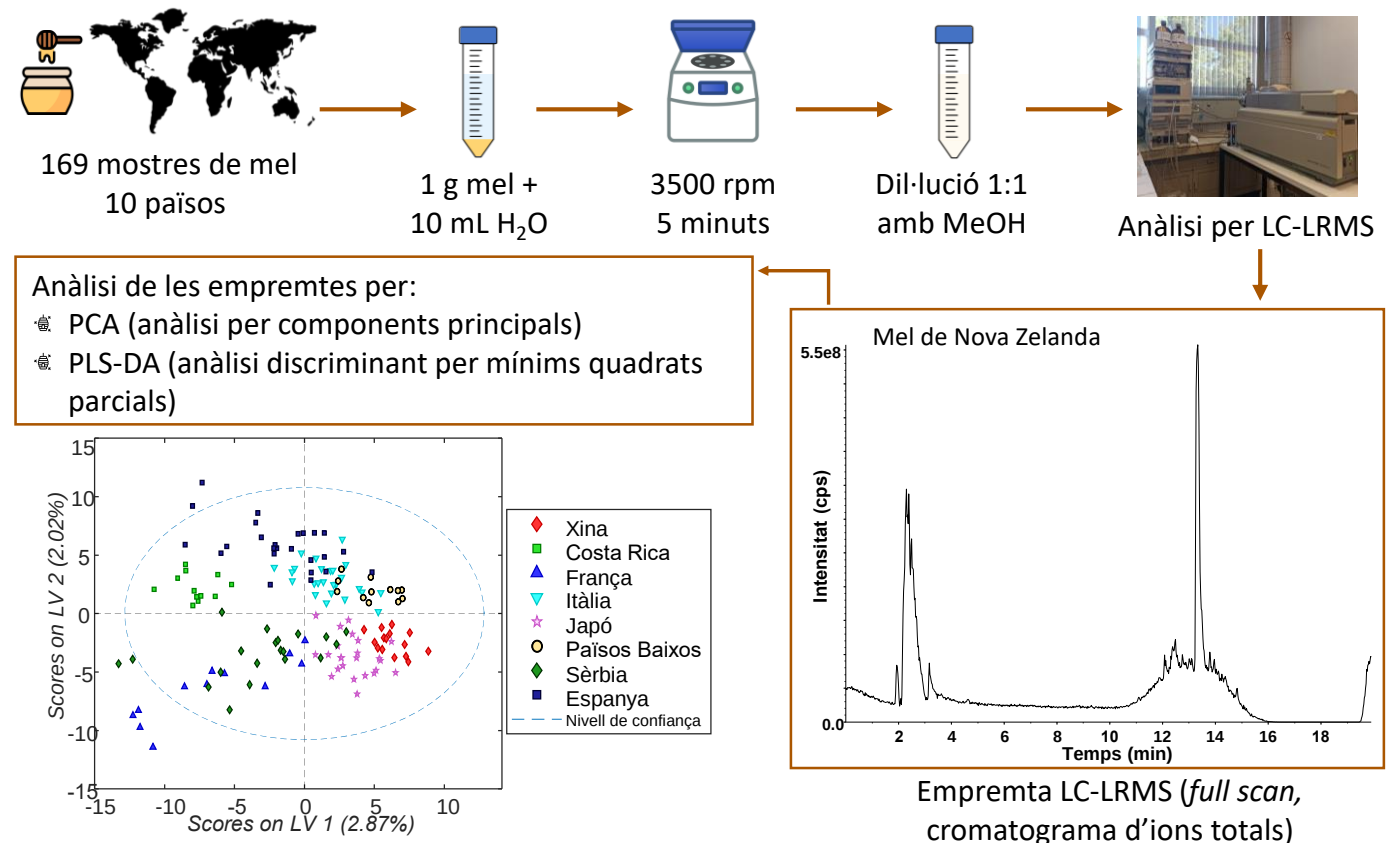
Una de les preocupacions de la nostra societat avui dia és la qualitat dels aliments. La diversitat en regions de producció d'un aliment origina productes de diferent qualitat i valor, cosa que dona lloc a accions fraudulentas per aconseguir un benefici econòmic il·lícit. La mel és produïda de forma natural per les abelles a partir del nèctar de flors i altres secrecions i, degut a la seva gran diversitat en varietats botàniques i en regions de producció, és un aliment molt susceptible a frau [1].

En aquest treball s'avalua la viabilitat d'utilitzar les empremtes obtingudes per cromatografia de líquids acoblada a l'espectrometria de masses de baixa resolució per classificar mels produïdes a diferents països, i de diverses varietats botàniques, mitjançant eines quimiomètriques [2].

Referències

[1] Vîjan, L.E.; Mazilu, I.C.; Enache, C.; Enache, S.; Topală, C.M. *Foods* **2023**, *12*, 2134.

[2] García-Seval, V.; Saurina, J.; Sentellas, S.; Núñez, O. *Molecules* **2022**, *27*, 7812.



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

A. Oliveras; A. Vanrell; B. Limburg

Departament de Química Inorgànica i Orgànica. Secció de Química Orgànica

Comissió de Dinamització Lingüística



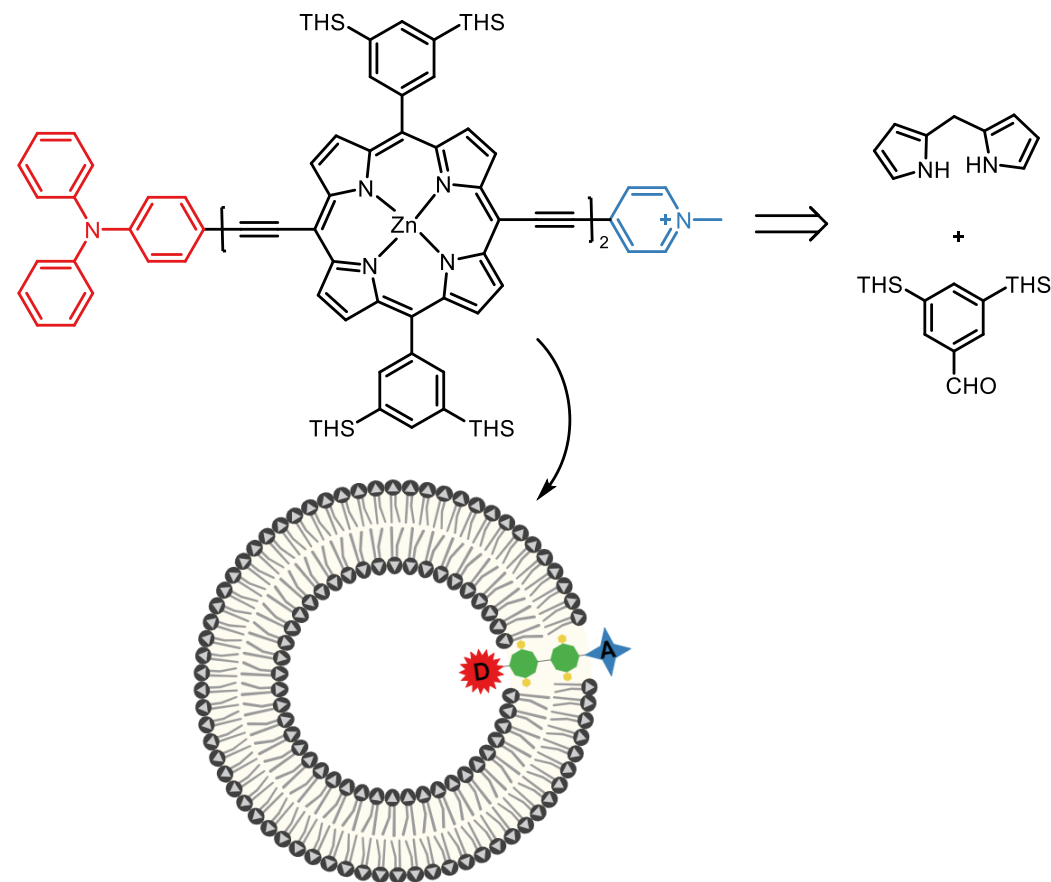
UNIVERSITAT DE
BARCELONA

Facultat de Química



Molts organismes han desenvolupat mecanismes moleculars per recollir, conservar i transduir l'energia a través de les seves membranes. Un procés ben conegut és la fotosíntesi, on la llum es converteix en energia química. Específicament, l'absorció de llum per part de molècules fotosensibles en el cloroplast condueix a una transferència d'electrons unidireccional.

En aquest projecte es pretén crear un sistema artificial que imiti aquests processos mitjançant la fotoinducció d'electrons entre un grup donador d'electrons i un d'acceptor a través d'una membrana lipídica. Per aquest motiu, volem sintetitzar porfirines de zinc substituïdes amb grups donadors i acceptors, enllaçar-los entre ells mitjançant un enllaç butadií per donar dímers porfirínics de zinc. Un cop sintetitzats, s'introduiran a una bicapa lipídica d'un liposoma artificial.



