



MASTERQUÍMICA XVI

Facultat de Química

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

26–31 de maig de 2021

LLIBRE DE RESUMS

Comissió de Dinamització Lingüística



Organització del Masterquímica

Comissió de Dinamització Lingüística
Facultat de Química
Serveis Lingüístics de la Universitat de Barcelona

President

Miquel Vidal Espinar, degà de la Facultat

Presidenta per delegació

Dolors Velasco Castrillo, secretària de la Facultat

Membres de la Comissió de Dinamització Lingüística

Dolors Velasco Castrillo, secretària de la Facultat
Joaquim Crusats Aliguer, representant del professorat de la secció de Química Orgànica
Joan Dosta Parras, representant del professorat de la secció d'Enginyeria Química
Joan Formosa Mitjans, representant del professorat de la secció de Ciència i Enginyeria dels Materials
Elisabet Fuguet Jordà, representant del professorat de la secció de Química Analítica
Arnald Grabulosa Rodríguez, representant del professorat de la secció de Química Inorgànica
Eudald Vilaseca Font, representant del professorat de la secció de Química Física
Manuela Mora Ballester, cap de Secretaria
Núria Castells Quintana, representant dels Serveis Lingüístics de la UB

Amb la col·laboració d'Irene Llamas Cano, becària de la Xarxa de Dinamització Lingüística de la Universitat de Barcelona (curs 2021-21)

Il·lustració de la portada

Mosaic de la rectoria de la Universitat de Lisboa, Portugal

MASTERQUÍMICA XVI

Facultat de Química

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

26–31 de maig de 2021

Comissió de Dinamització Lingüística



Presentació

El Masterquímica va néixer l'any 2005 com a iniciativa de la Comissió de Dinamització Lingüística de la Facultat —que en aquell moment tenia com a president el Dr. Antoni Roca Vallmajor— amb la idea de reconèixer la qualitat del contingut científic i la motivació amb què estan fets els treballs de recerca dels màsters oficials de la Facultat de Química, que són els primers treballs de recerca de molts químics i enginyers novells.

Des de l'inici, doncs, el Masterquímica, a part de representar aquest reconeixement i una via per encoratjar els estudiants a emprendre aquesta mena de projectes, dona a l'alumnat de màster l'ocasió de practicar les seves capacitats de síntesi i de presentació i, alhora, de difondre i fer visible els seus treballs i la seva recerca. Tot això des d'una doble perspectiva, ja que es demana als participants que elaborin un pòster, que s'exposa durant uns dies al vestíbul de la Facultat, i un resum, que publiquem ara en aquest recull.

El Masterquímica, per tant, representa una ocasió interessant de comunicació científica dins de la Facultat, en aquest cas amb el català com a eina de comunicació especialitzada, cosa poc habitual en l'àmbit de la recerca, ja que la llengua de comunicació internacional de la ciència, emprada amb aquesta funció i finalitat, és l'anglès.

Cada disciplina té un llenguatge i unes convencions especials i en aquest sentit es pot dir que en el Masterquímica es posa de manifest una vegada més com el llenguatge de la química s'expressa d'una manera vivaç i amb força, amb tota la terminologia que conté, i dins d'un lloc privilegiat de generació i transmissió de coneixement com és la universitat.

La setzena edició del Masterquímica ha tingut lloc del 26 al 31 de maig de 2021 i, sens dubte, manté i consolida un triple objectiu:

- Científic, perquè mostra l'estat actual de la recerca liderada pels grups de recerca de la Facultat.
- Docent, perquè ensenya i prepara els estudiants de màster en els estàndards reals dels congressos de química, és a dir, en l'elaboració de resums, resums gràfics i pòsters, eines fonamentals de comunicació científica.
- Divulgatiu, perquè, d'una banda, el fet de situar-lo dins els espais de la facultat ajuda a divulgar entre els estudiants dels diferents màsters i de grau les possibilitats de màster que ofereix la Facultat de Química. D'altra banda, perquè com a espai de trobada i d'intercanvi —gràcies al format de congrés que ha anat adoptant— permet compartir el coneixement entre companys de màster, entre alumnes de diferents màsters i entre alumnat i professorat.

Finalment, les jornades del Masterquímica acaben amb tres comunicacions orals, que corresponen als tres pòsters escollits per un jurat que n'ha valorat la capacitat comunicativa, l'estructura pròpia d'un treball de recerca i la qualitat lingüística, de manera que també es treballa la comunicació científica oral davant d'un públic ampli i especialista.

Aquesta és la primera edició en què el llibre de resums pren la qualitat de reconeixement públic ja que, per primera vegada, els resums de totes les contribucions presentades es publiquen en format digital i obert en el Dipòsit Digital de la UB i la publicació disposa d'un identificador digital per poder referenciar-la en el currículum o en futurs treballs de recerca.

Amb l'organització de les activitats anuals que té programades, la Comissió de Dinamització Lingüística de la Facultat de Química es referma en la idea de contribuir amb iniciatives com el Masterquímica en la construcció d'un espai de comunicació científica en català de qualitat.

Volem aprofitar aquesta ocasió per agrair la participació i implicació al llarg d'aquests setze anys de tots els estudiants de màster, del professorat i de l'equip deganal de la Facultat, que, amb el suport del Vicerectorat de Política Lingüística, han fet possible que el Masterquímica s'hagi consolidat a la Facultat

de Química de la Universitat de Barcelona com una activitat acadèmica d'un interès científic i docent indubtable, i amb el català com a llengua d'expressió científica, cosa que any rere any ens permet adonar-nos que, com va escriure el doctor Enric Casassas en alguna ocasió, «el llenguatge científic és tan viu com la ciència que s'hi vehicula».

Comissió de Dinamització Lingüística
Facultat de Química

ÍNDEX

Iker Alburquerque-Álvarez; Anna de Juan <i>Imatge de fluorescència 3D i 4D aplicada a l'estudi de teixits vegetals</i>	1	Javier Eusamio; Arnald Grabulosa <i>Complexos de rodi amb difosfines P-estereogèniques amb pont de metilè</i>	5	Laura Llarch Jiménez; Sergi Astals García; Josep M. Chimenos Ribera <i>Tecnologies i oportunitats per a la recuperació del fòsfor mitjançant precipitació de struvita a les EDAR</i>	9
Marcos Álvarez Crespo; Júlia Riba Solé; Patrick Gámez; Ernesto Nicolas Galindo <i>Estudi preliminar d'un derivat de 2-aminopiridina com a precursor de lligands termolàbils</i>	2	Oscar Gutiérrez; Juan Bautista Blanco <i>Optimització sintètica de la proteïna Sonic hedgehog (ShhN)</i>	6	Judit Lloreda Rodes; Alberto Cruz Alcalde; Carme Sans Mazón <i>Fotodegradació dels pesticides organofosforats: generació de radicals en el medi aquàtic</i>	10
Eduard Balaguer-Garcia; Marina Pérez-Palau; Pedro Romea i Fèlix Urpí <i>Síntesi total de la umuravumbolida</i>	3	Nereira Gutiérrez-Pérez; H. Bagán; A. Tarancón; J. F. García <i>Estudi sobre l'efecte de la porositat en l'anàlisi de radionúclids mitjançant escintil·ladors plàstics en forma de microesferes</i>	7	Anna López; Estela Giménez; Fernando Benavente; Victoria Sanz <i>Anàlisi de glicopèptids per PBA-SPE-CE-MS</i>	11
Mireia Belil; Xavier Just-Baringo; Antoni Riera <i>Noves eines en química biològica. Síntesi de piridil bromo tetrazines</i>	4	Anna de Juan Cavaller; Jordi García; Marc Reina <i>Síntesi i caracterització de nous derivats de la crisina dissenyats com a potencials fàrmacs per al tractament de l'obesitat</i>	8	Víctor Maestre Martín; Xavier Ariza Piquer; Jordi García <i>Formació d'acetals i silacetals mitjançant processos d'activació C—H</i>	12

<p>Maria Malé Iscla; Elisabet Fuguet Jordà; Clara Ràfols Llach <i>Determinació de constants d'acidesa de fàrmacs en fluids intestinals simulats</i></p>	13	<p>Alex Camilo Quintero; Sergi Vinardell; Joan Mata-Álvarez; Sergi Astals; Joan Dosta <i>Revisió bibliogràfica de reactors biològics anaeròbics de membrana per al tractament d'aigües residuals salines</i></p>	17	<p>Andreu Serra-Toro; S. Astals; S. Madurga; J. Mata-Álvarez; F. Mas; J. Dosta <i>Estudi de la recuperació de nitrogen de purins mitjançant membranes selectives</i></p>	21
<p>Alba Morales Rodríguez; José Fermín López Sánchez; Cristina Minguillón Llombart <i>Obtenció d'arsenosucres d'algues mitjançant tècniques cromatogràfiques preparatives</i></p>	14	<p>Elias A. Romero-Cavagnaro; Miguel Mellado-Hidalgo; Pedro Romea i Fèlix Urpí <i>Reaccions directes i enantioselectives de N-propanoïl-1,3-oxazinan-2-tiona amb acetals dialquílics catalitzades per complexos quirals de Ni(II)</i></p>	18	<p>Dídac Serraïma; H. Bagán; A. Tarancón; J. F. García <i>Anàlisi de fòsfor total en aigües. Desenvolupament d'un sistema d'anàlisi en continu i sense reactius</i></p>	22
<p>Emma Peregrín García; Paul Lloyd-Williams; Jordi García <i>Síntesi de lligands per a la complexació amb ions metàl·lics amb aplicació com a dispositius moleculars</i></p>	15	<p>Jordi Rotger; Joana Tent; Hèctor Bagán; Anna Rigol; Alex Tarancón <i>Determinació de ²¹⁰Po en aigua de consum: desenvolupament i comparativa de mètodes</i></p>	19	<p>Alba Sors-Vendrell; Ciril Jimeno Mollet; Jordi Solà Oller <i>Un potent catalitzador supramolecular per a reaccions aldòliques asimètriques</i></p>	23
<p>Jon E. Quinlivan Domínguez; Konstantin M. Neyman; Albert Bruix <i>Predicció de l'estructura i l'estat d'oxidació de catalitzadors exposats a condicions de reacció</i></p>	16	<p>Albert Ruiz; Sergi Ordeix, Núria Llor; Mercedes Amat <i>Cap a la síntesi total enantioselectiva de la (+)-eburnamonina</i></p>	20	<p>Paula Villasclaras Calvo; Romà Tauler Ferré; Carmen Bedia Girbés <i>Estudi dels efectes de la matèria particulada de l'aire en cultius cel·lulars pulmonars</i></p>	24

Imatgeria de fluorescència 3D i 4D aplicada a l'estudi de teixits vegetals

Iker Alburquerque-Álvarez; Anna de Juan

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

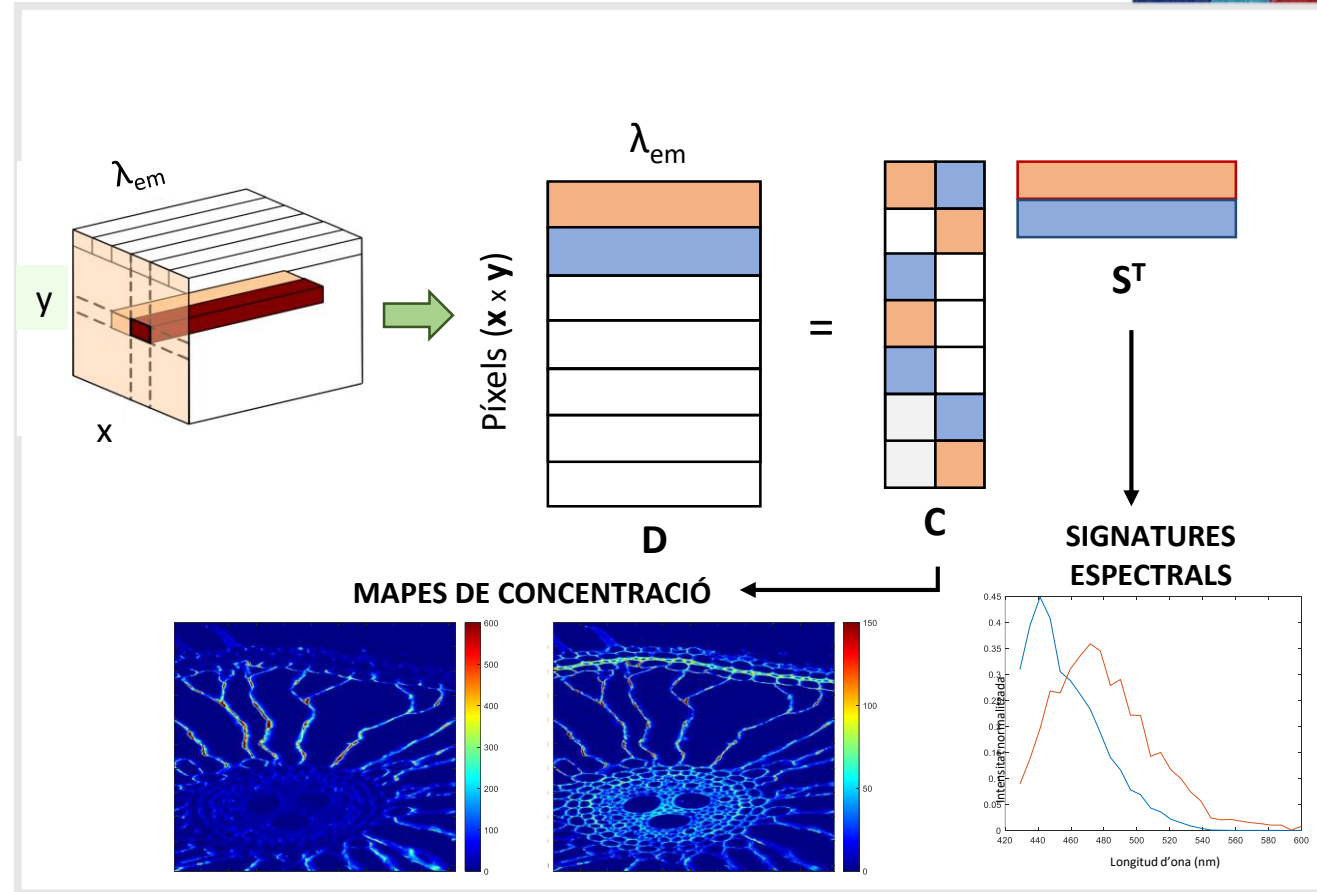


01

Les imatges hiperespectrals són una tècnica analítica molt interessant per obtenir informació espacial i espectral en una gran varietat de mostres. En aquest cas, la imatgeria de fluorescència 3D i 4D s'usa per estudiar seccions molt fines de l'arrel de la planta d'arròs (*Oryza sativa*) a fi d'obtenir informació estructural i química dels seus components [1].

Les imatges hiperespectrals 3D s'obtenen recollint tot l'espectre d'emissió a una longitud d'ona d'excitació fixada de cada píxel de la superfície de la mostra, mentre que en el cas de les imatges 4D, una mesura 2D d'excitació-emissió està associada a cada píxel de la imatge, cosa que afegeix una dimensió més al conjunt de dades.

S'utilitzen eines quimiomètriques per a la interpretació d'aquestes imatges, en aquest cas l'algoritme MCR-ALS (*multivariate curve resolution – alternating least squares*) [2], que permetrà obtenir les signatures espectrals i els mapes de distribució dels components de la mostra.



Referències

[1] A. Gómez-Sánchez, M. Marro, M. Marsal, *Anal. Chem.*, **2020**, *92*, 9591-9602.

[2] S. Piqueras, L. Duponchel, R. Tauler, A. de Juan, *Anal. Chim. Acta*, **2011**, *705*, 182-192.



