Propostes de TFM 21/22 – Informació addicional.

QUESTRAM _M

Obtenció d'arsenosucres d'algues comestibles: Estudis de tècniques de preconcentració
Directors: Dr. José Fermín López i Dra. Dolores Barrón.
La importància de la determinació d'espècies d'arsènic en aliments queda palesa en la legislació vigent que des del 2015 estableix uns valors màxims d'arsènic inorgànic (iAs: As (III) + As (V)) permesos. D'altra banda, d'altres espècies d'arsènic que poden arribar a ser majoritàries en matrius d'algues comestibles com és el cas dels arsenosucres, no es disposa de patrons comercials que permetin avançar en el coneixement del comportament i toxicitat d'aquestes espècies.
En aquest treball es pretén estudiar tècniques de preconcentració per arsenosucres com a un pas previ al seu aïllament. En tots els casos, la determinació d'espècies d'arsènic a les mostres analitzades es durà a terme mitjançant HPLC-ICP-MS.

Avaluació de la qualitat de la sal de taula: composició química i contingut en microplàstics (MP)
Directors: Dr. José Fermín López i Dra. Elisabet Playà
Aquest estudi es centra en les úniques roques comestibles: la sal, entenent que aquest producte alimentari és un producte geològic (sediment evaporític del grup dels clorurs) i un precipitat químic inorgànic (NaCl). Els objectius són a) Establir un protocol analític de preparació de mostres de sal; b) Definiri quines són les millors tècniques instrumentals per al seu anàlisi; c) Caracteritzar químicament diferents tipologies de sals de taula (elements minoritaris, elements traça). b) Quantificar els microplàstics presents en les sals estudiades. c) Iniciar una línia de recerca sobre el comportament d'alguns ions en la xarxa cristal·lina del NaCl: experimentació, anàlisi i estudi dels coeficients de distribució del Br-Li entre les salmorres i l'halita coetània.

FLUORESCÈNCIA

Cromatografia d'extracció: separació i purificació de polifenols en extractes de productes d'origen vegetal.
Directores: Dra. Mercè Granados i Dra. Sònia Sentellas
Els polifenols es troben de forma natural en productes d'origen vegetal. Són compostos amb una elevada capacitat antioxidant, i la seva ingesta té efectes beneficiosos sobre la salut. Per aquest motiu actualment hi ha molt interès en els productes nutracèutics basats en polifenols, que suplementen la ingesta a través de la dieta. Els polifenols s'obtenen a partir de productes naturals i els extractes que s'obtenen tenen una elevada complexitat. La cromatografia de líquids amb detecció UV és una tècnica molt adequada per a caracteritzar el perfil dels polifenols presents en els extractes, i acoblada a l'espectrometria de masses permet la identificació dels compostos.

En funció de la composició d'aquests extractes cal plantejar estratègies per a la seva purificació (o fraccionament). L'ús de resines polimèriques és una de les opcions que s'investiga actualment, i és la que es planteja en aquest Treball Final de Màster, utilitzant metodologia en columna (cromatografia d'extracció).

Caracterització, Classificació i Autenticació de mels mitjançant perfils cromatogràfics polifenòlics i mètodes quimiomètrics

Directors: Dr. Oscar Núñez i Dra. Sònia Sentellas

La mel és una barreja natural complexa que conté diversos nutrients i compostos bioactius, com ara polifenols, que es consideren els principals responsables de l'àmplia gamma d'activitats bioquímiques de la mel. Així, existeix una correlació significativa entre l'activitat antioxidant de la mel i el seu contingut en polifenols. La majoria dels polifenols presents a la mel són flavonoides (hesperidina, quercetina, naringenina, pinocembrina, luteolina, kaempferol, rutina, apigenina i miricetina), àcids fenòlics, derivats de l'àcid fenòlic (per exemple, els àcids gàl·lic, clorogènic, vanilic, cafeic, siríngic, ferúlic i elàgic) i flavones. La distribució i contingut d'aquests polifenols a la mel varia en funció de diversos factors com ara el clima i altres condicions ambientals de la zona de producció, la flora d'origen, així com l'espècie d'abella productora de la mel. Els perfils polifenòlics es poden utilitzar, per tant, com a descriptors químics de les mostres de mel per tal d'autenticar el seu origen i les seves característiques, evitant fraus als consumidors.
L'objectiu d'aquest treball és el desenvolupament de mètodes de cromatografia de líquids amb detecció espectroscòpica (UV-vis i Fluorescència) i amb espectrometria de masses per a la obtenció de perfils polifenòlics suficientment discriminants per a caracteritzar, classificar i autenticar mostres de mel de diferent tipologia i procedència. Amb aquest propòsit es faran servir també mètodes quimiomètrics d'anàlisi multivariant com l'anàlisi de components principals (PCA) i l'anàlisi discriminant per regressió de mínims quadrats parcials (PLS-DA).