Multianàlisi d'alt rendiment dels compostos de la llista d'observació europea 2022/1307 en aigües

Comissió de Dinamització Lingüística

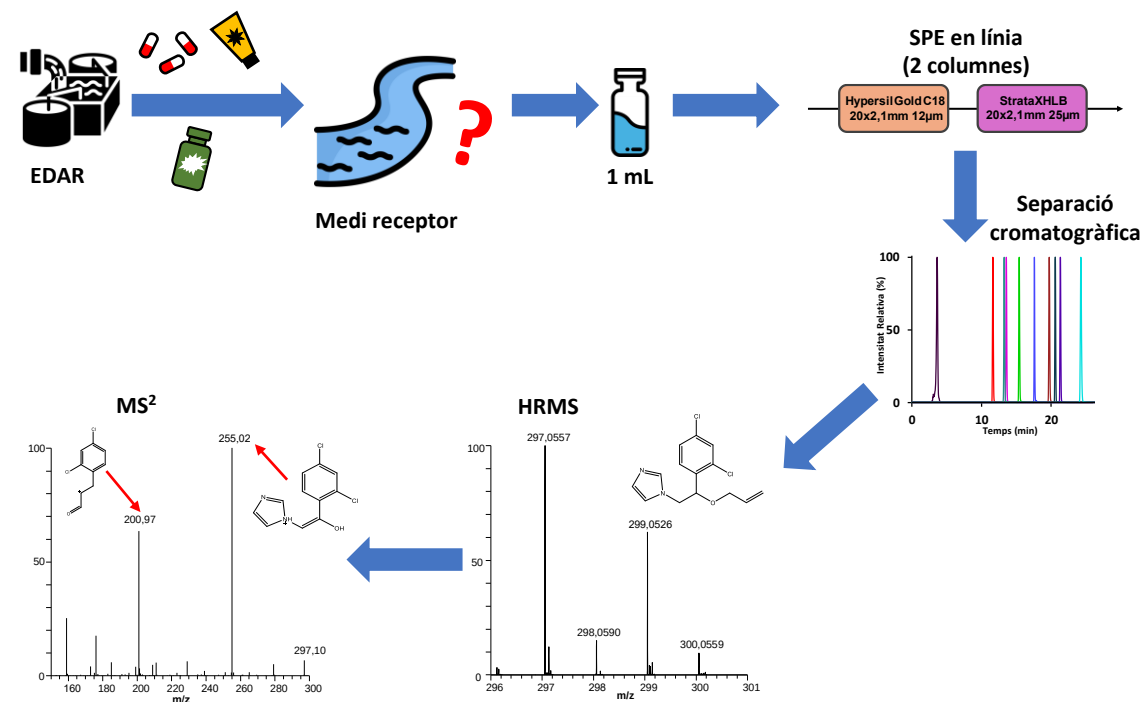


Miquel Ortiz;^{1,2} Eva María Herrera;¹ Cintia Flores¹

¹ Laboratori d'Espectrometria de Masses/Contaminants Orgànics, IDAEA-CSIC

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

Aquest treball té com a objectiu el desenvolupament d'un mètode analític per a la determinació dels 26 compostos de la darrera llista d'observació (2022/1307/CE) en aigües superficials i efluent de depuradora mitjançant cromatografia líquida acoblada a espectrometria de masses d'alta resolució en tàndem (LC-HRMS/MSⁿ). La llista inclou compostos molt heterogenis, entre els quals fàrmacs, pesticides i filtres UV [1]. Per minimitzar la manipulació de la mostra, obtenir una sensibilitat adequada i facilitar-ne l'automatització, el mètode consta d'una extracció en fase sòlida (SPE) en línia. La identificació s'ha fet amb un espectròmetre de masses Tribid Orbitrap amb quadrupol i trampa d'ions, que permet obtenir espectres MSⁿ utilitzant diferents modes de fragmentació (HCD i CID) i energies de col·lisió.



Referències

[1] Loos R. et al., *Science of The Total Environment* **912** (2024) 168707.

Recuperació i purificació de polifenols en residus agroalimentaris amb la resina S7968

Manal Ouchen Lamaiz; Mercè Granados; Jose Luis Beltrán

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

Comissió de Dinamització Lingüística



UNIVERSITAT DE
BARCELONA

Facultat de Química

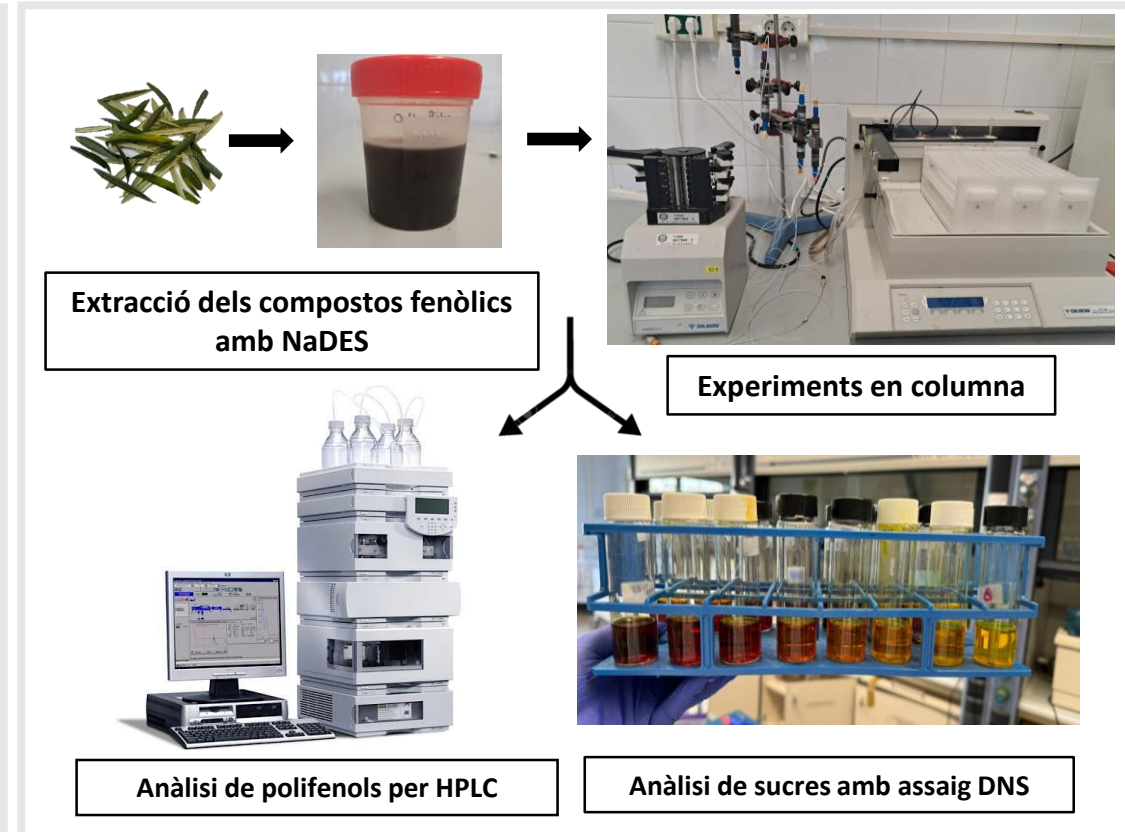


La recuperació de compostos bioactius a partir de residus agroalimentaris és una àrea de recerca molt activa en el marc de l'economia circular. Recentment s'han desenvolupat moltes metodologies d'extracció utilitzant ecosolvents, i els solvents eutèctics profunds naturals (NaDES) en són un exemple.

Hi ha nombrosos estudis sobre l'ús de NaDES per a l'extracció de polifenols, però la informació sobre la purificació dels extractes obtinguts és molt escassa [1,2].

En aquest treball s'ha utilitzat la resina macroporosa Lewatit S7968 (un polímer de poliestirè-divinilbenzè) per a la purificació d'extractes NaDES procedents de fulles d'olivera mitjançant metodologia en columna. Els polifenols s'elueixen posteriorment amb mesclures etanol/aigua.

Les fraccions eluïdes s'han analitzat per cromatografia de líquids d'alta resolució amb detecció UV (HPLC-UV) per a la determinació de polifenols. En aquestes fraccions també s'ha determinat el contingut en sucres, emprant el mètode de l'àcid 3,5-dinitrosalicílic (DNS) [3] i la capacitat antioxidant amb l'assaig FRAP (*ferric reducing antioxidant power*).



Referències

- [1] A. Mir-Cercà, et al. *TrAC Trends in Analytical Chemistry*, **2023**, 161, 116994.
- [2] P. Tapia-Quirós, et al. *Foods*, **2022**, 11, 362.
- [3] R. Yildiz, et al. *Int. J. Food Sci.*, **2022**, 30, 100597.