Estudi preliminar d'un derivat de 2-aminopiridina com a precursor de lligands termolàbils

Marcos Álvarez Crespo; Júlia Riba Solé; Patrick Gámez; Ernesto Nicolas Galindo

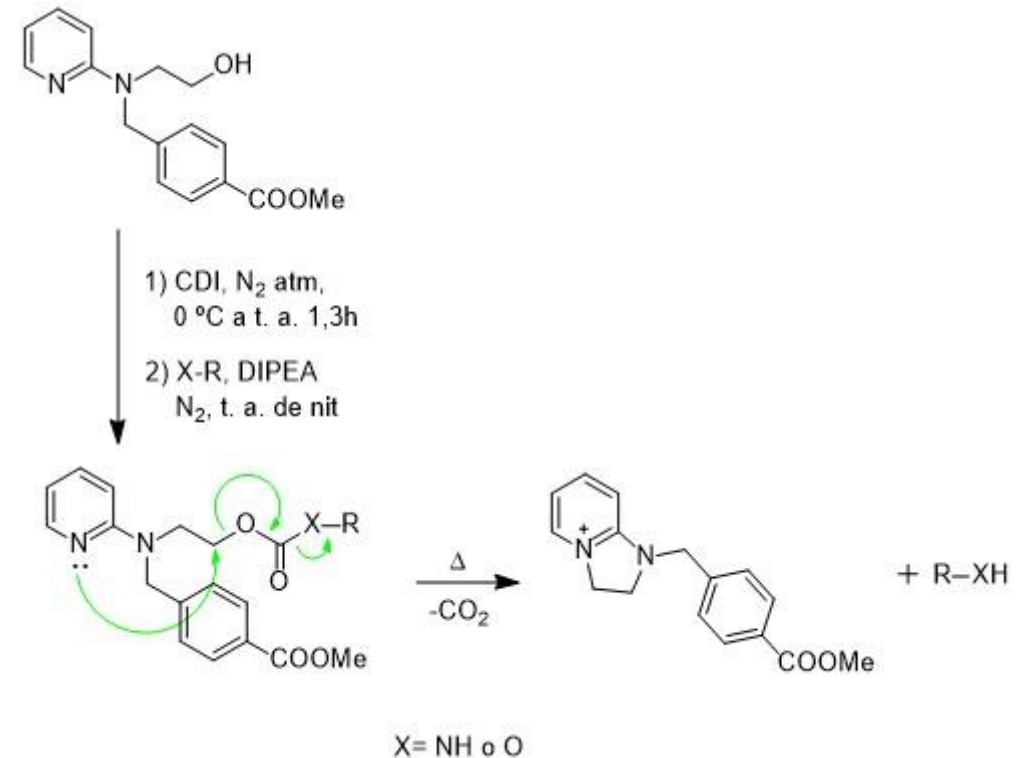
Departament de Química Inorgànica i Orgànica. Secció de Química Orgànica

02

La manca de selectivitat dels medicaments actualment disponibles en el mercat és el principal problema en malalties no transmissibles com el càncer o l'Alzheimer. Per aquest motiu el desenvolupament d'un sistema que permeti l'alliberament de fàrmacs de forma controlada és indispensable per assolir aquest objectiu.

En aquest sentit, les nanopartícules superparamagnètiques (Fe_3O_4 o $\gamma\text{-Fe}_2\text{O}_3$) han esdevingut sistemes prometedors pel fet d'alliberar calor en aplicar-hi un camp magnètic extern. Aquest comportament es podria aprofitar per alliberar un fàrmac a voluntat si està unit a la nanopartícula amb un lligand termolàbil.

El present treball s'ha desenvolupat en el marc d'una col·laboració amb el Grup de Recerca de Química Bioinorgànica de la Facultat de Química, liderat pel Dr. Patrick Gámez. Concretament, s'ha portat a terme un estudi preliminar sobre el derivat piridínic que es mostra en el resum gràfic com a precursor de carbamats i carbonats potencialment termolàbils.



Referències

- [1] L. H. Reddy, J. L. Arias, J. Nicolas, P. Couvreur, *Chem. Rev.*, **2012**, *112*, 5818–5878.
 [2] M. K. Chmielewski, E. Tykarska, W. Markiewicz, *New J. Chem.*, **2012**, *36*, 603–612.



Síntesi total de la umuravumbolida

Eduard Balaguer-Garcia; Marina Pérez-Palau; Pedro Romea i Fèlix Urpí

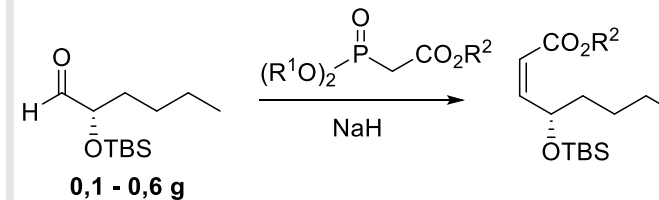
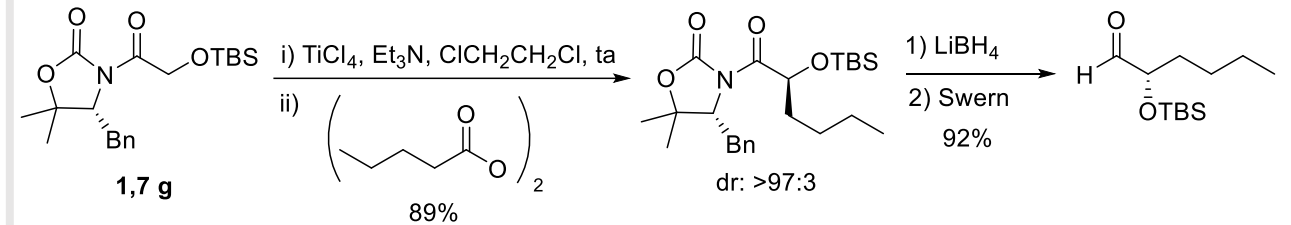
Departament de Química Inorgànica i Orgànica. Secció de Química Orgànica

La umuravumbolida és una lactona insaturada que s'extreu de les fulles de la *Tetradenia riparia*, una planta original de Rwanda que s'utilitza per al tractament de la malària i que mostra una potent activitat anticancerígena [1]. A causa de les seves propietats farmacològiques, l'interès a sintetitzar aquesta molècula ha anat en augment al llarg de l'última dècada.

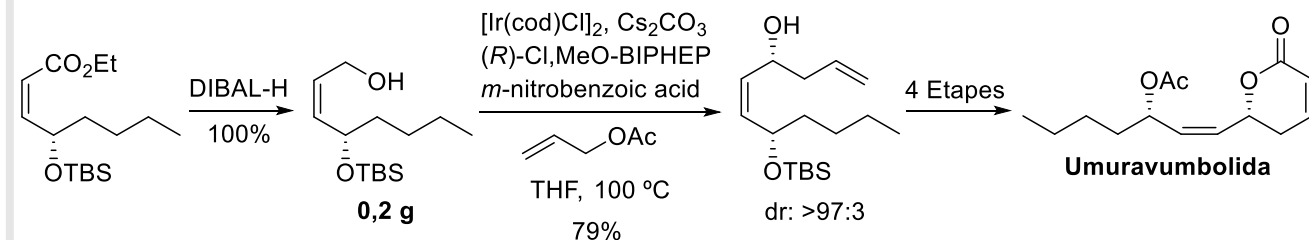
L'objectiu d'aquest grup és dissenyar una aproximació sintètica estereoselectiva a la umuravumbolida, apta per treballar a escala multigram, tot minimitzant el nombre de purificacions cromatogràfiques.

Concretament, en aquest treball es volen aconseguir els objectius següents:

- Escalar l'etapa d'alquilació desenvolupada en el nostre grup [2].
- Construir estereoselectivament l'olefina Z.
- Dur a terme l'al·lilació de Krische a escala multigram.



R ¹	R ²	Temp	dr (Z:E)	rdt (%)
CH ₂ CF ₃	Et	-60 °C	87:13	77
Ph	Me	-78 °C	96:4	79
Ph	Et	-78 °C	96:4	81



Referències

- [1] G. Sabitha, D. V. Reddy, S. S. S. Reddy, J. S. Yadav *et al.*, *RSC Adv.*, **2012**, 2, 7241–7247.
 [2] A. Gómez-Palomino, M. Pérez-Palau, P. Romea, F. Urpí *et al.*, *Org. Lett.*, **2020**, 22, 199–203.



Noves eines en química biològica. Síntesi de piridil bromo tetrazines

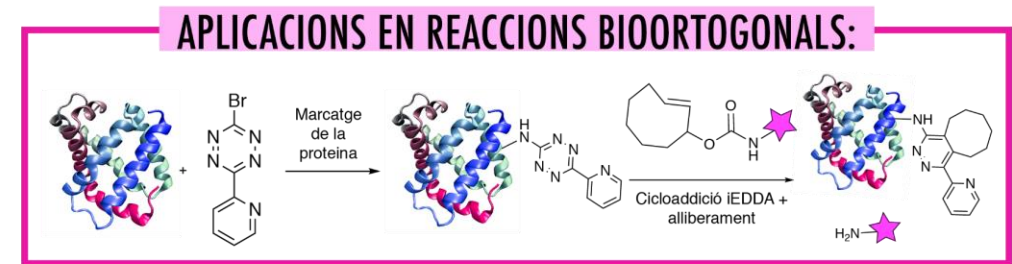
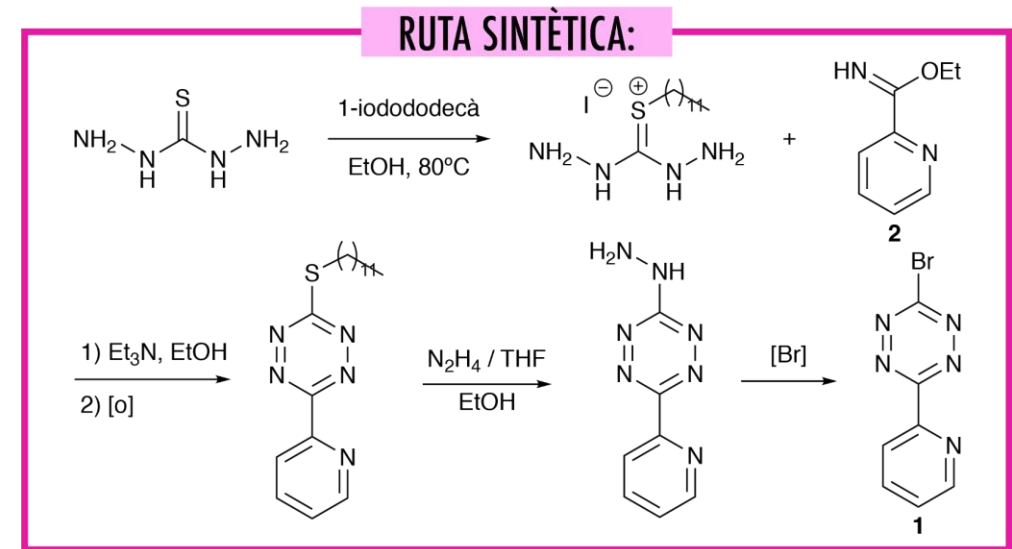
Mireia Belil;¹ Xavier Just-Baringo;² Antoni Riera¹

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

² Departament de Farmacologia, Toxicologia i Química Terapèutica. Facultat de Farmàcia i Ciències de l'Alimentació

04

Les reaccions bioortogonals són aquelles que tenen lloc en medis biològics de forma selectiva. Entre les més ràpides i eficients es troba la cicloadició de Diels-Alder amb demanda electrònica inversa (iEDDA) entre un anell de tetrazina i un alquè o alquí en tensió. Desenvolupar reactius que permetin incorporar fragments de tetrazina a biomolècules és, per tant, objecte de gran interès. En el present treball hem desenvolupat un nou reactiu, la 3-bromo-6-(piridin-2-il)-1,2,4,5-tetrazina (**1**), que creiem que pot resultar molt reactiva davant de nucleòfils i en reaccions bioortogonals. La síntesi es fonamenta en la desenvolupada prèviament en el grup de treball per E. Ros per a la preparació de la 3-bromo-1,2,4,5-tetrazina [1]. No obstant això, s'hi han hagut d'introduir diverses modificacions. Hem hagut de modificar el reactiu de la bromació i hem trobat que els imidats (**2**) poden ser millors precursors que els ortoèsters emprats prèviament, cosa que obre una nova porta en la síntesi de tetrazines.



Referències

[1] E. Ros, M. Bellido, X. Verdaguer, L. Ribas de Pouplana, A. Riera. *Bioconjugate Chem.*, **2020**, *31*, 933-938.



Complexos de rodi amb difosfines *P*-estereogèniques amb pont de metilè

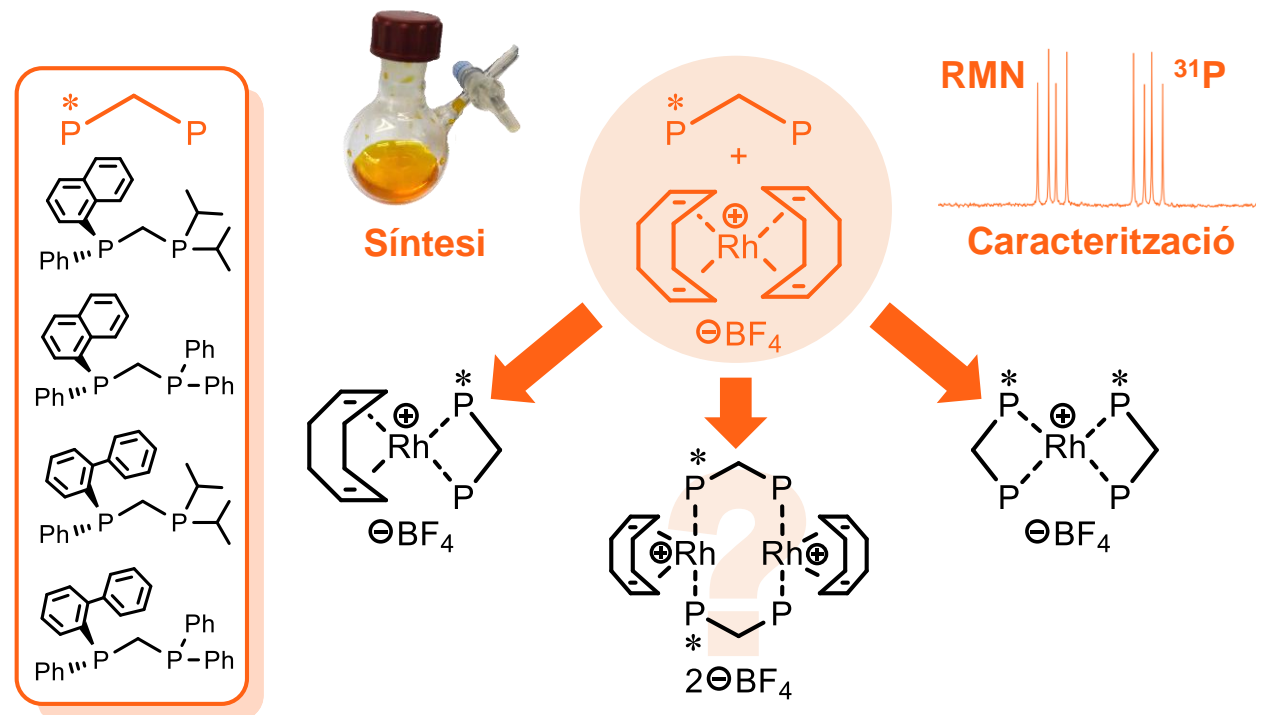
Javier Eusamio; Arnald Grabulosa

Departament de Química Inorgànica i Orgànica. Secció de Química Inorgànica

Des que el 1964 Wilkinson va obtenir el seu famós catalitzador, $[\text{RhCl}(\text{PPh}_3)_3]$, les fosfines han estat els lligands més importants en catàlisi homogènia [1]. Per altra banda, l'estabilitat configuracional del fòsfor ha permès la síntesi de fosfines *P*-estereogèniques òpticament pures, les quals, coordinades a centres metàl·lics, han donat lloc a catalitzadors enantioselectius molt eficients. En aquest context, destaquen els complexos de rodi(I) amb difosfines quirals, que són catalitzadors excel·lents per a la hidrogenació d'olefines funcionalitzades [2].