Relació entre la composició de les pintures murals i la tipologia de vil.la a diferents jaciments romans a Catalunya.

Director: Dr. José F. García

Les vil·les romanes són una tipologia d'habitatge situada habitualment fora de les ciutats. Per aquests habitatges, l'estructura i funcionalitat depenia sovint de la seva localització i l'activitat que desenvolupessin. Bàsicament, existeixen tres tipus de vil·les: urbanes, marítimes i rurals. Les urbanes es trobaven a prop de les ciutats mentre que les marítimes i rurals eren localitzades en zones que els hi facilités l'activitat econòmica relacionada amb mar i els conreus. Les parets de totes les vil·les es trobaven decorades amb pintures murals i els motius, l'estructura de la pintura i els pigments emprats variaven en cada cas.

En aquest treball es continuarà un estudi anterior i s'analitzaran pintures murals de diferents vil·les localitzades a Catalunya de cadascun dels tres tipus i s'estudiarà la possible relació entre les característiques materials de les pintures i el tipus de vil.la.

En aquest treball col·laboraran: H. Bagan i G. Magkanas de la secció de QA de la UB i J. Burch del departament de Història i Història de l'Art de la UdG.

ELECTROANÀLISI

Autenticació d'herbes aromàtiques per cromatografia de líquids
Directores: Dra. Núria Serrano i Dra. Clara Pérez
En els darrers temps, l'autenticació d'aliments i la detecció d'adulteracions s'han convertit en temes de gran preocupació per a totes les parts involucrades en la indústria alimentària, ja que són un component clau del control de qualitat i la seguretat alimentària. L'ús de HPLC acoblada a diversos detectors (UV-vis, electroquímic, fluorescència o espectrometria de masses) és la forma més habitual d'analitzar aquestes mostres. Així doncs, a partir de l'extracció de perfils cromatogràfics característics que contindran informació de la composició global de la mostra i la identificació de (bio)marcadors claus d'autenticació, serà possible caracteritzar, classificar i autenticar els productes alimentaris. En aquest projecte es pretén desenvolupar un mètode HPLC amb detecció UV-Vis i amperomètrica fent servir dispositius serigrafiats (*screen-printed electrodes*, SPEs) per a l'autenticació d'herbes aromàtiques com ara canyella, menta, romaní, llorer i farigola mitjançant la identificació dels biomarcadors característics.

En los últimos tiempos, la autenticación de alimentos y la detección de adulteraciones se han convertido en temas de gran preocupación para todas las partes involucradas en la industria alimentaria, ya que son un componente clave del control de calidad y la seguridad alimentaria. El uso de HPLC acoplada a varios detectores (UV-vis, electroquímico, fluorescencia o espectrometría de masas) es la forma más habitual de analizar estas muestras. Así pues, a partir de la extracción de perfiles cromatográficos característicos que contendrán información de la composición global de la muestra y la identificación de (bio) marcadores claves de autenticación, será posible caracterizar, clasificar y autenticar los productos alimenticios. En este proyecto se pretende desarrollar un método HPLC con detección UV-Vis y amperométrica utilizando dispositivos serigrafiados (screen-printed electrodes, SPEs) para la autenticación de hierbas aromáticas como canela, menta, romero, laurel y tomillo mediante la identificación de los biomarcadores característicos.