Estudi de l'adsorció de filtres solars UV sobre microplàstics mitjançant HPLC-MS/MS

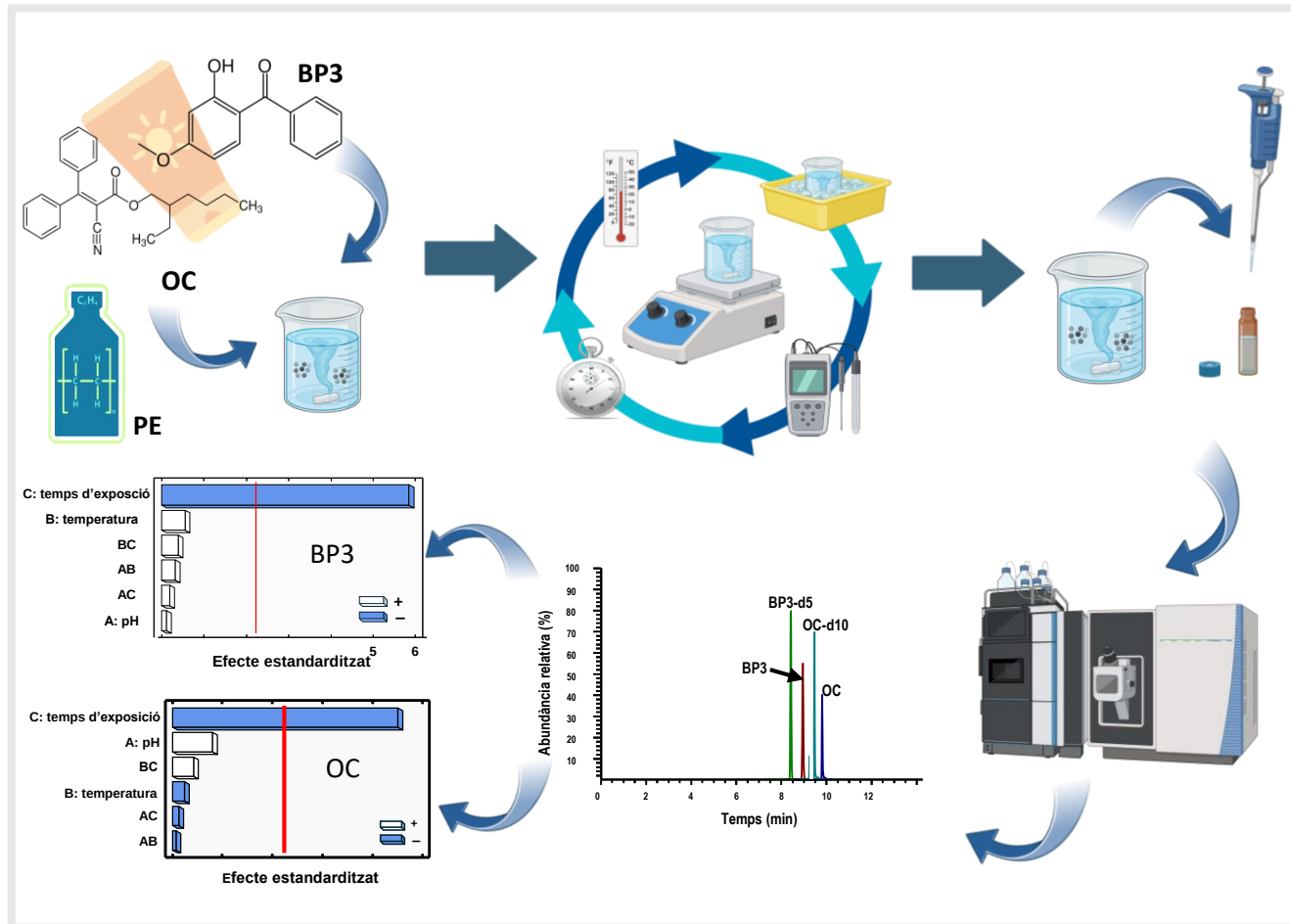


Mariana Palape-Oxa;^{1,2} Albert Contreras-Llin;² Jose M. Diaz-Cruz;¹ M. Silvia Diaz-Cruz²

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

² Institut de Diagnosi Ambiental i Estudis de l'Aigua (IDAEA) Centre d'Excel·lència Severo Ochoa, Consell Superior d'Investigacions Científiques (CSIC)

Els microplàstics (MP) i els filtres solars UV (UVF) són contaminants que provoquen una preocupació global. Els MP poden actuar com a vector de transport i acumulació de contaminants en el medi. Una exposició conjunta entre MP i UVF esdevé un motiu de preocupació encara més gran. En aquest treball es vol conèixer la capacitat d'adsorció del polietilè (PE) quan s'exposa a la benzofenona-3 (BP3) i a l'octocrilè (OC), considerant diferents paràmetres com ara el pH, la temperatura i el temps d'exposició, utilitzant un disseny compost central (CCD). Per avaluar el grau d'adsorció dels UVF mitjançant la determinació dels perfils de concentració, s'utilitza la metodologia d'HPLC-MS/MS. Els experiments indiquen que el temps d'exposició és un factor clau en l'adsorció, mentre que el pH i la temperatura tenen un efecte limitat en el procés.



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

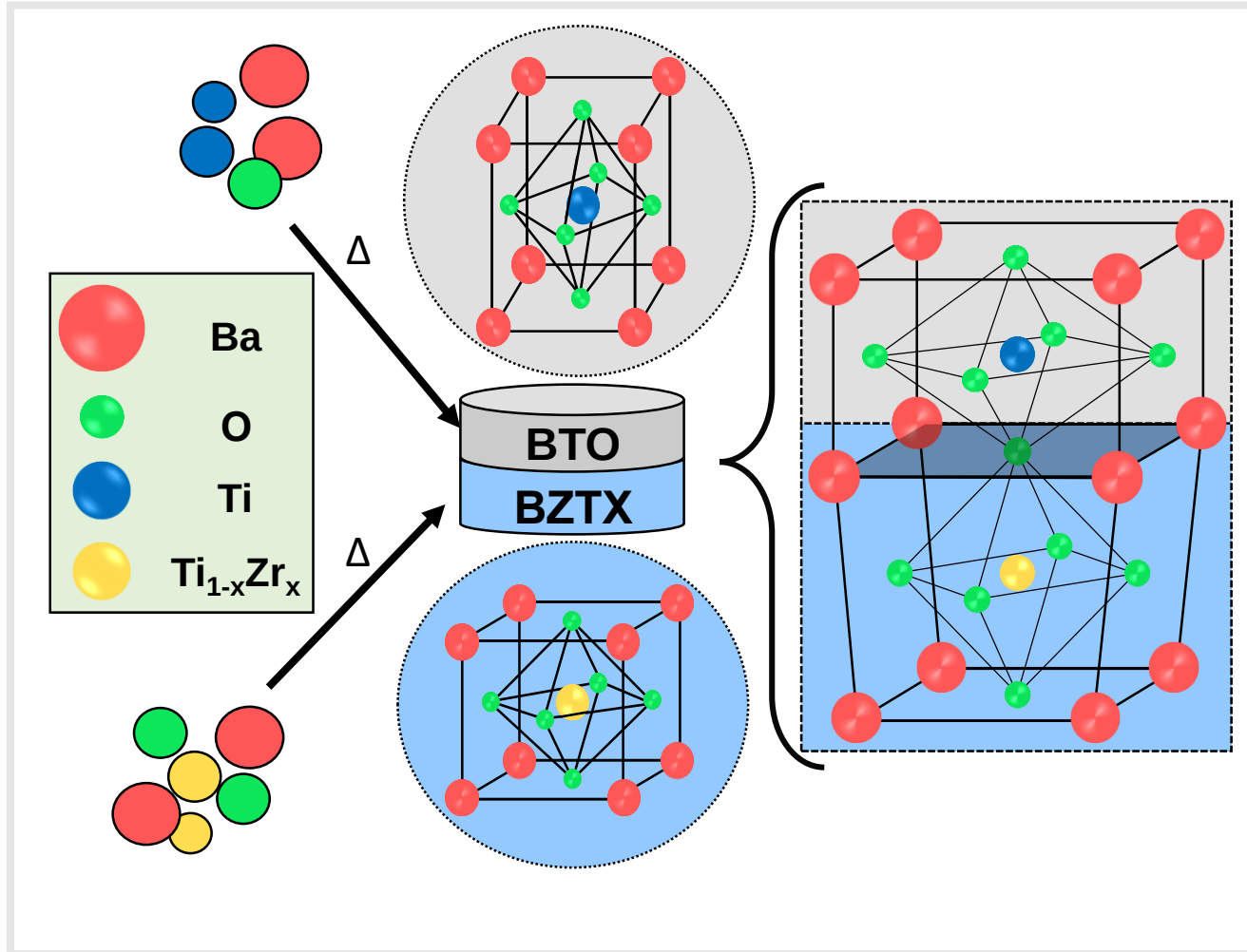
Andrés Rodríguez Gallego; Xavier Vendrell Villafruela; Lourdes Mestres Vila

Departament de Química Inorgànica i Orgànica. Secció de Química Inorgànica



Els condensadors elèctrics són part fonamental dels dispositius electrònics que fem servir diàriament. Els més utilitzats habitualment estan formats per un material ferroelèctric basat en plom (PbTiO_3). A causa de la toxicitat i l'impacte mediambiental, és crucial trobar alternatives que no facin ús d'aquest element, però que alhora en mantinguin la capacitat d'emmagatzematge d'energia, o fins i tot la millorin. En aquest context, s'ha demostrat la utilitat de formar multicapes de materials ferroelèctrics lliures de plom, com el BaTiO_3 (BTO) o els seus derivats, en substituir parcialment el titani per zirconi ($\text{BaTi}_{1-x}\text{Zr}_x\text{O}_3$, BZTX).

Aquest treball estudia com es comporta la interfície quan diferents materials s'apilen en dues capes. Els materials preparats s'han caracteritzat per difracció de raigs X i se n'han avaluat les propietats elèctriques mitjançant espectroscòpia d'impedàncies.