Recentment, el grup de Catàlisi Homogènia ha desenvolupat un nou tipus de difosfines *P*-estereogèniques amb un pont de metilè i n'ha estudiat la coordinació a pal·ladi(II) [3].

En aquesta contribució es descriu la coordinació d'aquestes difosfines a rodi(I). S'ha observat que és possible obtenir i aïllar sistemes monoquelats i bisquelats. A més, experiments d'RMN han permès descartar la formació d'espècies on la fosfina actua de pont entre dos àtoms metàl·lics.



Referències

- [1] J. G. de Vries, C. J. Elsevier, *Handbook of Homogeneous Hydrogenation*. Wiley-VCH: Weinheim, 2007.
- [2] A. Grabulosa, *P-Stereogenic Ligands in Enantioselective Catalysis*. Royal Society of Chemistry: Cambridge, 2011.
- [3] J. C. Córdoba, A. Vidal-Ferran, M. Font-Bardia, A. Grabulosa, *Organometallics*, **2020**, *39*, 2511-2525.



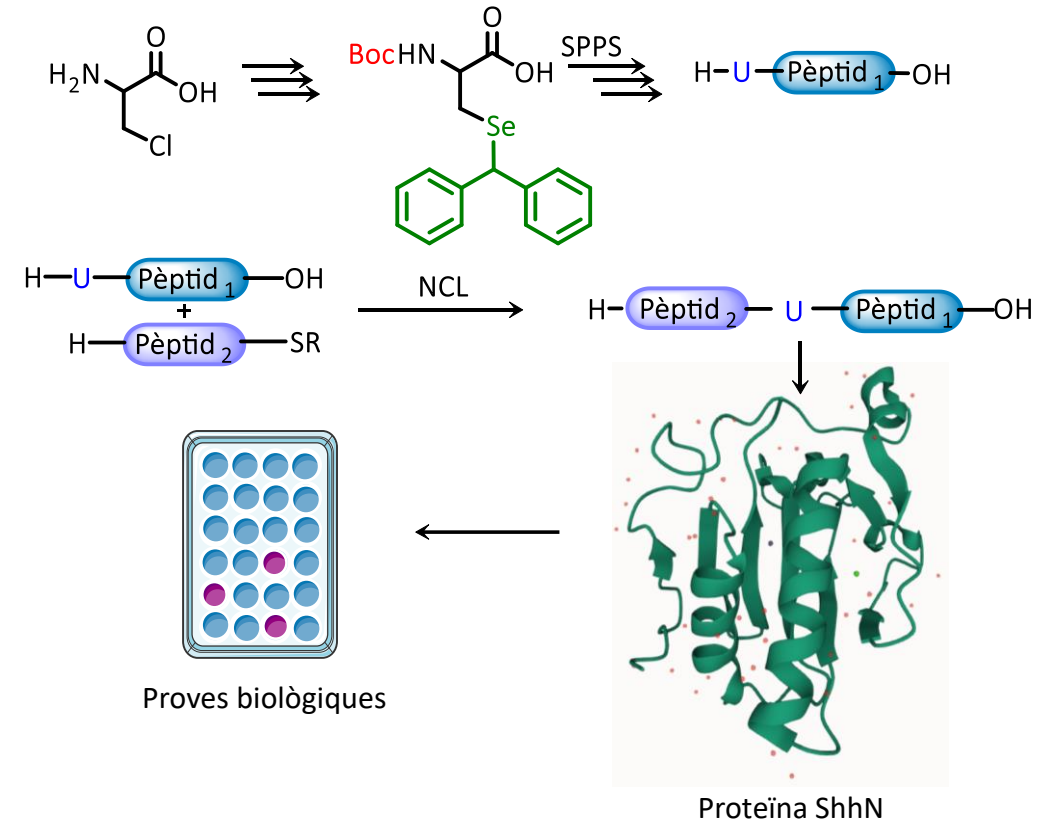
Optimització sintètica de la proteïna Sonic hedgehog (ShhN)

Oscar Gutiérrez;^{1,2} Juan Bautista Blanco¹

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

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

Els estudis que s'han fet en el camp de les rutes de senyalització cel·lular demostren la influència de la proteïna Sonic hedgehog (ShhN) en malalties com el càncer. Amb l'objectiu de desenvolupar estratègies que en permetin evitar el creixement de tumors, és necessari poder sintetitzar aquesta proteïna, que conté una molècula de colesterol en l'extrem C-terminal. El meu TFM tracta diferents aspectes de la síntesi química de ShhN, com és l'ús de l'aminoàcid no canònic selenocisteïna (Secys) en la reacció de lligació química nativa (NCL), més reactiu que el seu anàleg cisteïna. La NCL permet unir diferents fragments peptídics. Per aquest motiu serà important l'optimització del mètode de preparació del compost. A més, s'estudiarà l'ús de les molècules detergents que faciliten la solubilitat del colesterol en el medi de la reacció i, per tant, permeten la reacció de NCL que conté el fragment.





Estudi sobre l'efecte de la porositat en l'anàlisi de radionúclids mitjançant escintil·ladors plàstics en forma de microesferes

Nereida Gutiérrez-Pérez; A. Tarancón; J. F. Garcia; H. Bagán

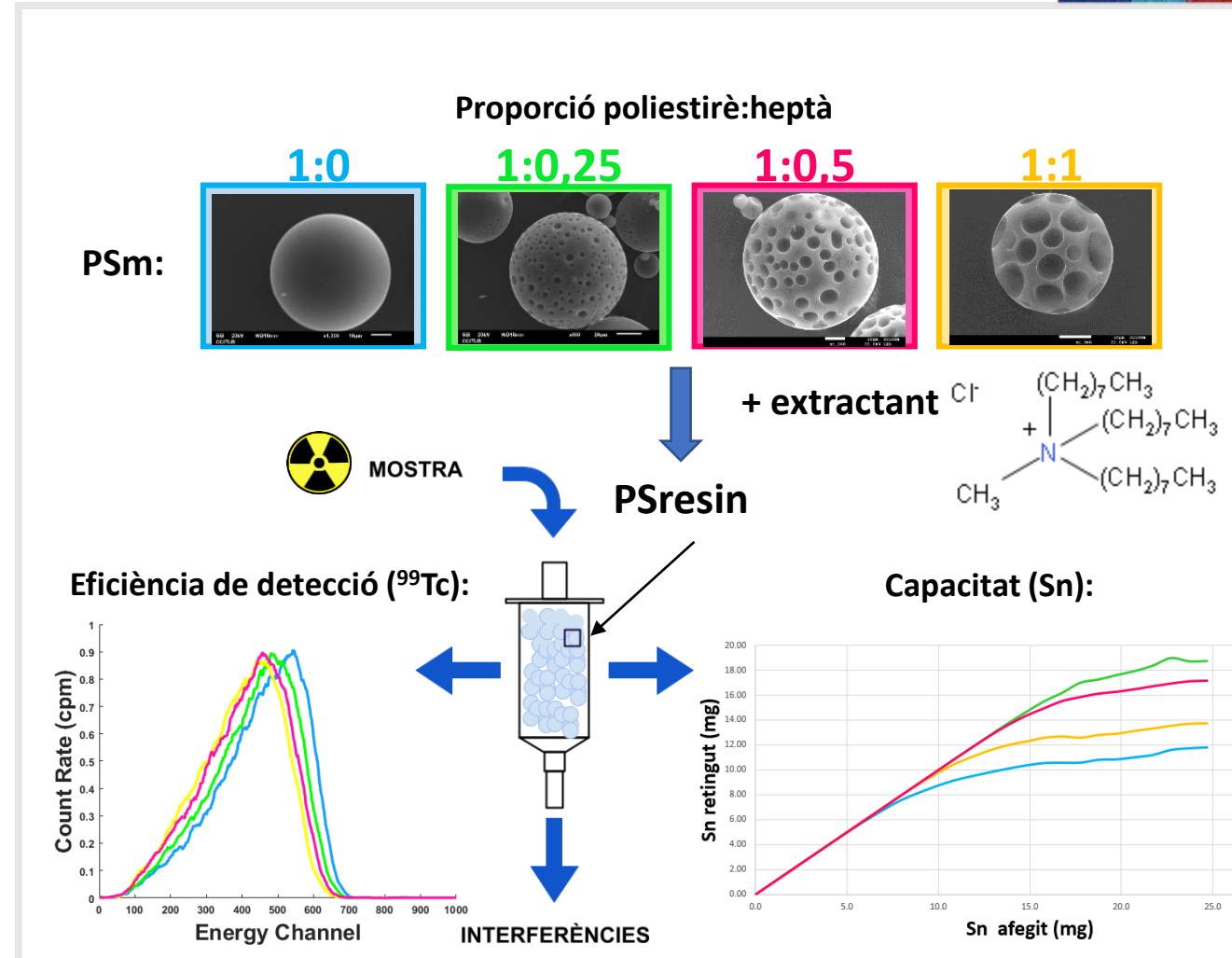
Departament d'Enginyeria Química i Química Analítica. Secció de Química Analítica

07

El seguiment de radionúclids en el medi és necessari per monitoritzar l'abocament controlat de material radioactiu, per part d'hospitals i indústries nuclears entre d'altres, o la detecció de fuites o actes il·lícits o il·legals.

Un dels mètodes de detecció emprats és mitjançant microesferes d'escintil·lació plàstica (PSm) sintetitzades pel mètode d'evaporació-extracció. Aquestes PSm recobertes per un extractant (PSresin) es col·loquen en una columna per on es passa la mostra i això permet separar els radionúclids de la matriu i poder mesurar la seva activitat directament des de la columna.

En aquest estudi, s'han desenvolupat PSresins a partir de PSm poroses (mitjançant l'addició d'heptà com a porogen), que fins ara han estat llises, i s'ha observat com la porositat no afecta l'eficiència de detecció, però, en canvi, fa augmentar la capacitat màxima de retenció d'aquests radionúclids pel fet d'haver augmentat la seva superfície.





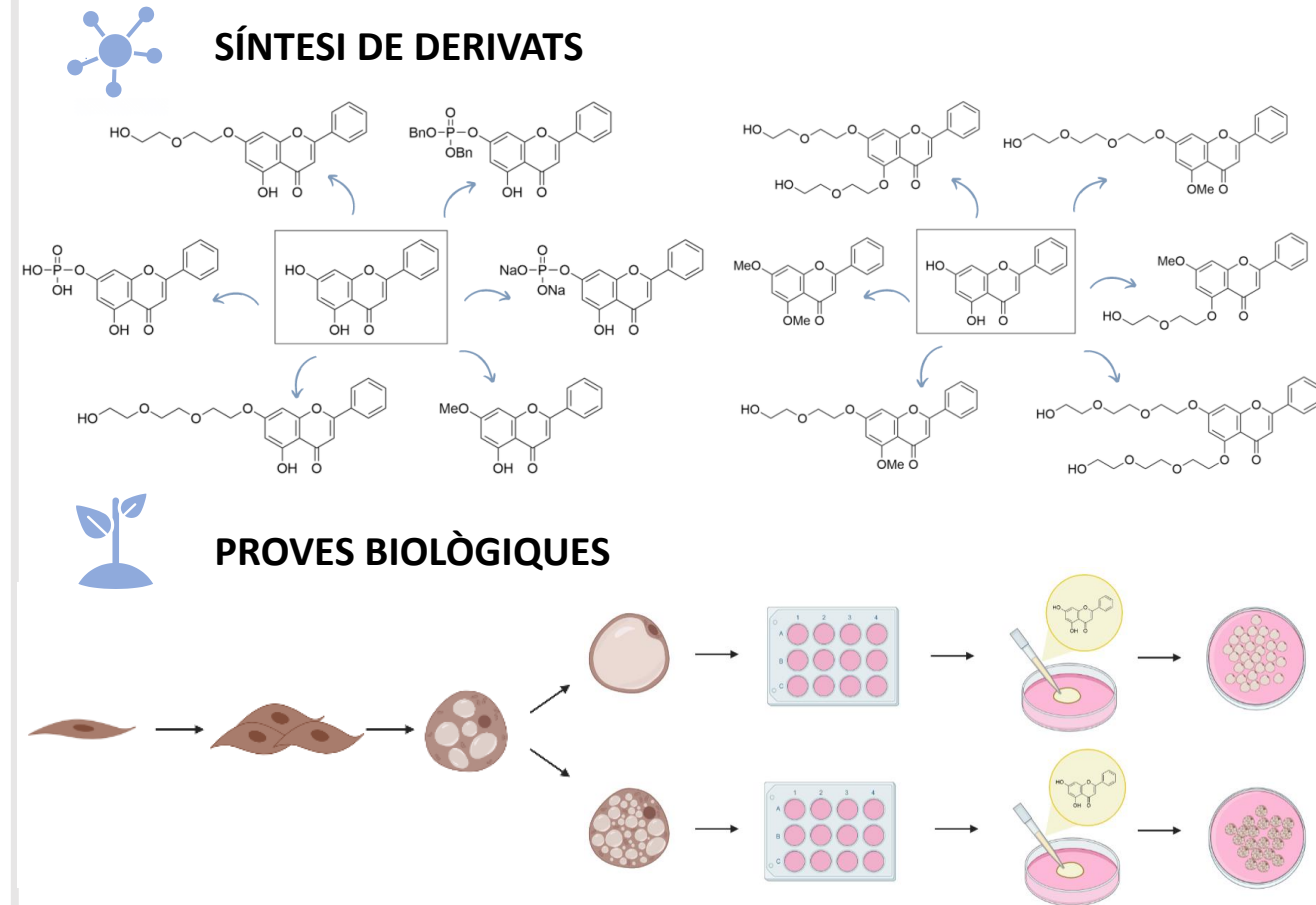
Síntesi i caracterització de nous derivats de la crisina dissenyats com a potencials fàrmacs per al tractament de l'obesitat

Anna de Juan Cavaller; Jordi García; Marc Reina

Departament de Química Inorgànica i Orgànica. Secció de Química Orgànica

08

En les darreres dècades l'obesitat i el sobrepès s'han convertit, a causa del gran impacte que tenen en els països desenvolupats, en un problema mundial. Arreu del món grups d'investigació busquen nous medicaments per combatre-les. Recentment, els flavonoides s'han convertit en un tema popular, perquè tenen activitat terapèutica en diversos camps, com ara activitat antiinflamatòria, anticarcinògena o antibacteriana, entre d'altres. A més a més, s'ha demostrat que un flavonoide en concret, la crisina, activa el metabolisme lipídic i promou els fenotips de teixit adipós marró en adipòcits blancs, transformant-los en adipòcits beix. Aquesta característica pot ser explotada per produir un nou medicament per tractar l'obesitat i el sobrepès; tanmateix, la baixa biodisponibilitat deguda a la poca solubilitat dels flavonoides es presenta com un obstacle. Aquest treball pretén sintetitzar derivats de la crisina que n'augmentin la solubilitat i estudiar el seu efecte in vitro en cultius de teixit adipós de cèl·lules 3T3-L1.