Desenvolupament de sensors selectius per biomarcadors de contaminació.
Directores: Dra. Núria Serrano i Dra. Clara Pérez
El control ambiental periòdic és imprescindible per tal de prevenir i evitar episodis crítics de contaminació. Aquest control requereix l'anàlisi d'un nombre molt elevat de mostres, per la qual cosa és necessari desenvolupar mètodes de cribratge ràpids, econòmics i portàtils. En aquest camp, la determinació electroquímica de biomarcadors de contaminació és especialment adient. Així, en aquest projecte es desenvoluparà un sensor electroquímic per a la determinació d'àcid salicílic, un compost que actua com a biomarcador de contaminació antropogènica ja que s'utilitza, per exemple, en locions hidratants i medicaments contra l'acné. A més, és un producte de degradació de l'àcid acetilsalicílic. El sensor desenvolupat es basarà en dispositius serigrafiats i l'electropolimerització de polímers d'impressió molecular (MIP), estratègia que proporciona sensors amb una elevada selectivitat. Addicionalment, s'empraran tècniques òptiques amb elèctrodes òpticament transparents per a la caracterització del procés de modificació.

El control ambiental periódico es imprescindible para prevenir y evitar episodios críticos de contaminación. Este control requiere el análisis de un número muy elevado de muestras, por

lo que es necesario desarrollar métodos de cribado rápidos, económicos y portátiles. En este campo, la determinación electroquímica de biomarcadores de contaminación es especialmente adecuada. Así, en este proyecto se desarrollará un sensor electroquímico para la determinación de ácido salicílico, un compuesto que actúa como biomarcador de contaminación antropogénica, ya que se utiliza, por ejemplo, en lociones hidratantes y medicamentos contra el acné. Además, es un producto de degradación del ácido acetilsalicílico. El sensor desarrollado se basará en dispositivos serigrafiados y la electropolimerización de polímeros de impresión molecular (MIP), estrategia que proporciona sensores con una elevada selectividad. Adicionalmente, se emplearán técnicas ópticas con electrodos ópticamente transparentes para la caracterización del proceso de modificación.

Optimització de sensors selectius per contaminants persistents
Directors: Dr. José Manuel Díaz i Dra. Clara Pérez
El control de metalls pesants en aigua i sòls és crucial per a la salut humana i la sostenibilitat ambiental. A nivell traça, alguns metalls pesants són essencials per a un funcionament metabòlic normal, però a concentracions més elevades són altament tòxics. Aquest perill es veu ampliat per la seva tendència a la bioacumulació en teixits vius i per la seva persistència a causa de la seva inherent no biodegradabilitat. Les tècniques electroanalítiques s'han utilitzat àmpliament per a la determinació de metalls pesants i, actualment, el desenvolupament de sensors amb una resposta voltamperomètrica millorada és un tema de gran interès. En aquest treball es pretén desenvolupar elèctrodes selectius a metalls pesants com, per exemple el Hg(II), per a mostres ambientals a través de la immobilització mitjançant enllaç covalent d'un element de reconeixement com són els èters corona en elèctrodes serigrafiats de carboni prèviament modificats amb grafè.

El control de metales pesados en agua y suelos es crucial para la salud humana y la sostenibilidad ambiental. A nivel traza, algunos metales pesados son esenciales para un funcionamiento metabólico normal, pero a concentraciones más elevadas son altamente tóxicos. Este peligro se ve ampliado por su tendencia a la bioacumulación en tejidos vivos y por su persistencia debido a su inherente no biodegradabilidad. Las técnicas electroanalíticas se han utilizado ampliamente para la determinación de metales pesados y, actualmente, el desarrollo de sensores con una respuesta voltamperométrica mejorada es un tema de gran interés. En este trabajo se pretende desarrollar electrodos selectivos a metales pesados como, por ejemplo el Hg(II), para muestras ambientales mediante la inmovilización por enlace covalente de un elemento de reconocimiento como los éteres corona en electrodos serigrafiados de carbono previamente modificados con grafeno.