Impressió 3D de silicones bicomponents per a dispositius mèdics

Mariona Roura Bosch; Pol Barcelona Pons; Elena Xuriguera Martín

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

Comissió de Dinamització Lingüística



UNIVERSITAT DE
BARCELONA

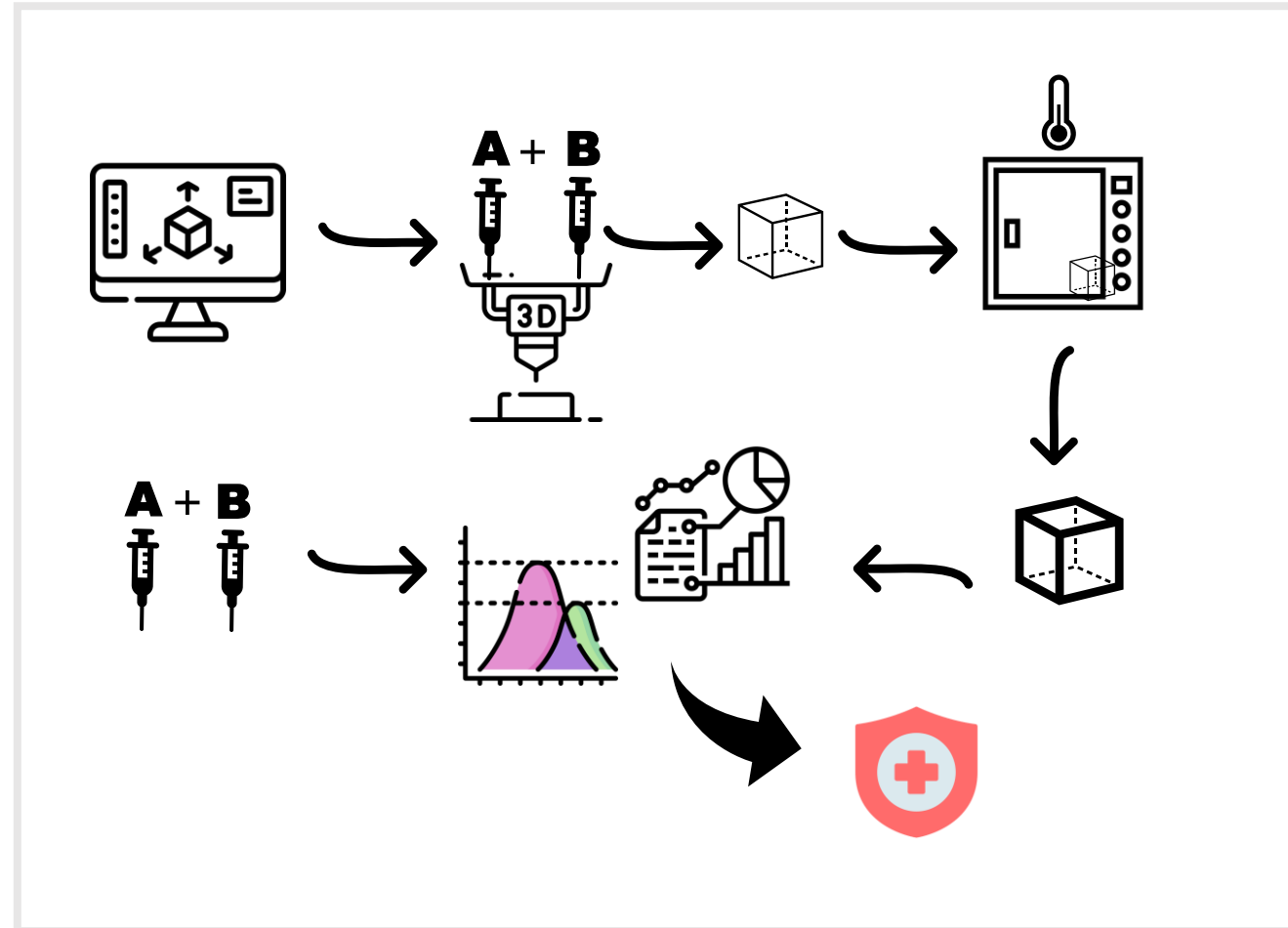
Facultat de Química



La manufactura additiva o impressió 3D és una tècnica de fabricació destacada per la llibertat en el disseny de les peces. La tècnica DIW (escriptura directa de tinta) consisteix a extrudir una tinta viscosa. Avenços recents en aquesta tècnica han permès la impressió de silicones.

Les silicones són polímers que consisteixen en cadenes reticulades de monòmers $[(CH_3)_2SiO]$. Presenten molta estabilitat (química i tèrmica) i són altament biocompatibles. Aquestes propietats generen un gran interès en el sector mèdic per a la fabricació de dispositius mèdics.

Per al desenvolupament de peces a partir de la tècnica DIW, és de gran importància fer un estudi previ de les propietats reològiques i tèrmiques de les tintes, així com un estudi de les propietats mecàniques de les peces finals. Conèixer les propietats del material permet definir correctament els paràmetres d'impressió i les condicions del tractament tèrmic.



Exposició a pesticides neurotòxics en dones embarassades de la Garrotxa

Paula Ruiz;^{1,2} Ferran Campillo i López;³ Mercè Garí¹

¹ Departament de Química Ambiental, Institut de Diagnòstic Ambiental i Investigació de l'Aigua (IDAEA-CSIC)

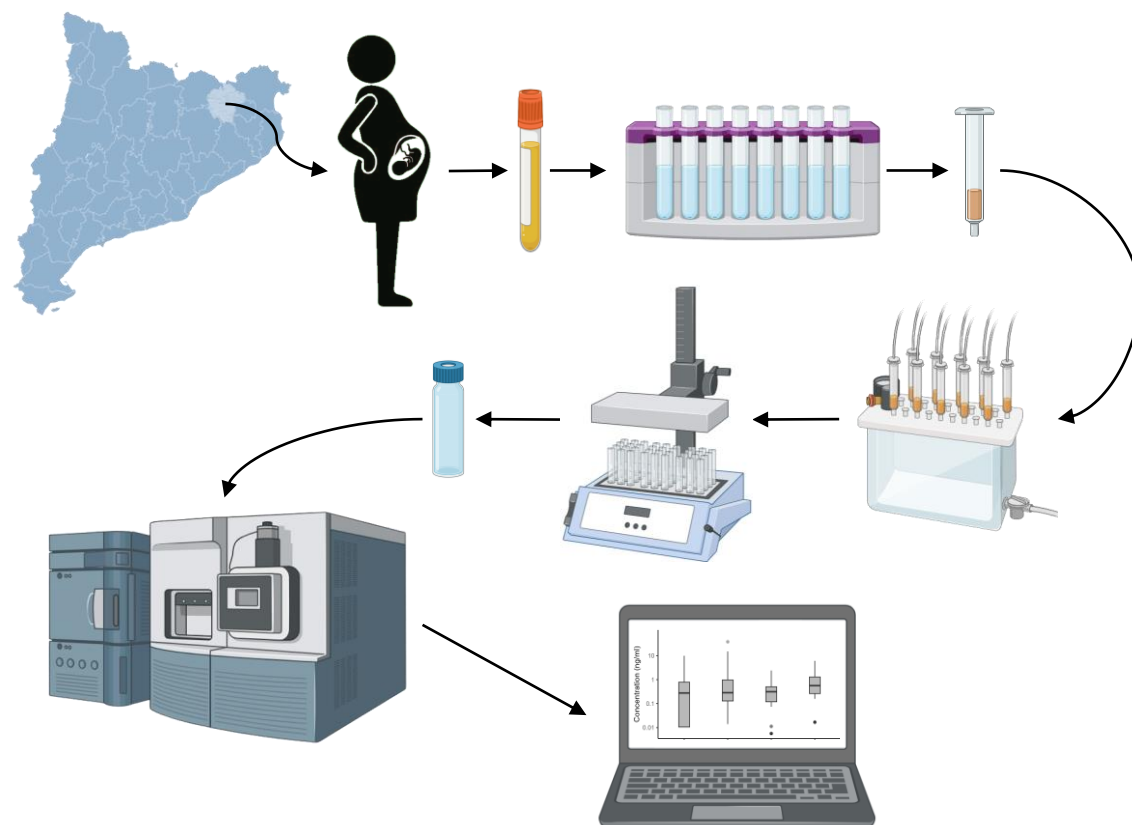
² Departament d'Enginyeria Química i Química Analítica. Secció de Química Analítica

³ Unitat de Salut Mediambiental Pediàtrica (PEHSU), Equip Pediàtric Territorial de la Garrotxa, Fundació Hospital d'Olot i Comarcal de la Garrotxa

Comissió de Dinamització Lingüística



Els infants són particularment susceptibles a les toxines ambientals, com ara organofosfats (OP), piretroides (PYR) i fungicides (FUNG), els quals afecten el desenvolupament neuronal i causen dificultats respiratòries. En el cos humà aquests compostos són típicament metabolitzats i excretats en l'orina en 4-48 hores després de l'exposició, depenent del compost. La detecció d'aquests pesticides en el fluid amniòtic suggereix l'exposició dels fetus a aquests compostos químics durant l'embaràs. Per aquest motiu, l'estudi de dones embarassades permet avaluar l'impacte de l'exposició prenatal a productes químics ambientals. Aquest estudi té com a objectiu determinar les concentracions d'organofosfats, piretroides i fungicides en mostres d'orina de dones embarassades de la Garrotxa (Catalunya).