Tecnologies i oportunitats per a la recuperació del fòsfor mitjançant precipitació de struvita a les EDAR



Laura Llarch Jiménez; Sergi Astals García;¹ Josep M. Chimenos Ribera²

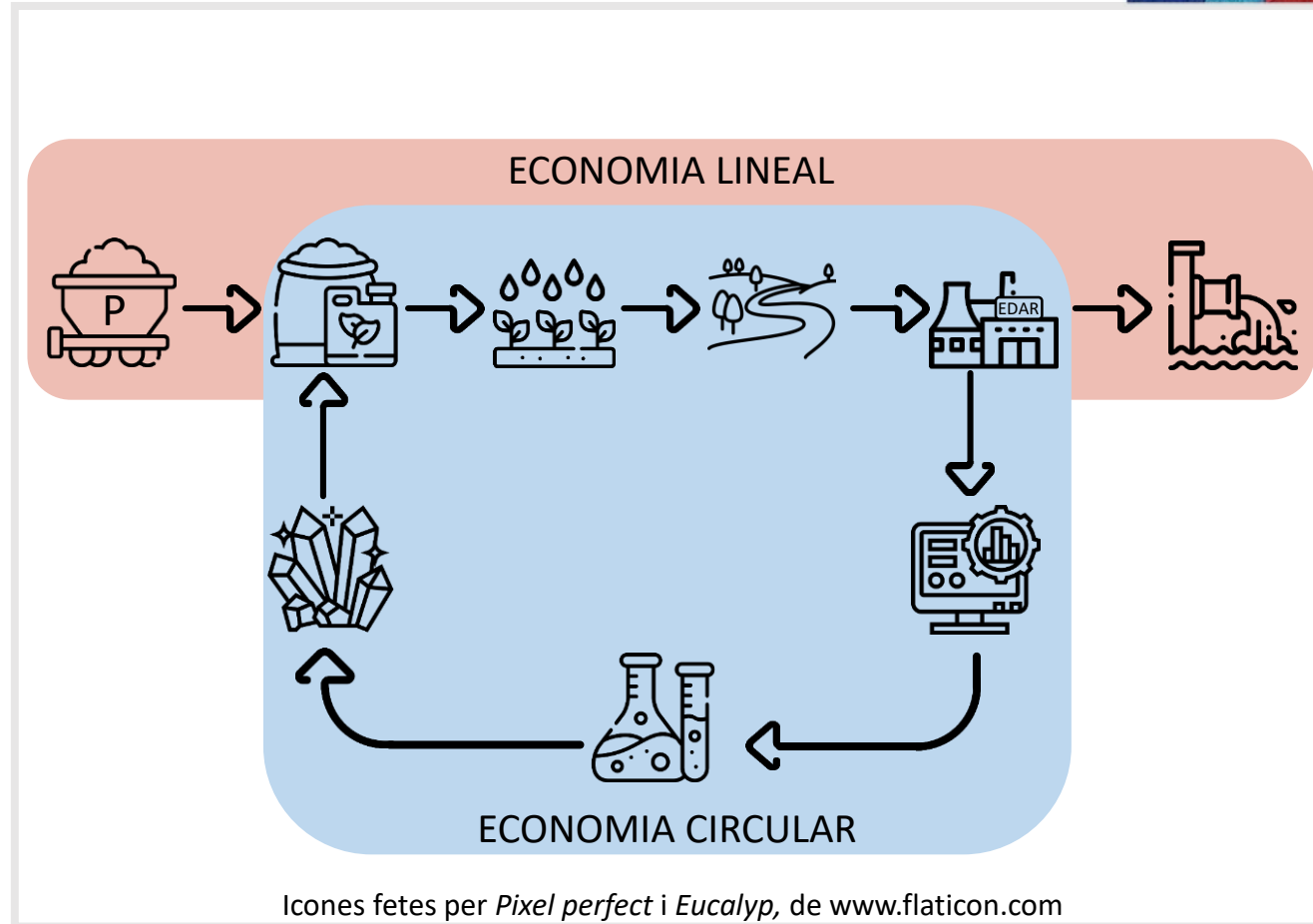
¹ Departament d'Enginyeria Química i Química Analítica. Secció d'Enginyeria Química

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

Es preveu que les reserves de fòsfor s'esgotin en 400 anys. Això és degut a l'extracció que se'n fa per crear fertilitzants i al fet que una gran part d'aquests s'acaben malgastant i perden. Aquest fòsfor acaba al mar, però es pot recuperar en forma de struvita ($\text{MgNH}_4\text{PO}_4 \cdot 6\text{H}_2\text{O}$), un mineral que funciona com a fertilitzant d'alliberació lenta que aporta fòsfor al sòl, així com magnesi i amoni.

Les condicions necessàries per cristal·litzar struvita a les estacions depuradores d'aigües residuals (EDAR) s'han obtingut mitjançant eines de modelatge. S'ha trobat que és necessari un pH bàsic i unes concentracions de fòsfor, magnesi i amoni en una proporció molar 1:1:1. Altres elements, com ara el calci, l'alumini i el ferro, n'inhibeixen la formació i s'han d'evitar.

Recuperar el fòsfor a les EDAR és un projecte d'economia circular. Evita que es perdi, disminueix la necessitat de minar i tanca el cicle, de manera que valoritza el que avui es considera residu.



Icones fetes per *Pixel perfect* i *Eucalyp*, de www.flaticon.com

Fotodegradació dels pesticides organofosforats: generació de radicals en el medi aquàtic



Judit Lloreda Rodes;¹ Alberto Cruz Alcalde;² Carme Sans Mazón¹

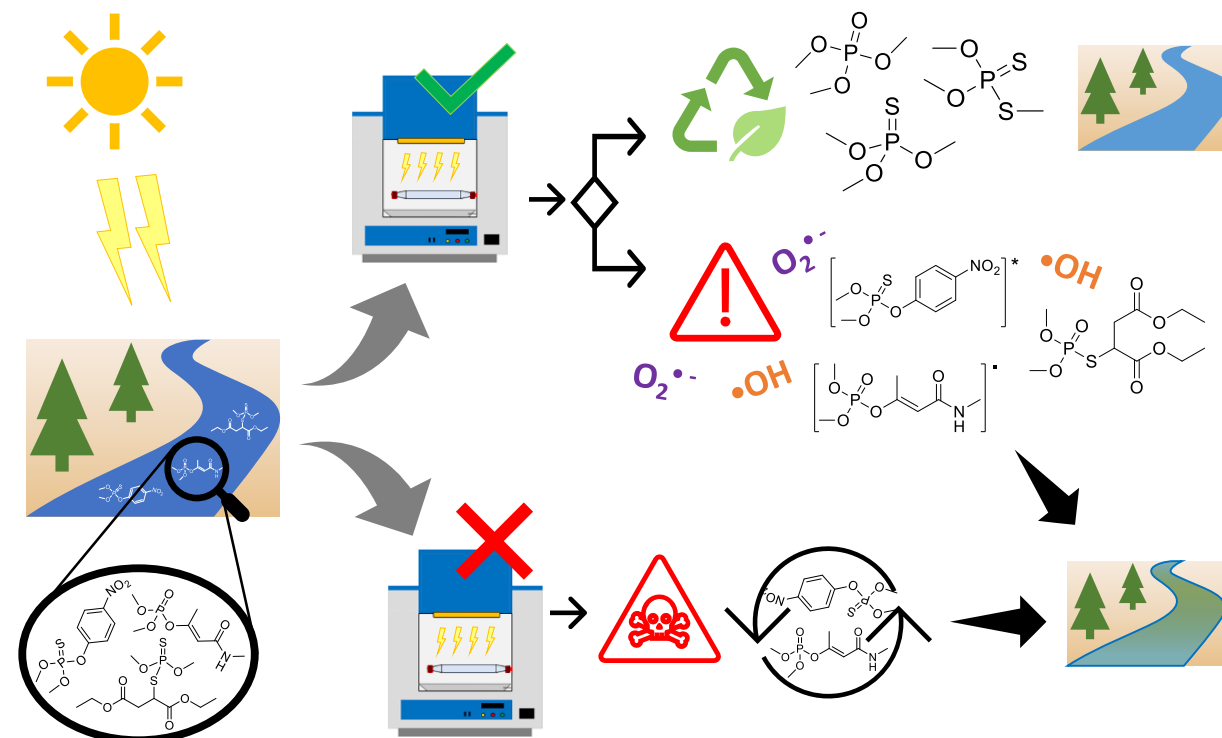
¹ Departament d'Enginyeria Química i Química Analítica. Secció d'Enginyeria Química

² Institut de Diagnòstic Ambiental i Estudis de l'Aigua, IDAEA-CSIC

La presència de pesticides organofosforats en aigües naturals suposa un perjudici per a l'ecosistema aquàtic, on l'acumulació n'és el principal problema. D'altra banda, l'exposició continuada a la radiació solar pot desencadenar processos fotoquímics [1], els quals poden generar radicals.

La fotodegradació natural del malation, el paration-metil i el monocrotofòs ha estat avaluada en un simulador solar, sota diferents condicions experimentals. S'han fet simulacions amb i sense segrestants de radicals per confirmar o descartar la seva implicació en el procés.

Els resultats indiquen que dos dels pesticides no es degraden per efecte de la radiació solar. D'altra banda, confirmen la implicació d'espècies radicalàries, com ara l'hidroxil i l'anió superòxid, en el mecanisme de fotodegradació del malation. Certament, la via radicalària, gens selectiva, també pot resultar perjudicial per al medi aquàtic.



Referències

[1] N. Bustos, A. Cruz-Alcalde, A. Iriel, A. Fernández Cirelli, C. Sans, *Sci. Total Environ.*, **2019**, *649*, 592-600.



Anàlisi de glicopèptids per PBA-SPE-CE-MS

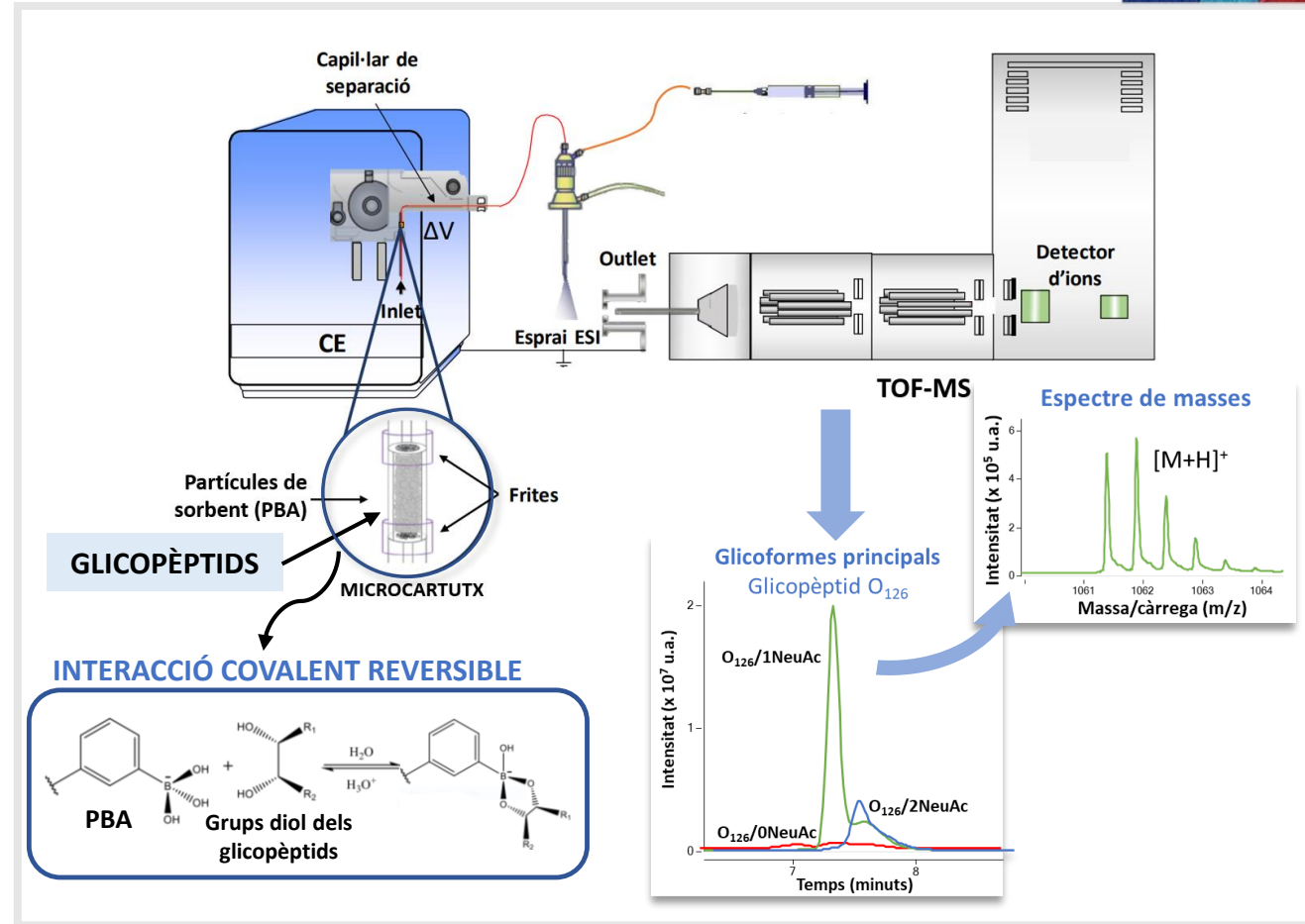
Anna López; Estela Giménez; Fernando Benavente; Victoria Sanz

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

11

En aquest estudi es descriu un mètode d'extracció en fase sòlida acoblada en línia a l'electroforesi capil·lar i l'espectrometria de masses (SPE-CE-MS), utilitzant un sorbent d'àcid fenilborònic (PBA) per aconseguir la purificació i preconcentració selectiva dels glicopèptids d'eritropoetina humana recombinant (rhEPO) obtinguts com a resultat d'una digestió enzimàtica amb tripsina. En la metodologia PBA-SPE-CE-MS, a l'entrada del capil·lar de separació s'integra un microcartutx empaquetat amb partícules de sorbent. Així, s'aconsegueix la retenció dels glicopèptids i la separació i detecció de les seves glicoformes pel sistema CE-MS. Per optimitzar la metodologia s'han escollit els glicopèptids O_{126} i N_{83} de la rhEPO amb l'objectiu d'augmentar la sensibilitat del mètode i minimitzar la retenció no específica dels pèptids de la digestió.

Finalment, per tal de millorar la detecció dels glicopèptids N_{24} i N_{38} i la caracterització de diferents biofàrmacs de rhEPO, el mètode optimitzat s'ha aplicat a l'anàlisi dels glicopèptids obtinguts en digestions amb diferents enzims proteolítics.



Referències

- [1] L. Pont, R. Pero-Gascón, E. Giménez, V. Sanz-Nebot, F. Benavente, *Anal. Chim. Acta*, **2019**, *1079*, 1–19.
 [2] M. Mancera-Artu, N. Lleshi, V. Sanz-Nebot, E. Giménez, F. Benavente, *Talanta*, **2020**, *209*, 120563.