Determinació de sulfamides mitjançant anàlisi electroquímica amb elèctrodes serigrafiats i cromatografia de líquids acoblada a espectrometria de masses
Directors: Dra. M. Silvia Díaz i Dr. José Manuel Díaz
En els últims anys ha crescut l'interès en la tecnologia dels elèctrodes serigrafiats per a la producció en massa de sensors a baix cost. Aquests elèctrodes presenten avantatges com flexibilitat en el disseny, fàcil automatització, reproductibilitat, àmplia varietat de materials i cost reduït, en línia amb els requeriments de l'anàlisi de rutina i el cribratge de determinades substàncies. En aquest TFM es desenvoluparà un mètode per a la determinació electroquímica amb elèctrodes serigrafiats d'un dels antibiòtics més freqüentment trobats en les aigües residuals i superficials, donat el seu elevat consum i limitada degradació: el sulfametoxazol. Aquest antibiòtic del grup de les sulfamides comparteix un nucli en comú amb totes elles (més

de 20 compostos diferents). Els grups en comú són electroactius, per la qual cosa s'estudiarà la possible aplicació del mètode no només al sulfametoxazol sinó a altres sulfamides habituals en el medi ambient. Per comparar el mètode desenvolupat s'analitzaran les mateixes mostres ambientals mitjançant la tècnica usual per a sulfamides: la cromatografia de líquids acoblada a espectrometria de masses en tàndem (HPLC-MS/MS).

En los últimos años ha crecido el interés por la tecnología de los electrodos serigrafiados para la producción en masa de sensores a bajo coste. Estos electrodos presentan ventajas como flexibilidad en el diseño, fácil automatización, reproducibilidad, amplia variedad de materiales y coste reducido, en línea con las necesidades del análisis de rutina y el cribado de determinadas sustancias. En este TFM se desarrollará un método para la determinación electroquímica con electrodos serigrafiados de uno de los antibióticos más frecuentemente detectados en aguas residuales y superficiales, dado su elevado consumo y limitada degradación: el sulfametoxazol. Este antibiótico del grupo de las sulfamidas comparte un núcleo común con todas ellas (más de 20 compuestos distintos). Los grupos comunes son electroactivos, por lo que se estudiará la posible aplicación del método no sólo al sulfametoxazol sino a otras sulfamidas habituales en el medio ambiente. Para comparar el método desarrollado se analizarán las mismas muestras ambientales con la técnica usual para sulfamidas: la cromatografía de líquidos acoplada a espectrometría de masas en tándem (HPLC-MS / MS).

QUIMIOMETRIA

Formación y características espectrales de nanoclústers de plata estabilizados por ácidos nucleicos. Aplicación al análisis de DNA
Director: Dr. Raimundo Gargallo
El TFM propone el estudio la estabilidad y características espectrales de los nanoclústers de plata estabilizados por secuencias de DNA ricas en citosina o guanina mediante técnicas espectroscópicas, como la fluorescencia molecular o el dicroísmo circular, y de separación, como la cromatografía de exclusión por tamaño o la electroforesis en gel. En una segunda etapa del TFM, se pretende utilizar los nanoclústers para el desarrollo de métodos analíticos de determinación de DNAs o RNAs

Combinació d'informació de color amb imatge química per a l'estudi de mostres alimentàries i biològiques
Directora: Dra. Anna de Juan
Les imatges químiques hiperespectrals són fotografies de les mostres, en les quals s'associa un espectre sencer a cada píxel de la superfície estudiada. D'aquesta manera, s'obté informació sobre la identitat dels components de les mostres i de la seva distribució en l'espai. Aquesta informació espacial és molt important en alguns contextos, com ara quan es vol valorar si els components d'un producte alimentari estan ben mesclats o quan es vol conèixer la morfologia i composició dels elements d'un teixit biològic. Les tècniques d'imatge hiperespectral poden estar associades a tècniques molt diverses, com infraroig, Raman, fluorescència o espectrometria de masses. D'altra banda, el tipus d'imatge més simple que es pot obtenir de qualsevol mostra és una fotografia amb la informació de color, expressada per les coordenades RGB. La informació de color per si sola no descriu químicament les mostres, però en alguns casos en delimita bé diferents regions i es pot usar potencialment com a informació auxiliar per a una millor diferenciació de les empremtes espectrals de les mostres.