Reaccions directes, catalítiques i asimètriques per a la construcció d'enllaços C—C

Laura Sánchez-Castillo; Leah O'Neill; Xènia Tarrach; Anna M. Costa; Pedro Romea; Fèlix Urpí

Departament de Química Inorgànica i Orgànica. Secció de Química Orgànica

Comissió de Dinamització Lingüística



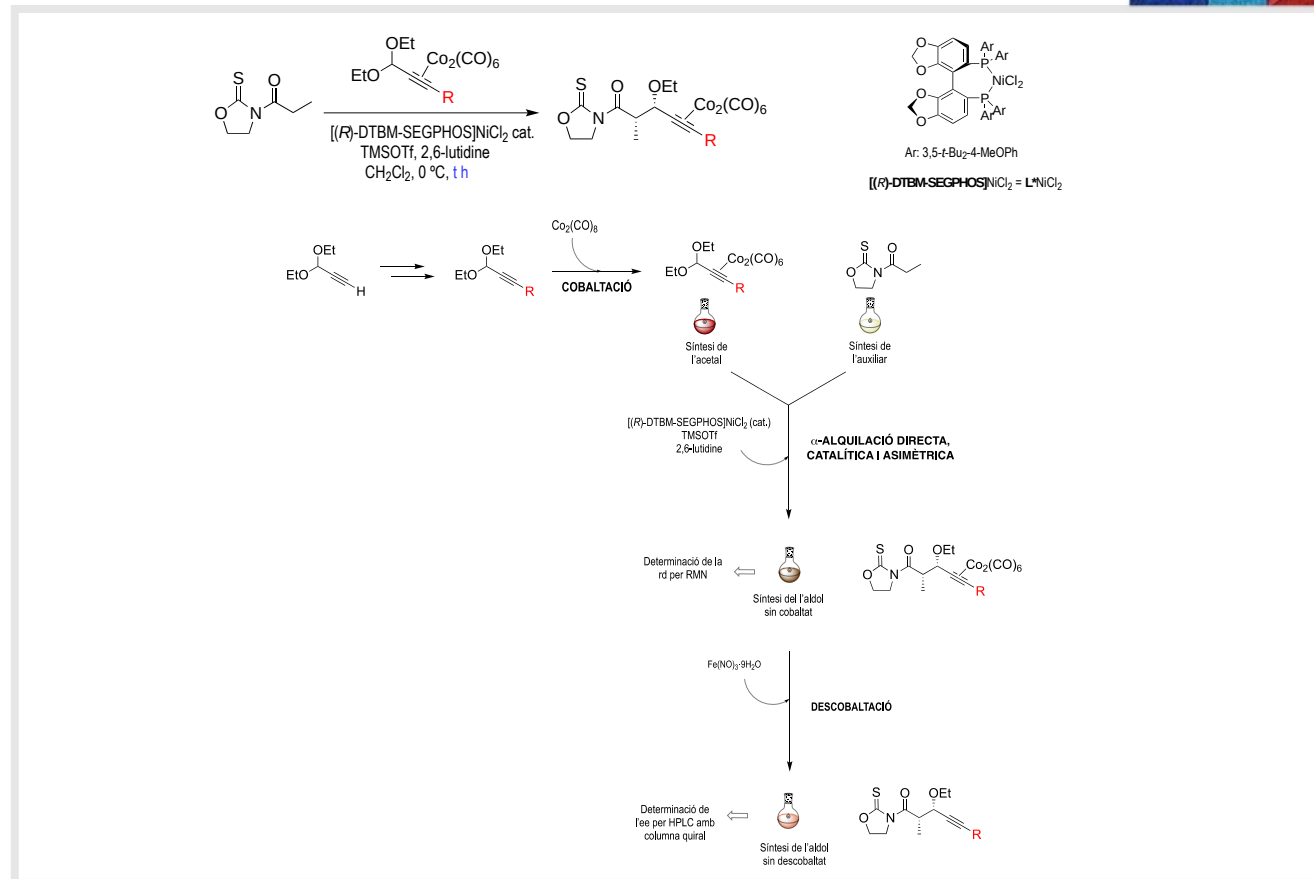
UNIVERSITAT DE
BARCELONA

Facultat de Química



És ben conegut que els enantiòmers tenen diferents activitats biològiques al nostre organisme. Per això, la construcció estereoselectiva d'enllaços C—C és un dels grans reptes de la síntesi orgànica [1]. En les aproximacions més clàssiques, el control estereoquímic s'ha aconseguit amb el control del substrat o la utilització d'auxiliars quirals [2,3]. Ara bé, en els darrers anys i per complir els principis de l'economia atòmica, els catalitzadors quirals han començat a substituir els auxiliars quirals i s'estan desenvolupant reaccions catalítiques i enantioselectives. En el cas de la química dels enolats, això ha implicat la recerca de reaccions directes en les quals l'enolat es genera de forma catalítica en presència de l'electròfil [4].

En aquest context, el nostre grup de recerca està desenvolupant una reacció d' α -alquilació directa, catalítica i asimètrica d'*N*-aciltiomides amb acetals propargílics cobaltats emprant $[(R)\text{-DTBM-SEGPHOS}]\text{NiCl}_2$ com a catalitzador, lutidina com a base i TMSOTf com a àcid de Lewis. La reacció permet obtenir estructures de tipus aldòlic d'estereoquímica *sin* [5].



[1] McConathy, M. J.; Owens, J., *Stereochemistry in Drug Action*, J. Clin. Psychiatry, **2003**, 5, 70-73.

[2] Evans, D. A.; Ennis, M. D.; Mathre, D. J., *Asymmetric Alkylation Reactions of Chiral Imide Enolates. A Practical Approach to the Enantioselective Synthesis of α -Substituted Carboxylic Acid Derivatives*, J. Am. Chem. Soc., **1982**, 104, 1737-1739.

[3] Heathcock, C. H.; Flippin, L. A., *Acyclic Stereoselection. 16. High Diastereofacial Selectivity in Lewis Acid Mediated Additions of Enolsilanes to Chiral Aldehydes*, J. Am. Chem. Soc., **1983**, 105, 1667-1668.

[4] Trost, B. M.; Brindle, C. S., *The Direct Catalytic Asymmetric Aldol Reaction*, Chem. Soc. Rev., **2010**, 39, 1600-1632.

[5] Fernández-Valpáris, J.; Romea, P.; Urpí, F.; Font-Bardia, M., *Stereoselective and Catalytic Synthesis of anti- β -Alkoxy- α -azido Carboxylic Derivatives*, Org. Lett., **2017**, 19, 6400- 6403.

Alquilació descarboxilativa activada amb MHAT: accés a productes d'acoblament no ramificats

Aina Serra Vert; Laura G. Rodríguez; Ben Bradshaw

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

Comissió de Dinamització Lingüística

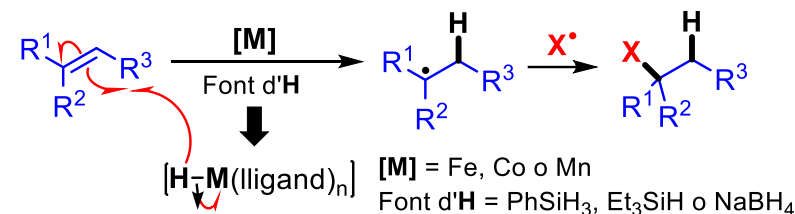


Facultat de Química

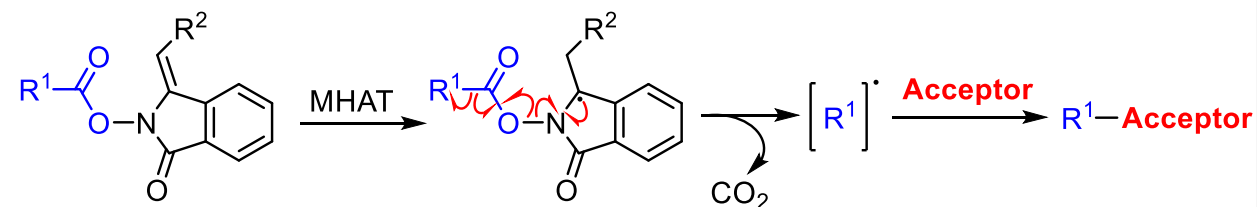


En aquest treball demostrem per primera vegada que els radicals primaris poden ser utilitzats en reaccions MHAT. Això és possible utilitzant èsters redox actius derivats de l'*N*-hidroxifthalimida que descarboxilen per MHAT, generant espècies radicalàries primàries, secundàries i terciàries. Aquestes espècies posteriorment poden ser atrapades amb una gamma de diferents acceptors, cosa que permet l'accés a nous productes sota condicions suaus i amb gran eficiència. Això constitueix el primer accés a productes d'acoblament no ramificats en condicions de MHAT [1] i obre les portes als àcids carboxílics com a nova font de precursors radicalaris en aquests processos.

(a) MHAT: accés a compostos amb selectivitat Markovnikov



(b) Aquest treball: Acoblament descarboxilatiu amb èsters de *N*-hidroxifthalimida



[1] (a) Shenvi, R. *et al. Chem. Rev.* **2016**, 116, 8912–9000. (b) Shenvi, R. *et al. Acc. Chem*

Fusió d'imatges hiperespectrals de fluorescència i Raman per a l'estudi de mostres cel·lulars

Comissió de Dinamització Lingüística



UNIVERSITAT DE
BARCELONA

Facultat de Química



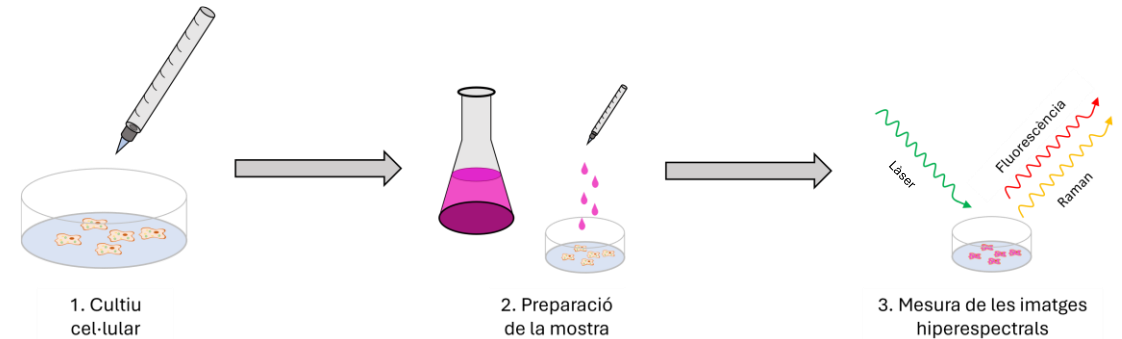
Albert Sicre Conesa;¹ Adrián Gómez-Sánchez;¹ Anna de Juan;¹ Maria Marsal;² José-Javier Ruiz;² Pablo Loza-Álvarez²