Formació d'acetals i silacetals mitjançant processos d'activació C—H

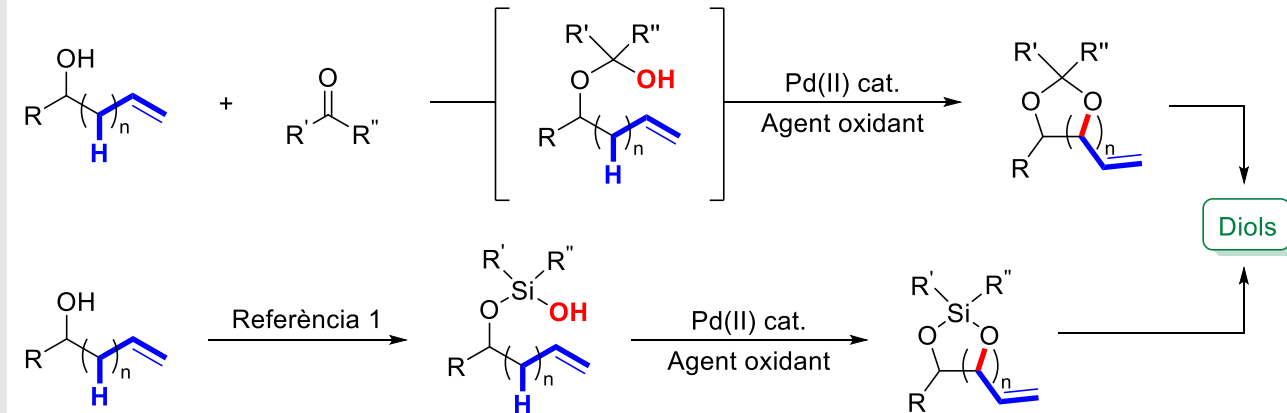
Víctor Maestre Martín; Xavier Ariza Piquer; Jordi García

Departament de Química Inorgànica i Orgànica. Secció de Química Orgànica

12

El desenvolupament de noves metodologies per a la síntesi de cadenes polihidroxilades i aminopolihidroxilades és una de les àrees més interessants de la química orgànica sintètica. L'obtenció simultània de 1,2- i 1,3-diols juntament amb la formació d'un enllaç C—C, en presència de quantitats catalítiques de metall, és una forma prometedora d'obtenir aquestes cadenes polihidroxilades. Aquest treball se centra en l'obtenció de 1,2- i 1,3-diols a partir de reaccions de ciclació mitjançant l'activació d'un enllaç C—H entre hemiacetals o silanols i una espècie al·lílica activada per un catalitzador de Pd(II).

Malgrat les diverses proves dutes a terme per obtenir els diols esmentats a partir de la formació d'acetals mitjançant una reacció de ciclació, no s'han obtingut resultats favorables. No obstant això, s'ha aconseguit aïllar silanols i s'estan fent proves per trobar un mètode que permeti obtenir 1,2- i 1,3-diols de manera satisfactòria.



Referències

[1] M. Petit, G. Chouraqui, C. Aubert, M. Malacria, *Org. Lett.*, **2003**, 5, 2037–2040.



Determinació de constants d'acidesa de fàrmacs en fluids intestinals simulats

Maria Malé Iscla; Elisabet Fuguet Jordà; Clara Ràfols Llach

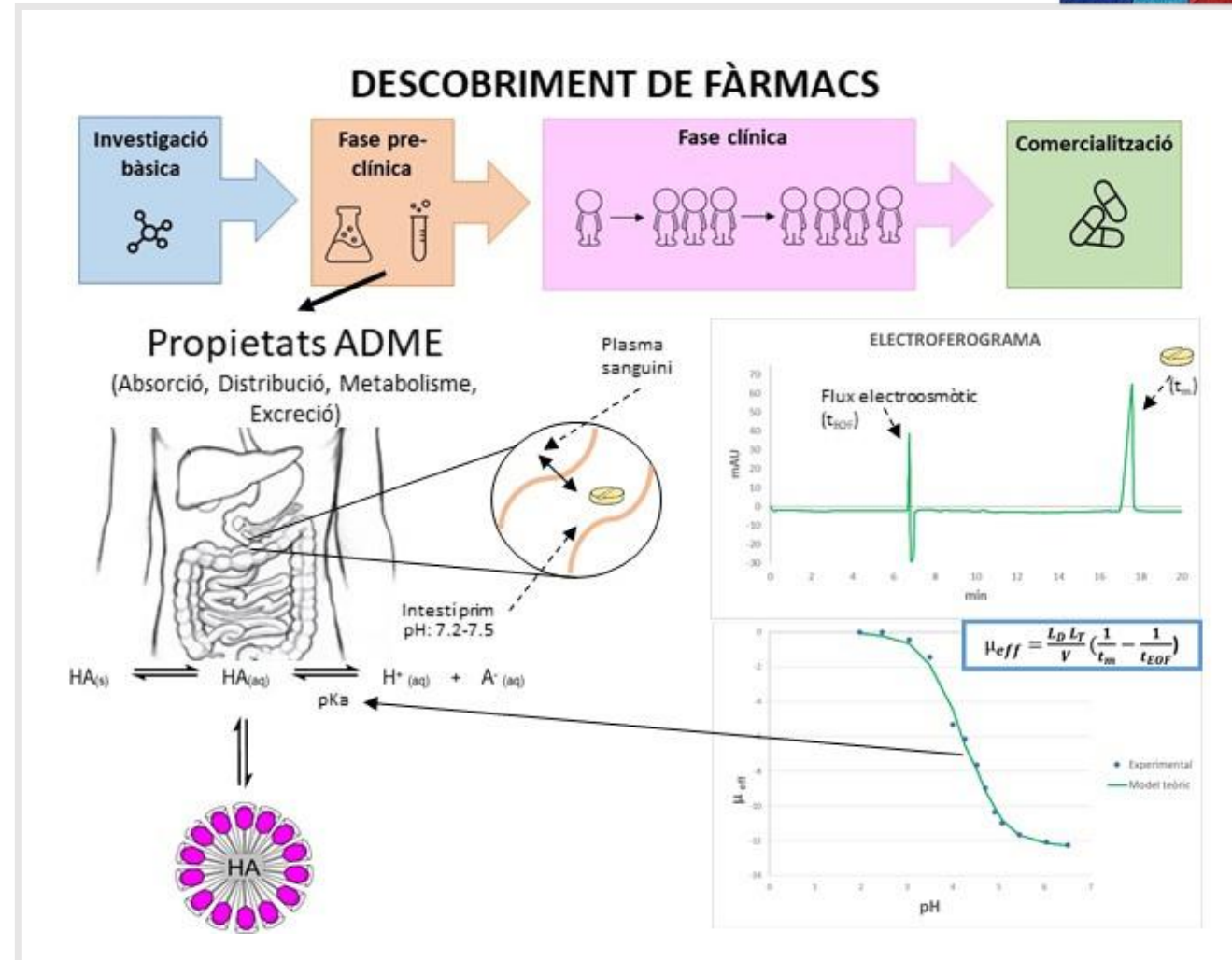
Departament d'Enginyeria Química i Química Analítica. Secció de Química Analítica

13

Per obtenir un fàrmac, en l'etapa inicial del procés de desenvolupament de fàrmacs s'estudien diferents propietats farmacocinètiques, com les propietats ADME. L'absorció dels fàrmacs en el cos humà administrats per via oral depèn del grau d'ionització d'aquests. Per això és important conèixer-ne la constant d'acidesa.

Per entendre el comportament *in vivo* dels fàrmacs en el cos humà i les interaccions amb els fluids biològics, també s'utilitzen els medis intestinals simulats d'abans i després d'haver ingerit menjar, el FaSSIF i el FeSSIF, respectivament.

En aquest treball s'han determinat els valors de la constant d'acidesa per a un conjunt de fàrmacs en aigua i medis intestinals simulats mitjançant la tècnica d'electroforesi capil·lar. S'ha observat que, a causa de l'elevada concentració de tensioactius en els medis intestinals, hi ha un desplaçament del valor de la constant d'acidesa respecte al que té en aigua i aquest és més notable en fàrmacs de naturalesa àcida que de naturalesa bàsica.



Obtenció d'arsenosucres d'algues mitjançant tècniques cromatogràfiques preparatives



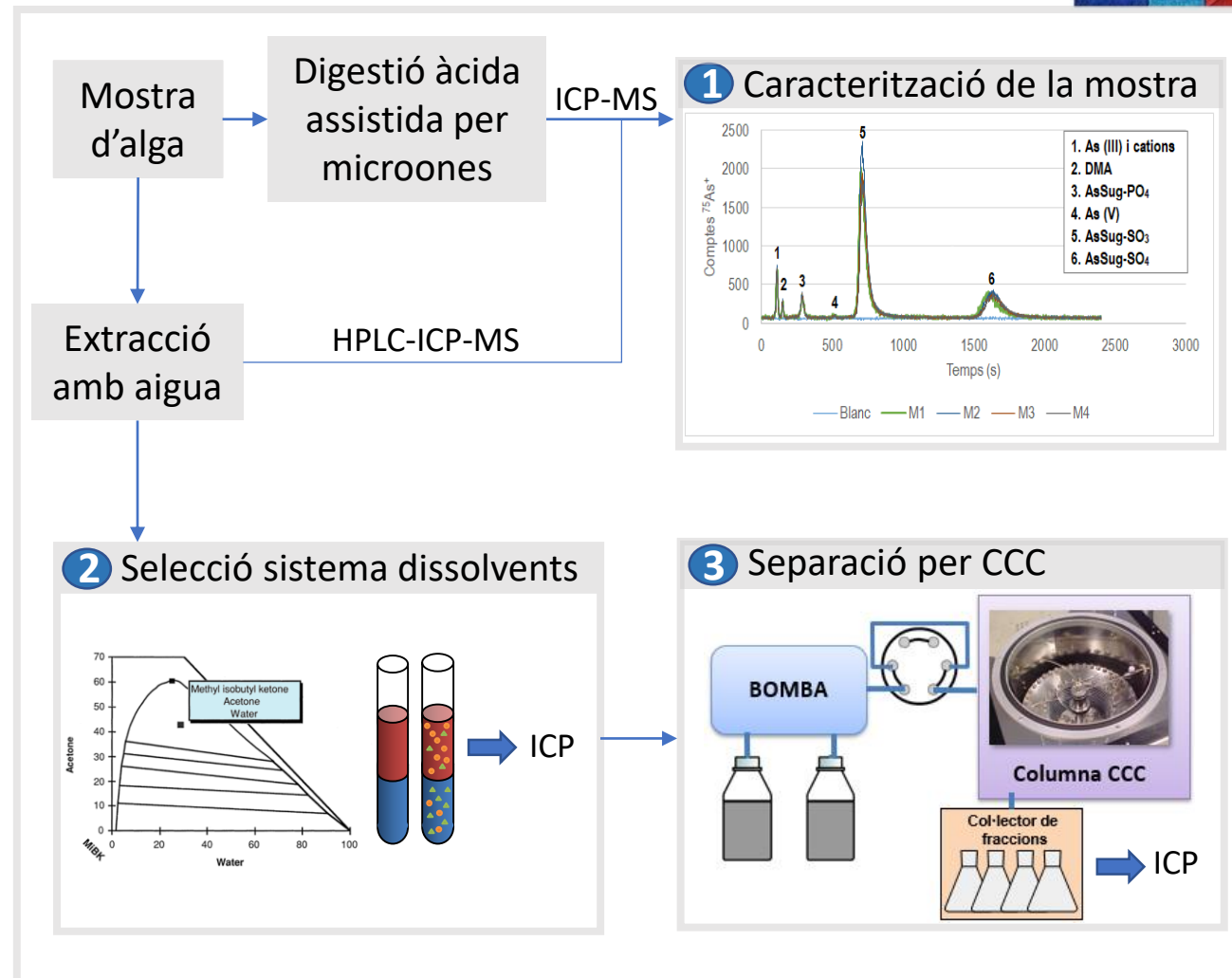
Alba Morales Rodríguez;¹ José Fermín López Sánchez;¹ Cristina Minguillón Llombart²

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

² Departament de Nutrició, Ciències de l'Alimentació i Gastronomia

El consum d'algues ha augmentat considerablement durant els últims anys a causa de l'alt contingut en nutrients essencials i de les propietats terapèutiques que presenten. Aquestes algues contenen espècies d'arsenic, principalment en forma d'arsenosucres. Per aquest motiu, sorgeix la necessitat de tenir dades sobre la composició, la toxicitat i el metabolisme d'aquests aliments per tal d'establir-ne els límits de consum. El principal problema en aquest àmbit de recerca és la manca de patrons d'arsenosucres, fet que dificulta la quantificació i la caracterització d'aquestes espècies.

L'objectiu principal és l'optimització de les condicions de treball d'una tècnica cromatogràfica preparativa, la cromatografia en contracorrent (CCC), per a l'obtenció i la caracterització dels patrons d'arsenosucres de l'espècie d'alga *Fucus vesiculosus*. Aquesta modalitat de la cromatografia de líquids, on la fase mòbil i l'estacionària són líquides, ofereix una major reproductibilitat i permet injectar un major volum que la cromatografia de líquids d'alta eficàcia (HPLC).





Síntesi de lligands per a la complexació amb ions metàl·lics amb aplicació com a dispositius moleculars

Emma Peregrín García; Paul Lloyd-Williams; Jordi García

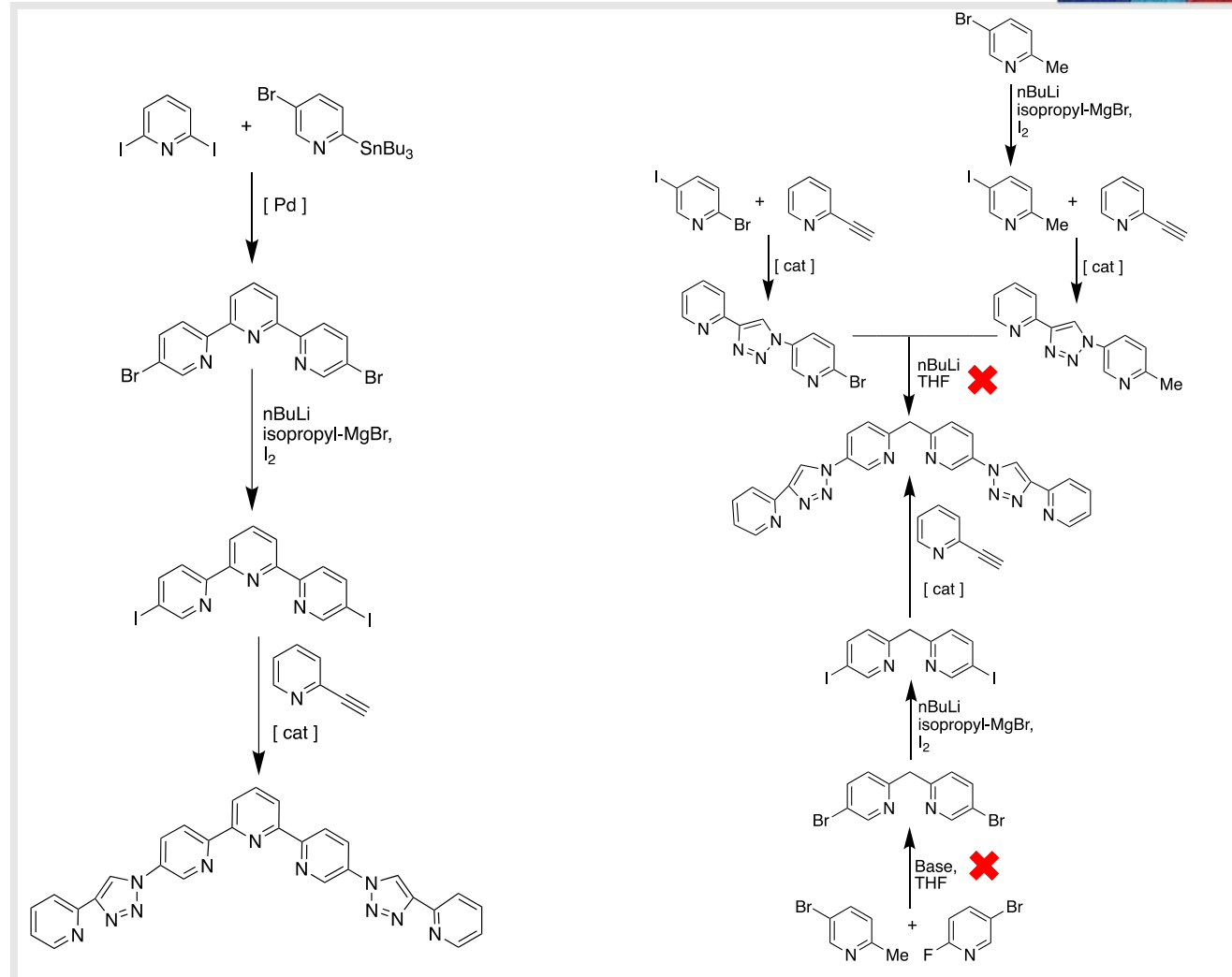
Departament de Química Inorgànica i Orgànica. Secció de Química Orgànica

L'objectiu d'aquesta tesi és fer un estudi i síntesi de nous lligands policíclics heteroaromàtics funcionalitzats i dissenyats específicament per formar complexos amb diferents metalls de transició i/o lantànids. Per fer-ho, es tracten diferents rutes sintètiques, duent a terme principalment reaccions tipus *click-chemistry* i acoblaments com el de Stille, per al desenvolupament dels dos lligands policíclics heteroaromàtics proposats.