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

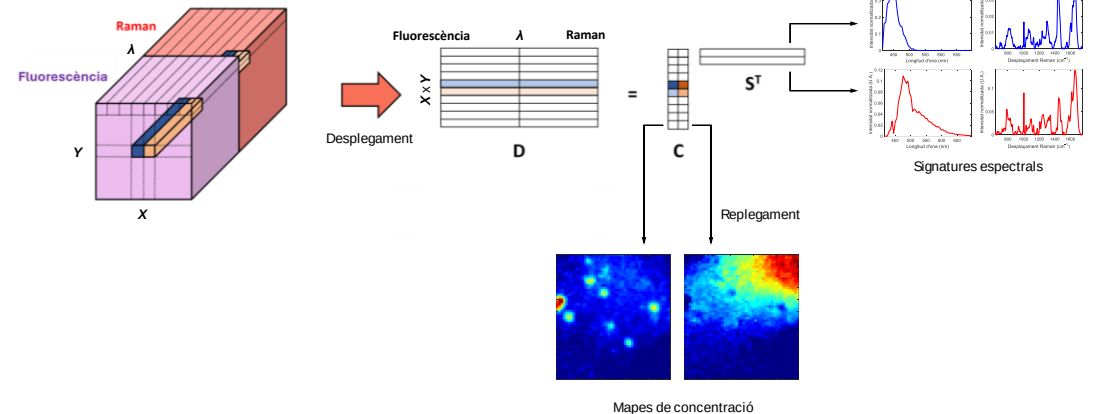
² ICFO-Institut de Ciències Fotòniques, Institut de Ciència i Tecnologia de Barcelona, Castelldefels

La utilització de tècniques d'imatgeria hiperespectral, com ara la microscòpia de Raman o de fluorescència, és habitual en l'àmbit de l'estudi de mostres cel·lulars ja que proporcionen informació química i morfològica. Tanmateix, la fusió d'imatges obtingudes amb les tècniques esmentades s'ha descartat quan la mostra no conté molècules fluorescents de manera natural. Com a novetat, en aquest estudi es proposa la fusió d'imatges de fluorescència obtingudes gràcies a l'ús de fluoròfors externs, que marquen estructures d'interès químic i biològic, i d'imatges Raman. En sotmetre les imatges fusionades al mètode d'anàlisi de resolució multivariant de corbes (MCR-ALS), s'obtenen mapes de concentració d'elements cel·lulars amb molt bona resolució espacial donada pel marcatge fluorescent, associats a signatures espectrals amb informació química de gran valor procedent de la tècnica de Raman, que permet la identificació inequívoca dels components de la mostra estudiada.

PREPARACIÓ DE LA MOSTRA



INTERPRETACIÓ DE LA MESURA



Hidrogenació asimètrica de quinolines i isoquinolines amb catalitzadors d'iridi

Rubén Torres;^{1,2} Yisong Wen;^{1,2} Xavier Verdager;^{1,2} Antoni Riera^{1,2}

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

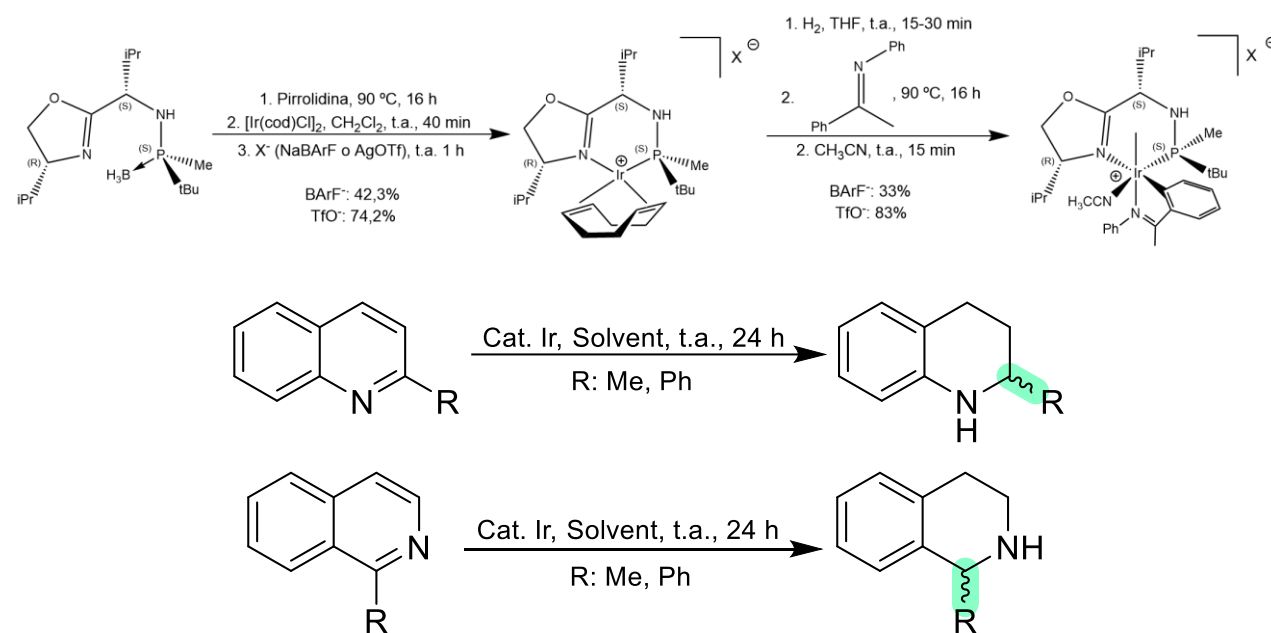
² Unitat de Recerca en Síntesi Asimètrica, Institut de Recerca Biomèdica de Barcelona (IRB Barcelona)



Les amines quirals són clau en molts compostos bioactius i medicaments; per tant, la síntesi estereoselectiva d'aquestes és un tema de gran interès [1]. Per aconseguir sintetitzar-les, la hidrogenació asimètrica (AH) d'imines catalitzada per metalls segueix sent un mètode notable.

El nostre equip va introduir un catalitzador d'iridi(III) que permetia la hidrogenació asimètrica d'*N*-metil i *N*-alquil imines amb selectivitats del 95 %-99 % ee [2]. Així doncs, hem incorporat de manera innovadora un grup acceptor d'enllaços H en dos catalitzadors d'iridi (diferenciant-se en el contraanió que porten), els quals utilitzem en la hidrogenació asimètrica d'imines heterocícliques, com són les quinolines i les isoquinolines.

En aquest projecte s'han sintetitzat aquests catalitzadors d'iridi i s'han seguit provant per la hidrogenació asimètrica de compostos com quinolines i isoquinolines.



Referències

[1] Nugent, T. C.; Wiley-VCH, Weinheim; **2010**.

[2] Wen, Y.; Riera, A.; Verdager, X.; et al.; Wiley-VCH, Weinheim; **2024**.



Metalls de la primera sèrie de transició i fases MAX suportats sobre feltre de carboni com a catalitzadors en química sostenible

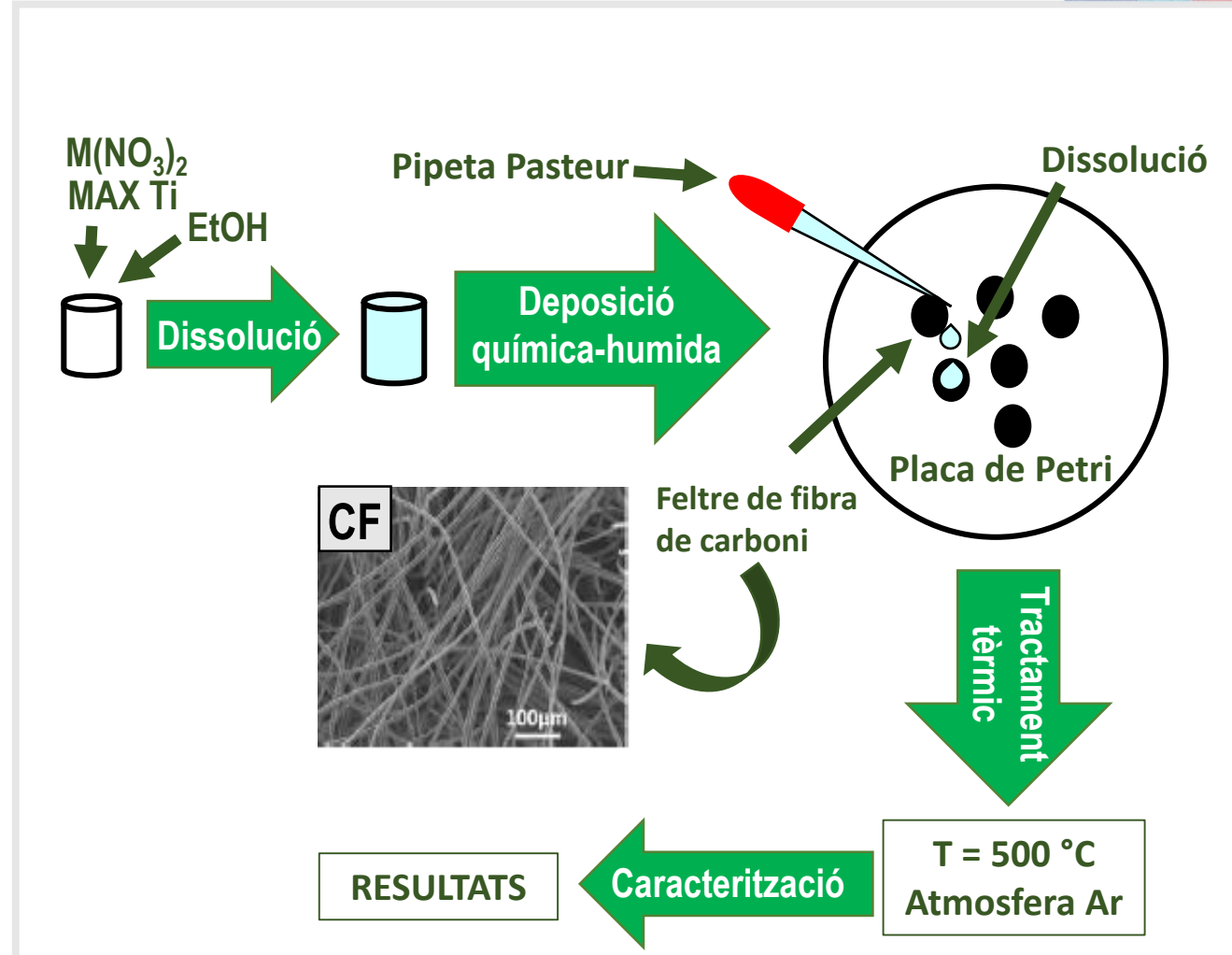
Adrián Ventura Crespín; Xavier Vendrell Villafruela; Lourdes Mestres Vila

Departament de Química Inorgànica i Orgànica. Secció de Química Inorgànica

Durant les últimes tres dècades, la química verda ha aportat un marc adequat per estudiar les problemàtiques que suposen un obstacle en el camí cap a la sostenibilitat global. Tant els sistemes de captura de CO_2 com la producció sostenible d'hidrogen són dues eines indispensables per disminuir les emissions fòssils.

En aquest context, hi ha dues reaccions que han cridat l'atenció dels investigadors: *a*) reacció inversa de desplaçament de vapor d'aigua (RIDVA), i *b*) reacció d'evolució d'hidrogen (REH).

Els millors catalitzadors per a aquestes dues reaccions, però, són metalls nobles, cosa que en dificulta i en limita l'aplicació en l'àmbit industrial. És per això que en aquesta investigació s'han preparat diferents materials catalítics emprant combinacions de metalls com ara Cu, Ni o Co i un carbur bidimensional de Ti conegut com a fase MAX de Ti_3AlC_2 , sobre un material carbonós mesoporós anomenat *feltre de carboni* (carbon felt), i se n'ha avaluat el comportament catalític.



Desenvolupament de microcàpsules amb residus plàstics per contenir PCM

David Vera-Rivera; Jessica Giró-Paloma

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

Comissió de Dinamització Lingüística



UNIVERSITAT DE
BARCELONA

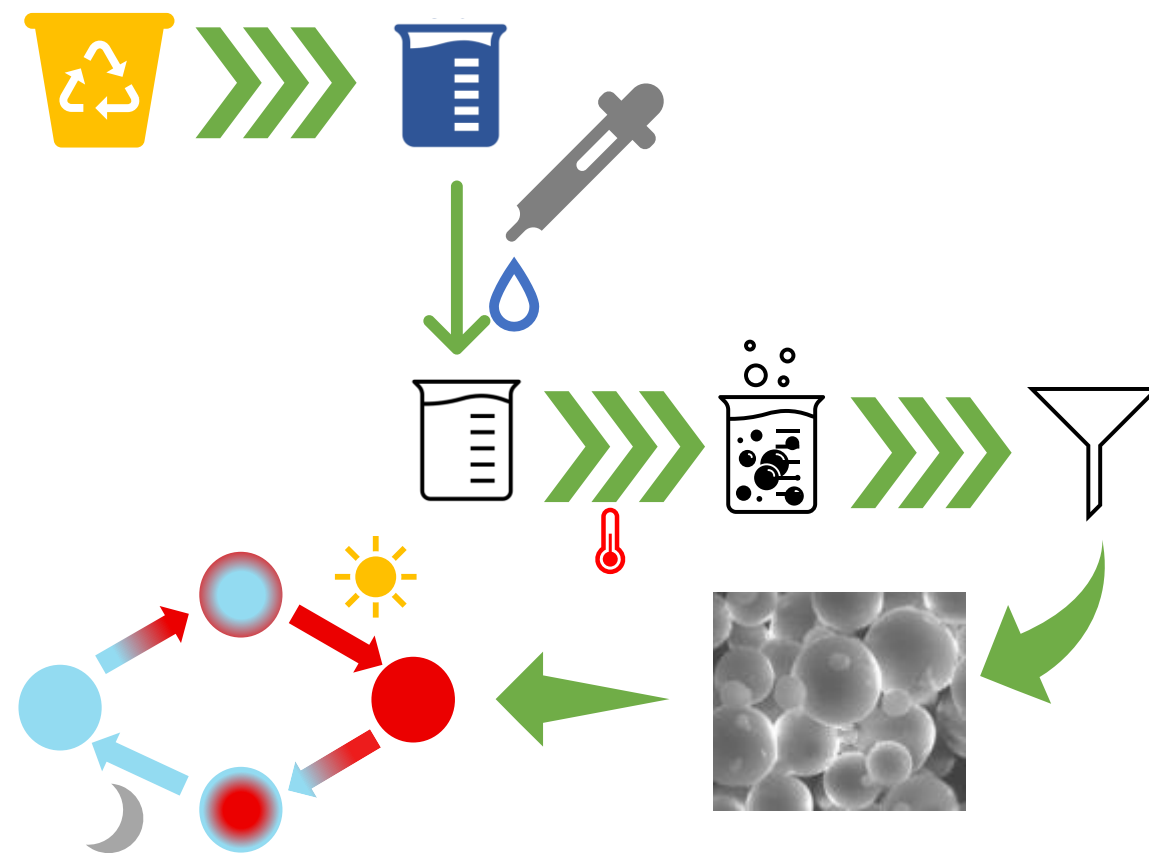
Facultat de Química



Durant les darreres dècades s'ha detectat un augment del consum energètic degut al condicionament tèrmic a les llars. L'emmagatzematge d'energia tèrmica (TES) és un mètode eficaç per afrontar aquesta problemàtica i s'hi empren materials anomenats de canvi de fase (PCM), que poden ser inorgànics o orgànics.

Els PCM orgànics s'han de microencapsular per evitar fugues en incorporar-se a materials de construcció i per preservar-ne la integritat. Aquestes microcàpsules de PCM (MPCM) presenten dues parts: una paret externa polimèrica (carcassa) i un nucli (PCM orgànic).

En aquest estudi la microencapsulació es fa amb polímers reciclats perquè el procés sigui més sostenible. En el nucli de la microcàpsula, el PCM que es fa servir està compost de materials renovables. Les MPCM es formen mitjançant la tècnica d'evaporació de dissolvent, on es dissol el polímer d'una emulsió formada amb H_2O amb el PCM orgànic.



Nova reacció de ciclació d'hemisilacetals via activació C–H al·lílica



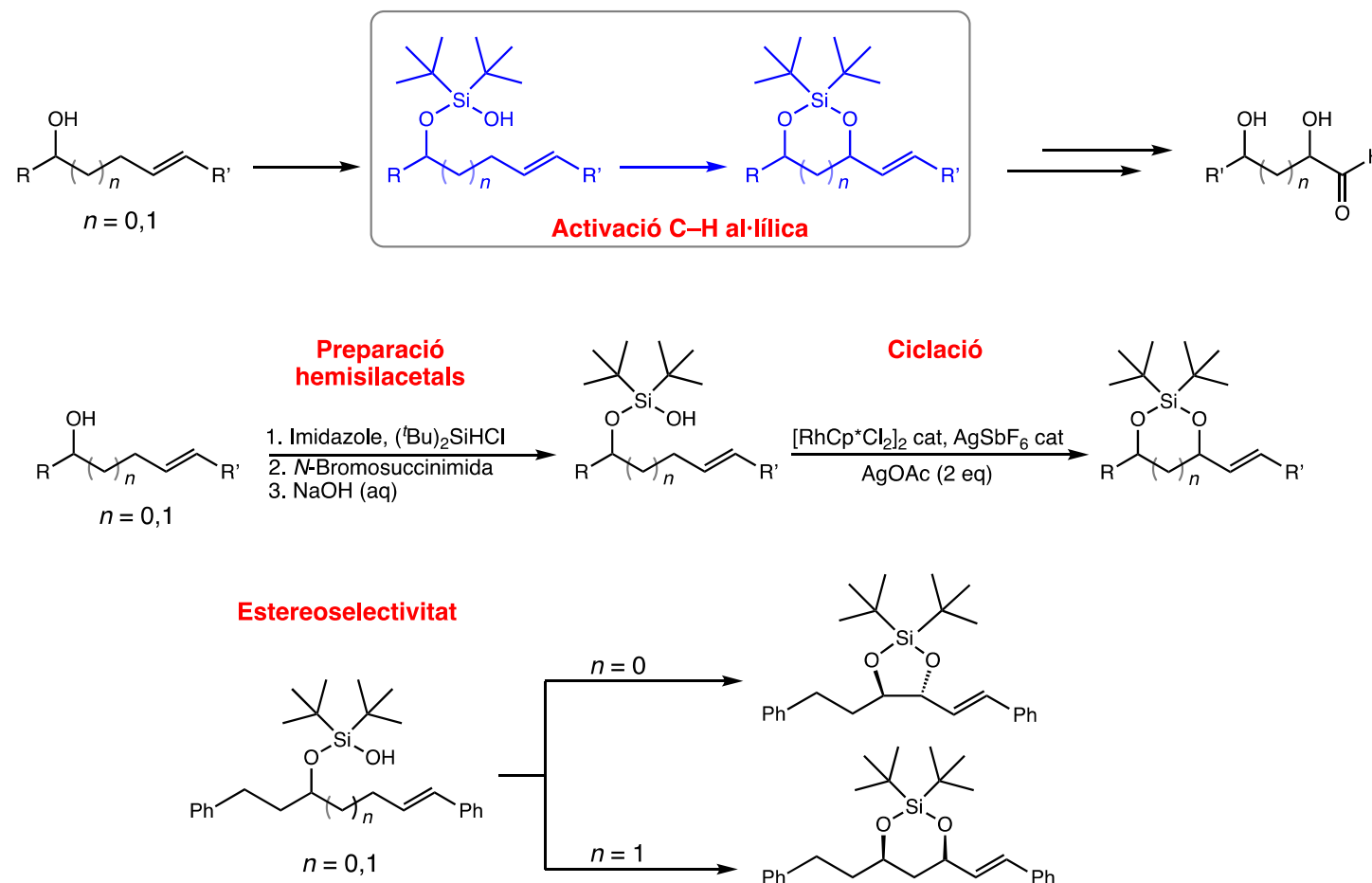
Lluc Vila; Pau Guillamon; Víctor Maestre; Víctor Ruiz; Xavier Ariza; Jordi Garcia