Els complexos moleculars resultants de la complexació poden mostrar diferents propietats com ara SMM (*single-molecule magnet*) o SCO (*spin-crossover*). Aquestes propietats comporten múltiples aplicacions en tecnologia, concretament com a dispositius moleculars. És per això que aquests complexos estan generant un interès creixent per la possibilitat de desenvolupar ordinadors que siguin encara més ràpids i eficients, respecte a l'emmagatzematge d'informació computacional i informàtica quàntica.

Referències

[1] O. Clop, *Synthetic studies on polyheterocyclic ligands for complexation with metal ions: potential applications in molecular devices*, treball de fi de màster, Universitat de Barcelona, 2020.





Predicció de l'estructura i l'estat d'oxidació de catalitzadors exposats a condicions de reacció

Jon E. Quinlivan Domínguez;¹ Konstantin M. Neyman;^{1,2} Albert Bruix¹

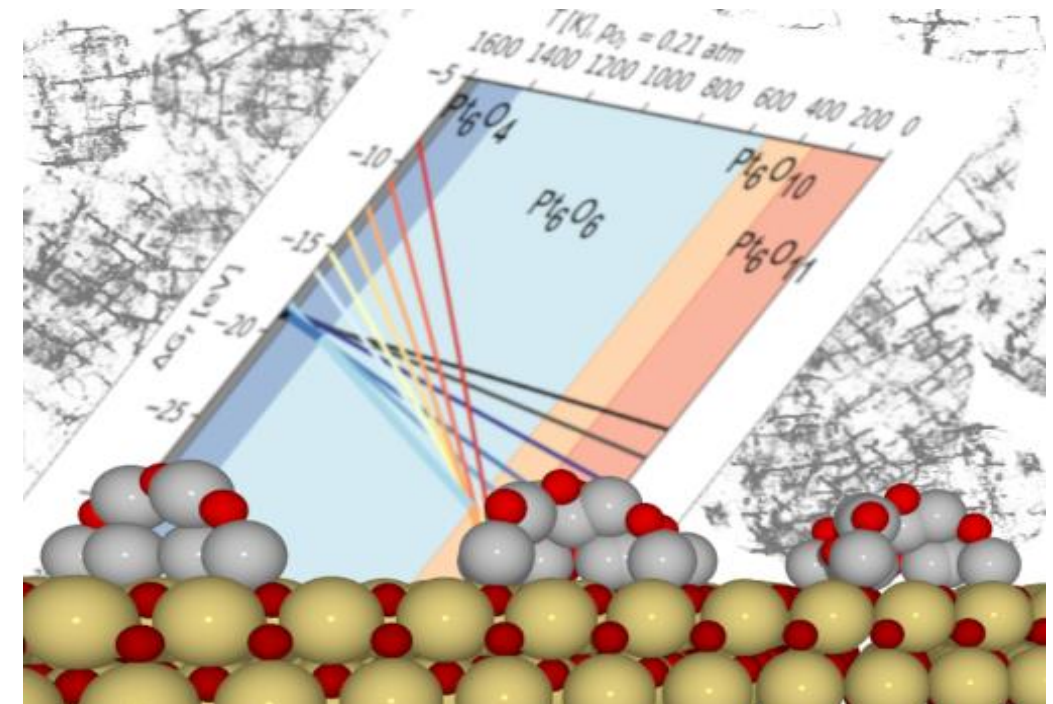
¹ Departament de Ciència de Materials i Química Física. Secció de Química Física

² Institució Catalana de Recerca i Estudis Avançats (ICREA)

L'objectiu d'aquest projecte és l'estudi de les propietats químiques de materials catalítics en condicions de reacció. Els catalitzadors moderns són sistemes nanoestructurats molt complexos. Juntament amb les elevades pressions i temperatures que es fan servir en processos catalítics, això dificulta l'adequada caracterització experimental d'aquests materials.

Aquest treball combina càlculs mecanoquàntics basats en la teoria del funcional de la densitat, conceptes de termodinàmica estadística, aprenentatge automàtic (*machine-learning*) i algoritmes d'optimització global per predir els diagrames de fase dels materials estudiats.

Aquest accés sense precedents als detalls estructurals i l'estabilitat de diferents fases ha permès identificar les estructures i estats d'oxidació rellevants de partícules de PtO_x en contacte amb superfícies d'òxid de ceri. Això ha revelat que aquestes partícules estan molt més oxidades del que s'esperaria, cosa que té implicacions importants per a l'estudi i el disseny de catalitzadors basats en aquests materials per a la conversió de contaminants.



Partícules de Pt_xO_y sobre òxid de ceri, superposades sobre el corresponent diagrama de fase



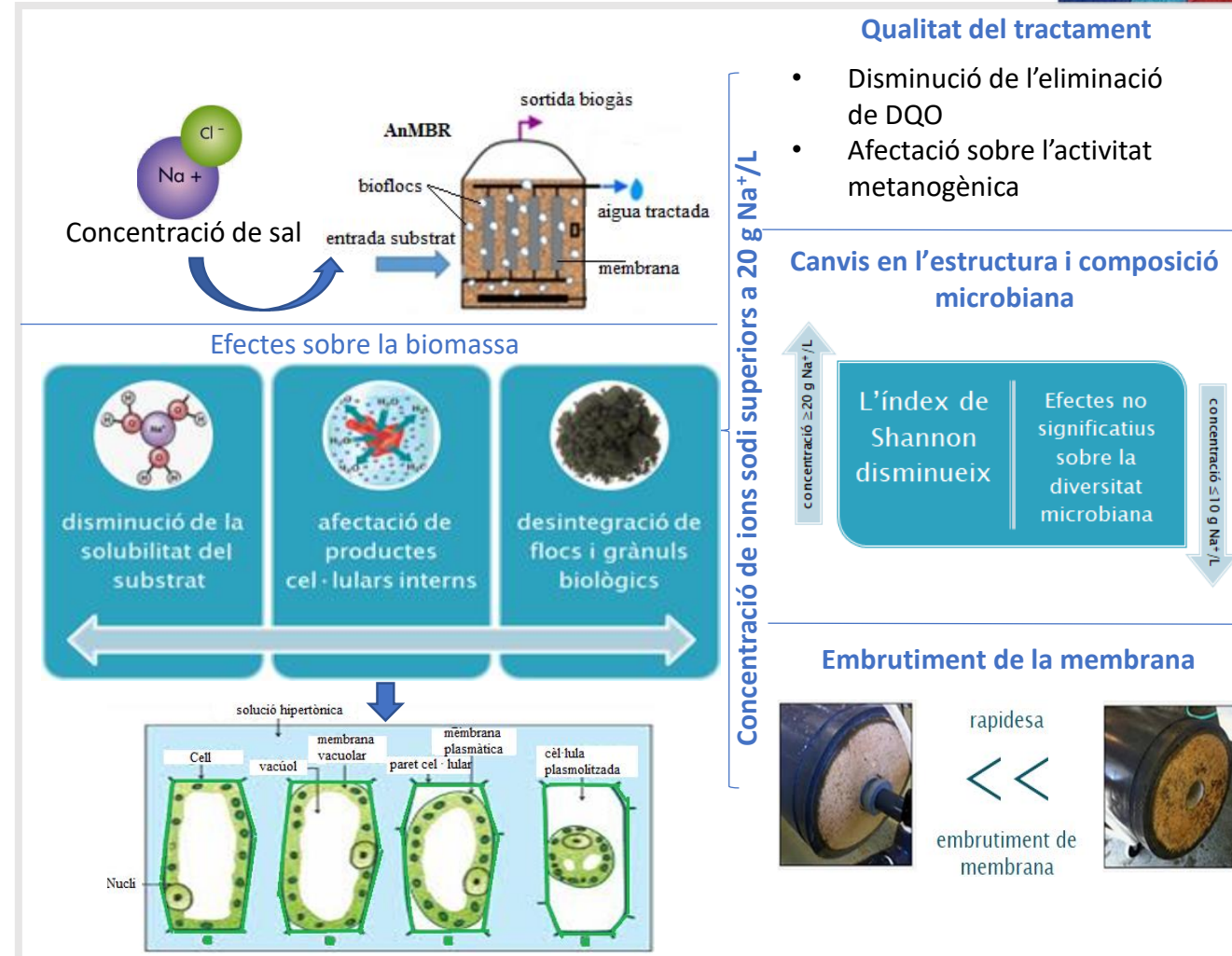
Revisió bibliogràfica de reactors biològics anaeròbics de membrana per al tractament d'aigües residuals salines

Alex Camilo Quintero; Sergi Vinardell; Joan Mata-Álvarez; Sergi Astals; Joan Dosta

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

La utilització de reactors biològics anaeròbics de membrana o AnMBR (de l'anglès, *anaerobic membrane bioreactors*) per al tractament d'aigües residuals ofereix una sèrie d'avantatges mediambientals, com ara la possibilitat de generar una aigua tractada d'alta qualitat juntament amb la producció de bioenergia (en forma de metà). No obstant això, el rendiment del tractament es pot veure afectat per una sèrie de factors que en limiten un major grau d'implementació a escala industrial.

Un d'aquests factors és la presència d'una alta concentració de sodi, que pot induir una desintegració dels flocs biològics que conté el reactor a causa de l'estrès osmòtic. Aquesta revisió bibliogràfica ha permès corroborar que l'eliminació de matèria orgànica, l'activitat metanogènica i les característiques de la biomassa desenvolupada en els AnMBR es troben parcialment afectades per concentracions de sodi inferiors a 10 g Na⁺/L, mentre que concentracions superiors a 20 g Na⁺/L comporten efectes negatius sobre el rendiment del reactor.





Reaccions directes i enantioselectives de *N*-propanoïl-1,3-oxazinan-2-ona amb acetals dialquílics catalitzades per complexos quirals de Ni(II)

Elias A. Romero-Cavagnaro; Miguel Mellado-Hidalgo; Pedro Romea i Fèlix Urpí

Departament de Química Inorgànica i Orgànica. Secció de Química Orgànica

L'ús d'enolats metàl·lics és un dels mètodes més estudiats i emprats per a la formació estereocontrolada d'enllaços carboni-carboni, atès que els fragments carbonílics α -funcionalitzats són ubics en un gran nombre de molècules de gran importància biològica [1].

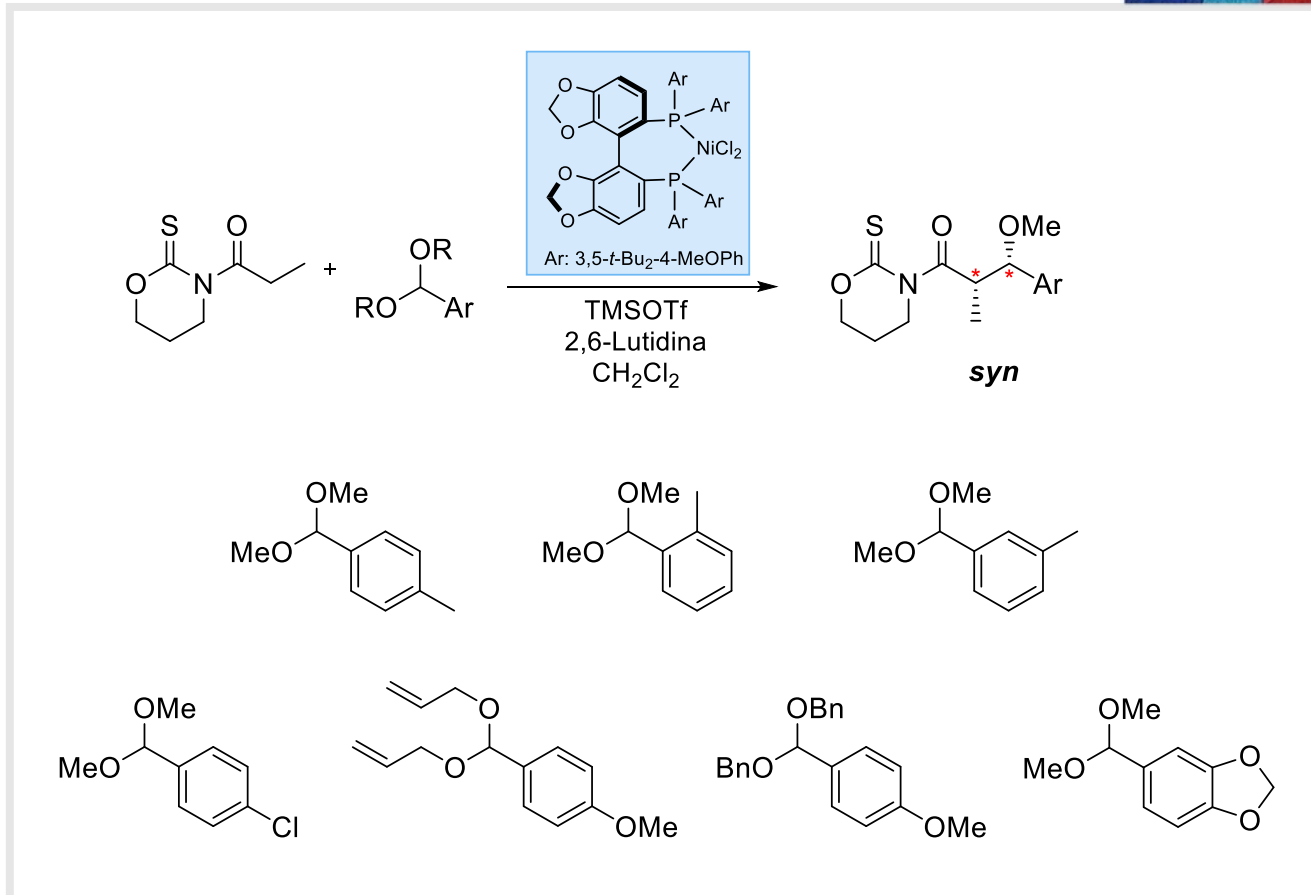
Davant la necessitat de controlar la configuració dels nous centres quirals, s'han desenvolupat noves estratègies basades en el control de substrat o en l'ús d'auxiliars quirals [2], que, posteriorment amb aproximacions com ara la d'*atom economy* [3], han permès la creació de processos directes i catalítics.

En aquest sentit, en el nostre grup s'ha aconseguit optimitzar una nova metodologia que permet la formació estereocontrolada i simultània de dos estereocentres via reaccions d'enolats metàl·lics amb acetals aromàtics, gràcies a la formació d'un intermedi oxocarbènic [4, 5].