Departament de Química Inorgànica i Orgànica. Secció de Química Orgànica

Els compostos polihidroxilats tenen un paper crucial en sistemes biològics, i són els protagonistes de diverses vies cel·lulars que els atorguen propietats atractives. Per exemple, podem trobar **1,2-diols** als sucres i **1,3-diols** com a subestructures derivades de poliacetats i polipropionats naturals.

En aquest treball proposem un nou mètode de reacció de ciclació d'hemisilacetals mitjançant una reacció d'activació C–H al·lílica que hauria de permetre accedir a subestructures d'1,2-diols i 1,3-diols.

Així, doncs, s'ha obert una nova via estereoselectiva d'accés a *sin*-1,2- i 1,3-diols protegits en forma de silacetals de 5 i 6 baules. Aquesta metodologia es basa en una activació al·lílica amb catàlisi de Rh seguida de l'addició de silanols. L'activació al·lílica no funciona amb olefines terminals, però és possible amb olefines conjugades amb un grup fenil.



Optimització de l'extracció en fase sòlida dispersiva per a l'aïllament d'arsenosucres en algues

Berta Vilarrúbies i Palomeras;¹ Àngels Sahuquillo;¹ Dolores Barrón²

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

² Departament de Nutrició, Ciències de l'Alimentació i Gastronomia. Facultat de Farmàcia i Ciències de l'Alimentació

Comissió de Dinamització Lingüística



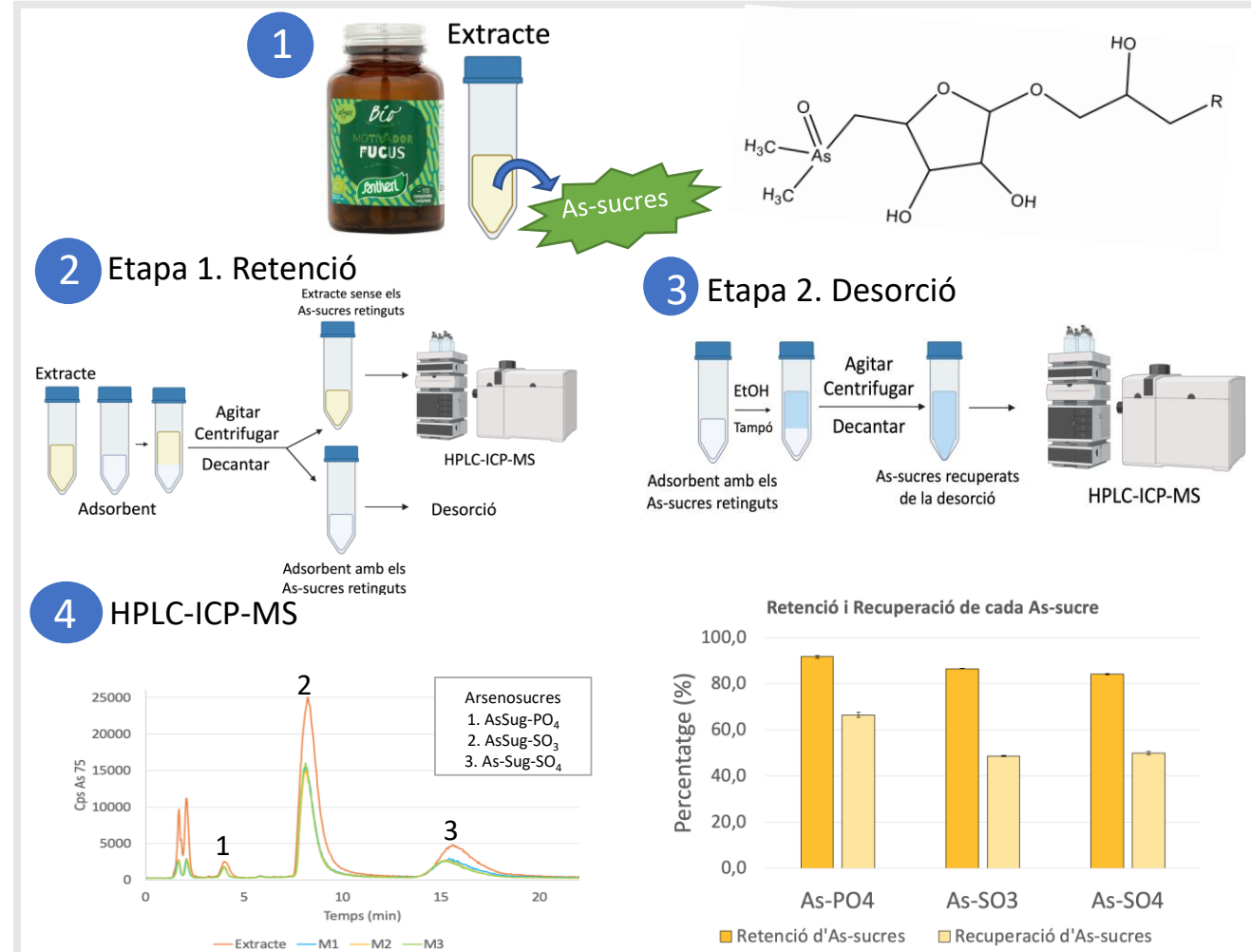
UNIVERSITAT DE
BARCELONA

Facultat de Química



Els arsenosucres són espècies força abundants identificades en algues que s'han de controlar des del punt de vista ambiental i també alimentari. El consum d'algues s'ha anat incrementant per les seves propietats i per la font de nutrients que aporten a l'ésser humà. És per aquest motiu que, atesa la manca d'estàndards comercials, l'aïllament i la caracterització dels arsenosucres han esdevingut de gran interès per a l'estudi de la seva toxicitat.

En aquest treball es van estudiar estratègies per a l'aïllament i la caracterització dels arsenosucres en l'alga *Fucus Vesiculosus* L. mitjançant l'extracció en fase sòlida dispersiva combinada amb la tècnica analítica HPLC-ICP-MS per a l'anàlisi dels compostos d'interès. En aquest projecte, els adsorbents s'utilitzen amb l'objectiu de retenir els arsenosucres i, en una etapa posterior de desorció, obtenir una solució concentrada i purificada d'aquests compostos.



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 2024 del Masterquímica:

- explicació de la formació o procedència d'un terme (*sintó*, *bolaamfífil* i *bolaamfifílic*, *photoswitch*, *aminoxilar*);
- precisions morfològiques per a formes llatines en un text en català (article masculí per al plural de *dolium*: els *dolia*);
- publicació d'entrades noves als vocabularis de l'UBTERM (per exemple, [feltre de carboni](#));
- possible ampliació d'informació a les fitxes del Cercaterm (*quimioteca*, en fase d'estudi).

El Sens Dubte (ub.edu/sens-dubte), el gestor de consultes lingüístiques i terminològiques dels Serveis Lingüístics de la Universitat de Barcelona, conté tota aquesta informació nova. Es pot 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.

CERCADOR



Qualsevol # A B C D E F G H I J K L M N O P Q R S T U V W X Y Z

els dolia o les dolia?

+

caràcter bolaamfílic?

+

sínton o sintó?

+

elastòmers cristall líquids?

+

coformer? [formació de cocristalls]

+

aminoxilar?

+

photoswitch?

+

mesogen?

+

skyrmió?

+

química del clic, química clic, química de clic?

+

Enllaços d'interès

[Multicercadors](#)

UBTERM:

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

[Vocabulari d'enginyeria química](#)

[Vocabulari de química](#)

TERMCAT:

[Cercaterm](#)

[Diccionari de química](#)

MASTERQUÍMICA XIX

Facultat de Química

Jornades de presentació de treballs experimentals de màster
de la Facultat de Química (del 22 al 30 de maig de 2024)

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: setembre de 2024



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