L'objectiu d'aquest projecte és ampliar l'abast de la metodologia sintètica emprant diferents acetals aromàtics, tot establint la influència del substituent en la relació diastereomèrica i enantiomèrica en cada cas.

Referències

- [1] E. M. Carreira *et al.*, *Classics in Stereoselective Synthesis*. Willey-VCH: Weinheim, 2009.
 [2] a) A. H. Hoveyda, D. A. Evans, G. C. Fu, *Chem. Rev.*, **1993**, *93*, 1307–1370.
 b) Y. Gnas, F. Glorius, *Synthesis*, **2006**, *12*, 1899–1930.



[3] B. M. Trost, *Science*, **1991**, *254*, 1471–1477.

[4] S. C. D. Kennington, *Tesi doctoral*, Universitat de Barcelona, 2020.

[5] S. C. D. Kennington, A. J. Taylor, P. Romea, F. Urpí *et al.*, *Org. Lett.*, **2019**, *21*, 305–309.



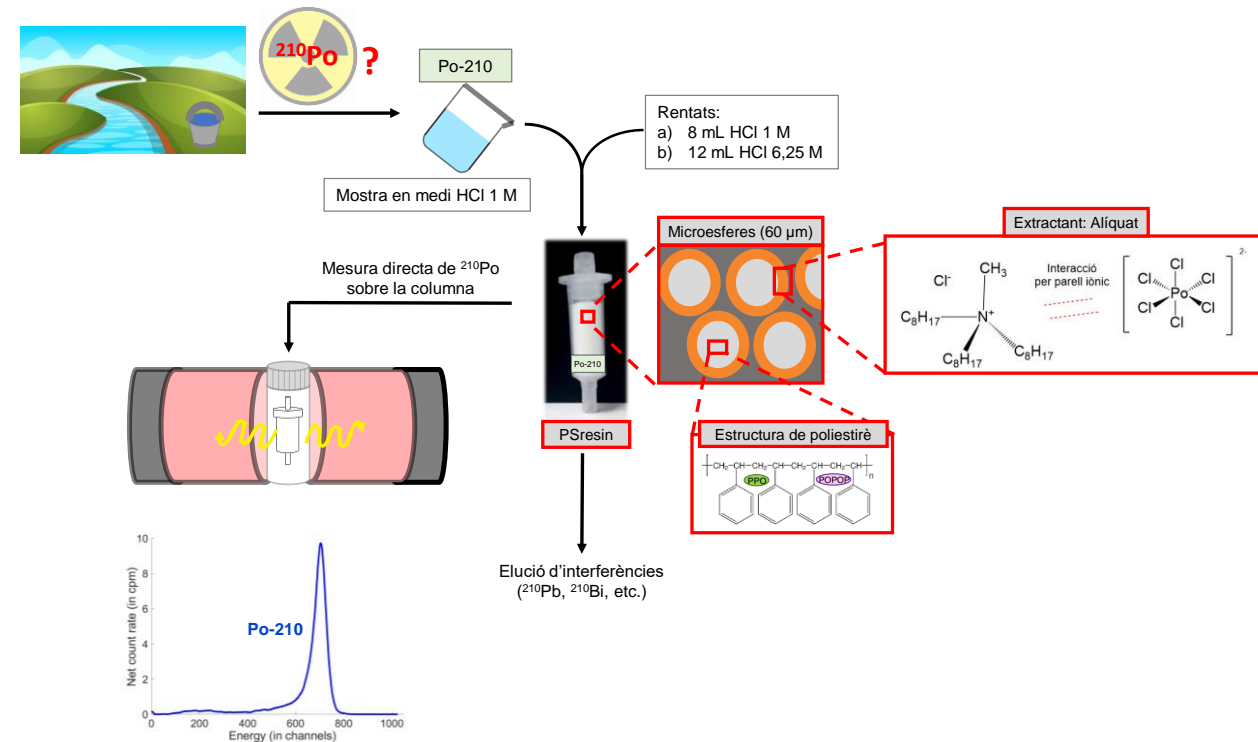
Determinació de ^{210}Po en aigua de consum: desenvolupament i comparativa de mètodes

Jordi Rotger; Joana Tent; Hèctor Bagán; Anna Rigol; Alex Tarancón

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

19

El ^{210}Po és un radioisòtop d'origen natural generat a la cadena del ^{238}U . A causa de la seva elevada radiotoxicitat, l'RD 140/2003, pel qual s'estableixen els criteris sanitaris de la qualitat de l'aigua de consum humà, disposa que totes les aigües que excedeixen determinats valors paramètrics de radioactivitat total requereixin una mesura específica de ^{210}Po , entre altres radionúclids. Davant de la necessitat de mesurar ^{210}Po en aigua, aquest estudi pretén desenvolupar un mètode d'anàlisi d'aquest radionúclid basat en escintil·lació plàstica, utilitzant una resina selectiva anomenada *PSresin*, formada per microesferes de $60\ \mu\text{m}$ de poliestirè recobertes amb Aliquat 336 com a extractant selectiu. Dita resina permet unificar les etapes de separació i mesura, així com evitar la generació de residus mixtos. A més, es durà a terme una comparativa amb alguns dels mètodes ja utilitzats com ara UNE-EN ISO 13161 o IAEA/AQ/12, basats en espectrometria alfa.





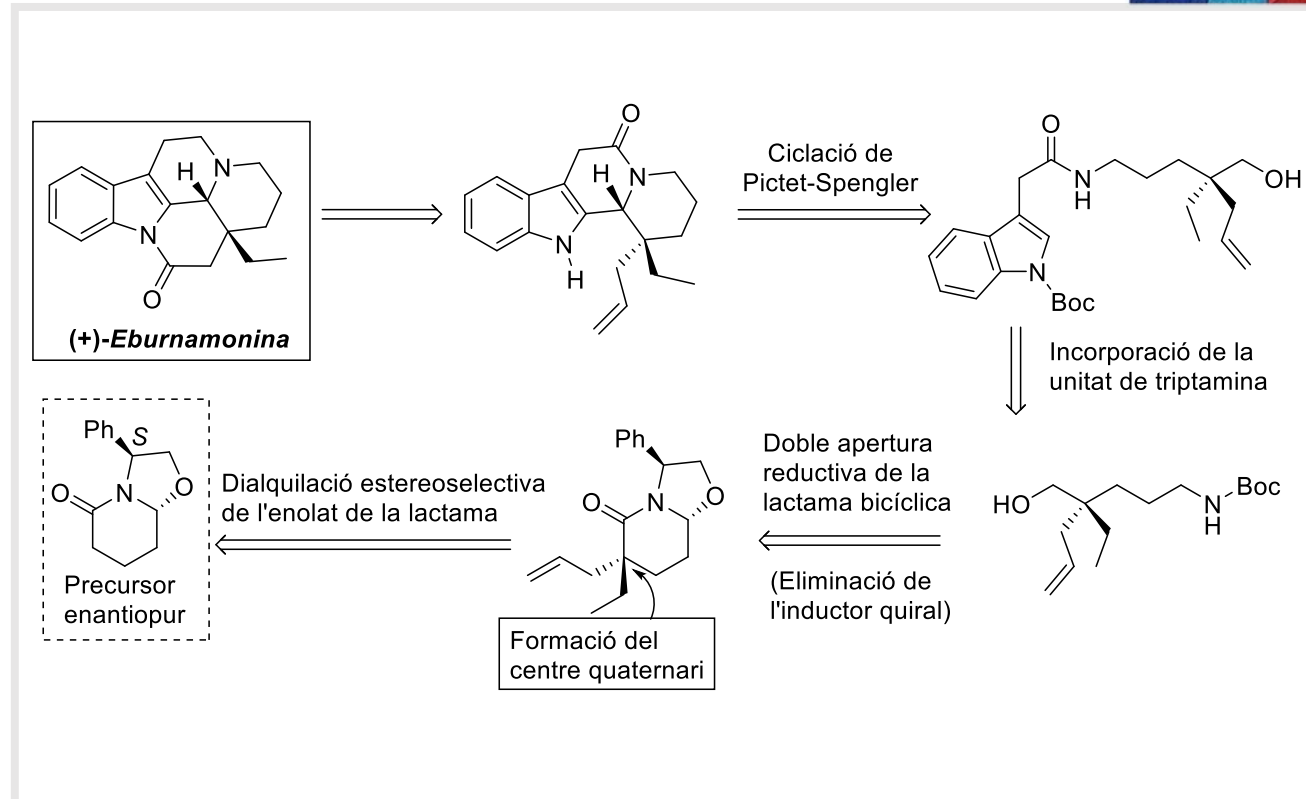
Cap a la síntesi total enantioselectiva de la (+)-eburnamonina

Albert Ruiz; Sergi Ordeix; Núria Llor; Mercedes Amat

Laboratori de Química Orgànica. Facultat de Farmàcia i Ciències de l'Alimentació

Els alcaloides indòlics monoterpènics són un conjunt important de productes naturals d'origen vegetal. Entre ells trobem l'eburnamonina, obtinguda de plantes del gènere *Hunteria eburnean* [1], interessant per la seva destacada activitat farmacològica, especialment per al tractament de malalties cerebrovasculares [2].

En l'última dècada s'han descrit 4 síntesis totals enantioselectives de l'eburnamonina, cosa que posa de manifest el gran interès d'aquest alcaloide. La formació de l'estereocentre quaternari amb una configuració ben definida representa un dels reptes principals des d'un punt de vista sintètic. Utilitzant la metodologia desenvolupada prèviament en el nostre grup de recerca per generar estereocentres quaternaris de forma diastereoselectiva [3], s'està duent a terme la síntesi total enantioselectiva de la (+)-eburnamonina.



Referències

- [1] P. Mondal, N. P. Argade, *Synthesis*, **2017**, *49*, 1849–1856.
 [2] a) G. Pandey, A. Mishra, J. Khamrai, *Org. Lett.*, **2017**, *19*, 3267–3270. b) W. Zhang, X. Chen, Y. An, J. Wang *et al.*, *Chem. Eur. J.*, **2020**, *26*, 10439–10443.
 [3] M. Amat, O. Lozano, C. Escolano, E. Molins, J. Bosch, *J. Org. Chem.*, **2007**, *72*, 4431–4439.

Estudi de la recuperació de nitrogen de purins mitjançant membranes selectives



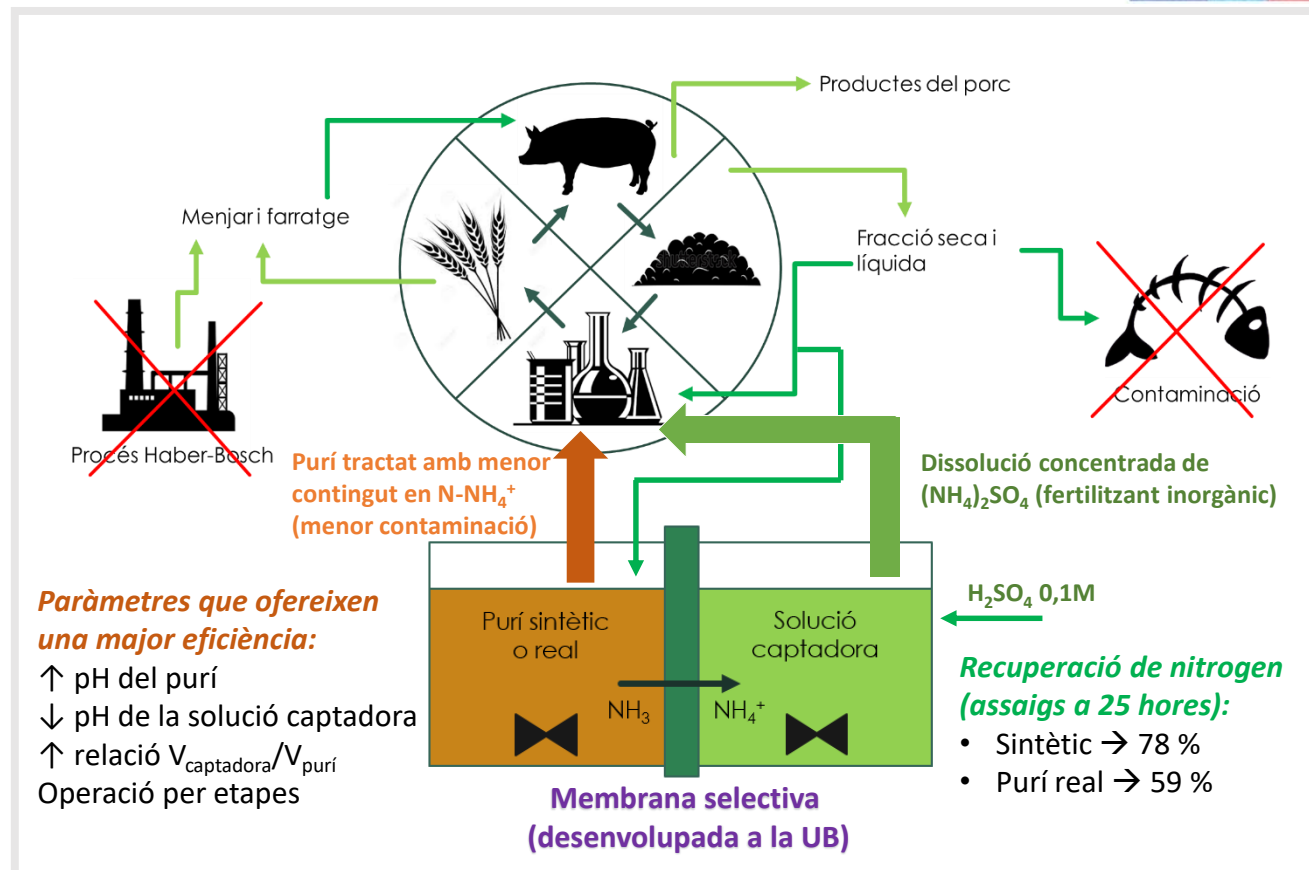
Andreu Serra-Toro;¹ S. Astals;¹ S. Madurga;² J. Mata-Álvarez;¹ F. Mas;² J. Dosta¹

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

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

La gestió de les aigües residuals generades a les granges de porcs comporta un problema de contaminació per l'elevada càrrega de nitrogen amoniacal [1]. D'altra banda, el nitrogen és un element essencial per al desenvolupament de la vida. Tanmateix, el seu cicle natural no és prou ràpid per satisfer aquesta necessitat i s'ha de cobrir amb la seva síntesi pel procés de Haber-Bosch, que suposa el 2 % de les emissions mundials de CO₂ [2].

El tractament d'aquest efluent mitjançant la tecnologia de membranes permet recuperar el nitrogen i aconseguir un efluent natural menys perjudicial per al medi ambient i un producte altament concentrat en nitrogen adequat per utilitzar com a fertilitzant inorgànic. Aquest estudi pretén avaluar i determinar les condicions d'operació òptimes per a la recuperació de nitrogen del purí usant una membrana selectiva desenvolupada a la UB, així com proposar un model fisicoquímic capaç d'explicar la seva transferència a través de la membrana.



Paràmetres que ofereixen una major eficiència:
↑ pH del purí
↓ pH de la solució captadora
↑ relació V_{captadora}/V_{purí}
Operació per etapes

Referències
[1] T. Yan, Y. Ye, H. Ma, Y. Zhang *et al.*, *Chem. Eng. J.*, **2018**, 348, 143–156.
[2] J. W. Erisman, M. A. Sutton, J. Galloway, *J. Nat. Geosci.*, **2008**, 10, 636–639.



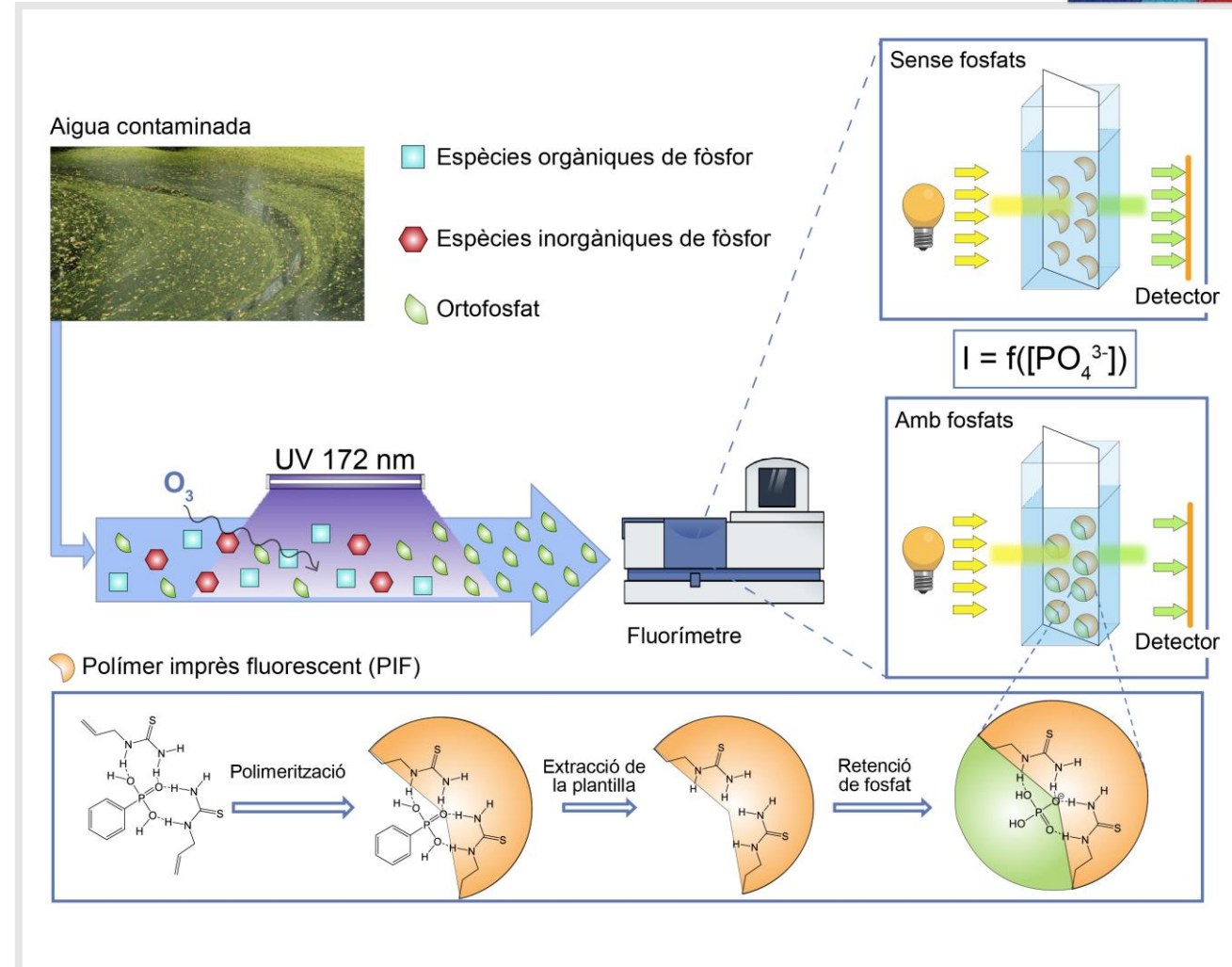
Anàlisi de fòsfor total en aigües. Desenvolupament d'un sistema d'anàlisi en continu i sense reactius

Dídac Serraïma; H. Bagán; A. Tarancón; J. F. García

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

22

El fòsfor, generalment en forma d'ortofosfat o pirofosfat, és un dels principals contaminants en aigües residuals, especialment en zones d'alta densitat de població. Un excés d'aquest element afecta els ecosistemes i provoca l'eutrofització de l'aigua. Hi ha mètodes consolidats per a l'anàlisi de fosfats, si bé generen residus i requereixen un alt consum de reactius. El mètode alternatiu investigat inclou, primerament, un pretractament d'irradiació amb llum UV per a la transformació del contingut de fòsfor total en ortofosfat. D'aquesta manera s'assoleix una degradació gairebé completa de les espècies de fòsfor orgànic. Paral·lelament, s'ha estudiat un sistema de quantificació basat en l'ús de polímers impresos fluorescents i selectius per a l'anió ortofosfat que experimentin l'atenuació del seu senyal de fluorescència proporcionalment a la presència d'aquest anió. S'ha assolit una capacitat de retenció del 72 % per al polímer d'etilenglicol dimetacrilat i continua la recerca sobre la interferència del fosfat en el procés de fluorescència.





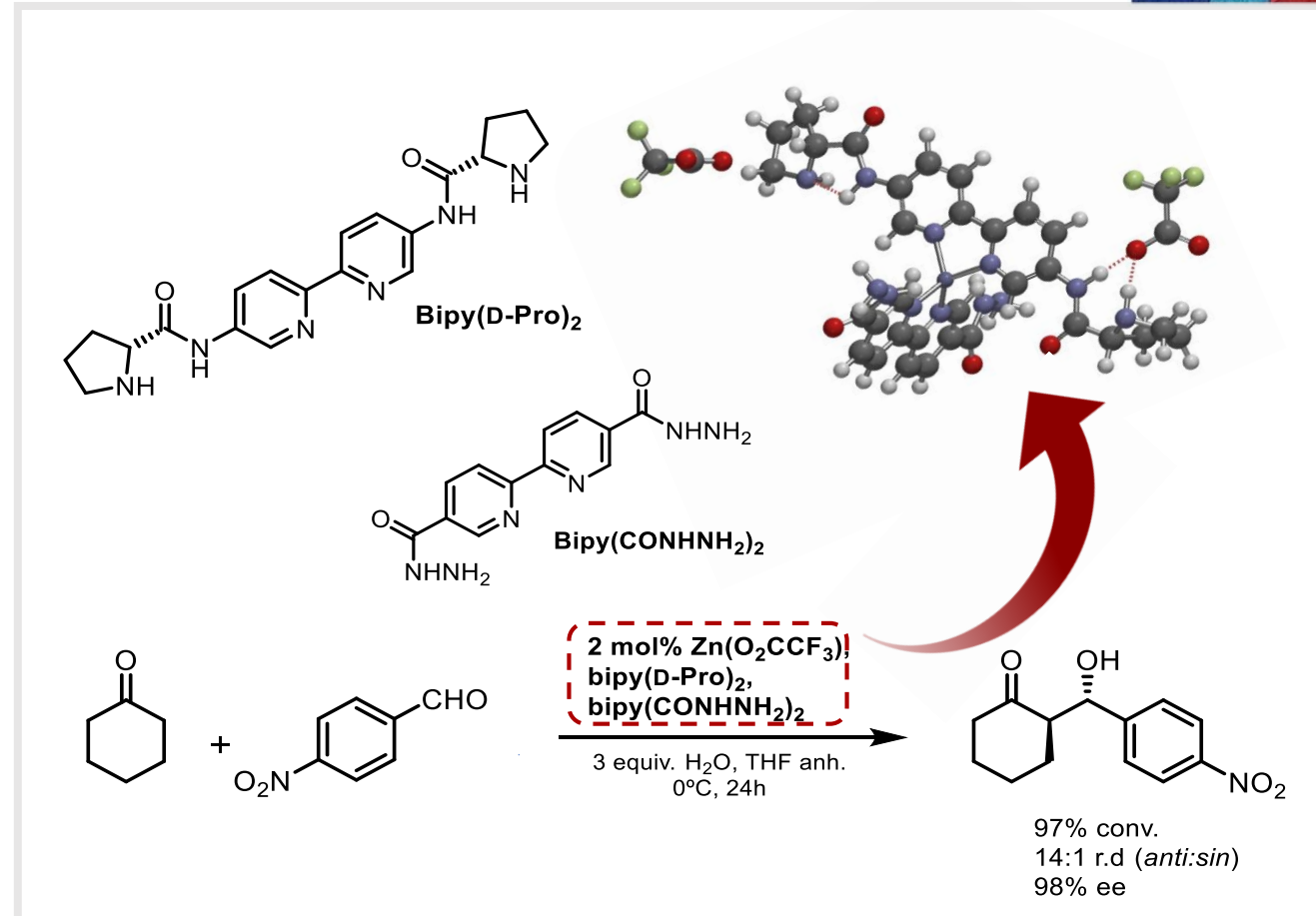
Un potent catalitzador supramolecular per a reaccions aldòliques asimètriques

Alba Sors-Vendrell;^{1,2} Ciril Jimeno Mollet;¹ Jordi Solà Oller¹

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

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

En el grup de recerca s'havia descrit prèviament un sistema catalític basat en lligands de 2,2'-bipiridina-5-monofuncionals [1]. En aquest treball s'ha continuat aquesta línia de recerca estudiant sistemes catalítics basats en lligands de 2,2'-bipiridina-5,5'-bifuncionals. Aquests lligands s'autoassemblen amb zinc(II) per generar complexos catalítics supramoleculars que actuen simultàniament mitjançant interaccions covalents (per enamina) i no covalents (per pont d'hidrogen) a través de l'esfera de coordinació. L'objectiu del treball és generar un catalitzador més eficient, que redueixi la càrrega catalítica i en millori l'estereoselectivitat. Això s'ha aconseguit amb aquest nou disseny ja que s'ha reduït d'un 10 a un 2 mol% la càrrega catalítica amb excel·lents resultats d'excés enantiomèric i conversió. A més a més, s'ha fet substituir el lligand generador de pont d'hidrogen original amb un grup tiourea per un de molt més senzill (Bipy(CONHNH₂)₂).



Referències

[1] A. Serra-Pont, I. Alfonso, J. Solà, C. Jimeno, *Chem. Commun.*, **2019**, 55, 7970–7973.

Estudi dels efectes de la matèria particulada de l'aire en cultius cel·lulars pulmonars

Paula Villasclaras Calvo;¹ Romà Tauler Ferré;² Carmen Bedia Girbés²

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

² Institut de Diagnosi Ambiental i Estudis de l'Aigua - Consell Superior d'Investigacions Científiques (IDAEA-CSIC)



Múltiples estudis relacionen la contaminació per matèria particulada (PM) amb efectes adversos sobre la salut. No obstant això, els mecanismes biològics que hi ha al darrere encara no s'han pogut desxifrar [1].

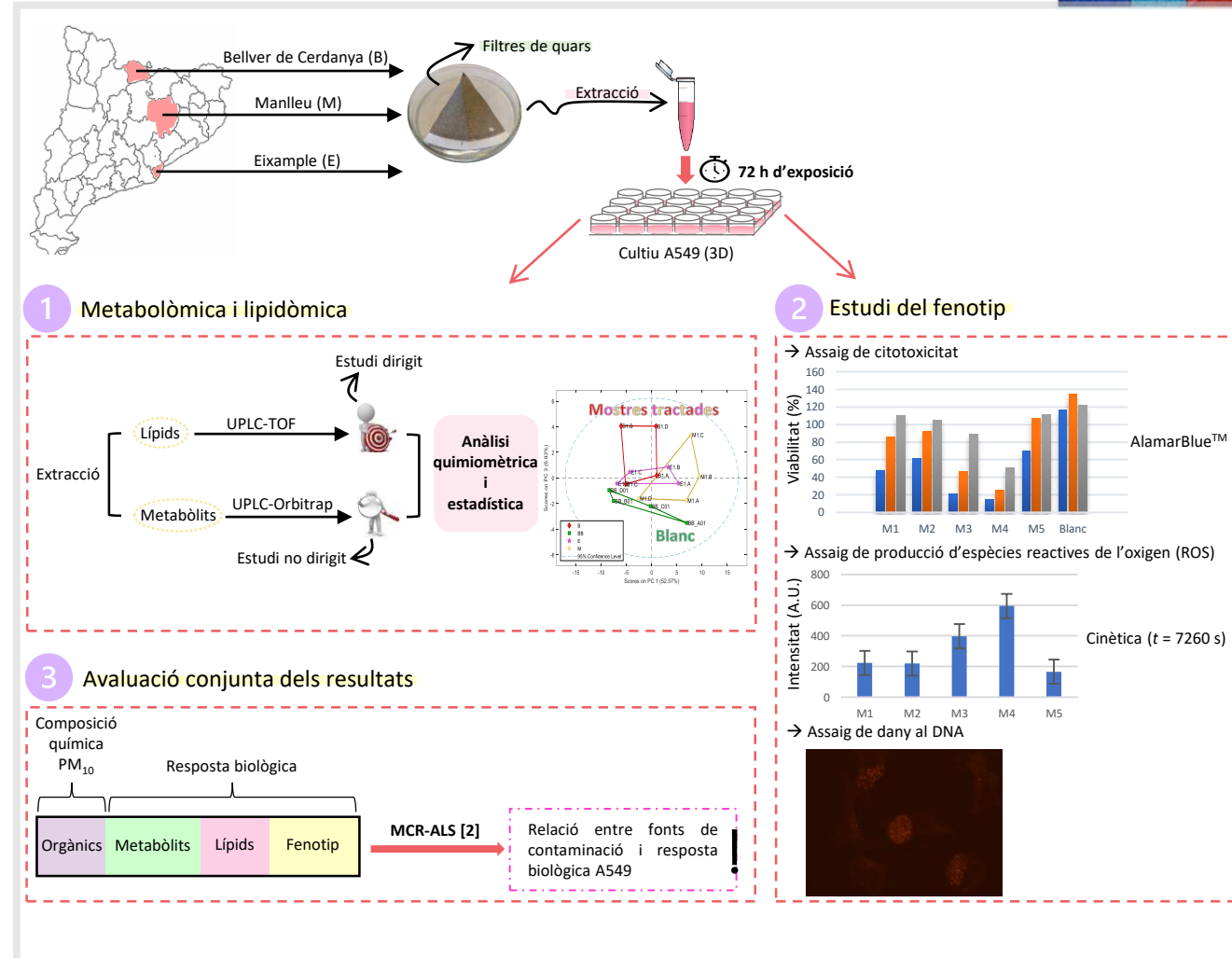
L'objectiu del treball ha estat estudiar els efectes fenotípics i metabòlics de la PM₁₀ en cèl·lules de pulmó. Per fer-ho, es van exposar cultius cel·lulars 3D de la línia epitelial de pulmó A549 a extractes de PM₁₀ provinents de tres regions catalanes diferents (Eixample, Manlleu i Bellver de Cerdanya), de composició orgànica prèviament analitzada. Passades 72 hores, es van fer diversos assajos biològics (estudi del fenotip) així com l'extracció de lípids i metabòlits i l'anàlisi per LC-MS (estudi metabòlic).

Tota la informació química i biològica obtinguda s'ha tractat amb diverses eines quimiomètriques per esbrinar la relació entre la composició química de la PM₁₀ i els canvis fenotípics i metabòlics més importants que experimenten les cèl·lules.

Referències

[1] S. Costa, J. Ferreira, C. Silveira, C. Costa *et al.*, *J. Toxicol. Environ. Health B*, 2014, 17, 307–340.

[2] Multivariate Curve Resolution Homepage, <http://www.mcrals.info/>.



MASTERQUÍMICA XVI

Facultat de Química

Jornades de presentació de treballs experimentals
de màster de la Facultat de Química (26–31 de maig de 2021)

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

Data d'edició: juliol de 2021



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