En aquest projecte s'usarà la imatgeria hiperespectral NIR (infraroig proper) en productes alimentaris i es podran usar diferents tècniques hiperespectrals (d'IR mitjà o Raman) per estudiar seccions de teixits biològics. En tots els casos es combinarà la imatge química amb la informació de color per observar si la diferenciació morfològica i química dels components de les mostres millora. La interpretació de la informació proporcionada pels milers d'espectres associats a les imatges químiques i la combinació amb la informació de color es farà mitjançant tècniques quimiomètriques. En aquest projecte s'aprendran tècniques analítiques i quimiomètriques no vistes durant el grau i es podran fer mesures d'imatge en el laboratori de recerca, els Centres Científics i Tecnològics de la UB i a l'ICFO (Institut de Ciències Fotòniques), institut de referència en el desenvolupament i ús de tècniques espectroscòpiques.

Determinació d'amines biogènes i amino àcids per cromatografia de líquids amb i sense derivatització precolumna. Aplicació a la caracterització de vi i cava per mètodes quimiomètrics.
Directors: Dr. Javier Saurina i Dra. Sònia Sentellas
Les amines biògenes estan presents en diferents tipus d'aliments però són especialment abundants en vins, formatges, carn i peix, així com també en productes que s'han fet malbé. En vins i caves, les amines biògenes més abundants són putrescina, etanolamina, histamina, tiramina i cadaverina. En aquest projecte, es durà a terme la determinació d'amines biògenes i els seus precursors, els aminoàcids, en mostres de vins i caves per cromatografia de líquids de fase inversa amb detecció fluorimètrica i d'espectrometria de masses (RP-HPLC-FLD-MS/MS) per un mètode de derivatització precolumna amb clorur de dansil. També s'intentarà desenvolupar un nou mètode analític directe —sense derivatització— per cromatografia de líquids amb mode HILIC i detecció MS/MS (HILIC-HPLC-MS/MS). Els resultats obtinguts s'utilitzaran per a la caracterització de les mostres mitjançant mètodes quimiomètrics.

PHYSCHEM

Variació de la retenció cromatogràfica amb el pH de la fase mòbil en HILIC
Directors: Dr. Martí Rosés i Dr. Xavier Subirats
En cromatografia de líquids la retenció d'anàlits amb propietats àcid/base depèn del grau de ionització i, per tant, del pH de la fase mòbil. En aquest treball s'estudiaran els perfils de retenció de diferents substàncies àcids, bàsiques i neutres amb la variació del pH de l'eluent en sistemes de cromatografia líquida d'interacció hidròfila (HILIC). Addicionalment es caracteritzarà la retenció cromatogràfica mitjançant el model LFER de paràmetres solvatació d'Abraham.

Efecte dels excipients en el perfil de solubilitat dels fàrmacs.
Directores: Dra. Clara Ràfols i Dra. Elisabet Fuguet
En aquest treball s'estudiarà com queda modificada la solubilitat d'un fàrmac amb propietats àcid base en presència d'alguns dels excipients emprats típicament en la formulació de fàrmacs per administració per via oral. En concret, s'estudiarà com afecta la presència de l'excipient en la solubilitat del fàrmac en diferents regions del tracte gastrointestinal.

Determinació de la permeabilitat a través de la pell de productes cosmètics utilitzant membranes artificials i mesures cromatogràfiques.
Directores: Dra. Elisabet Fuguet i Dra. Susana Amézqueta
En el desenvolupament d'un producte cosmètic, un dels paràmetres clau a determinar és la permeabilitat a través de la pell de les substàncies actives, per tal de poder-ne avaluar l'eficàcia i també la seguretat. En aquest treball es determinarà la permeabilitat a través de la pell dels compostos principals d'algunes cremes cosmètiques utilitzant el mètode in vitro anomenat skin-PAMPA, que es basa en l'ús de membranes artificials que simulen la pell. La determinació de la concentració dels compostos a cada banda de la membrana, necessàries per calcular la permeabilitat, es realitzarà mitjançant quantificacions amb tècniques espectroscòpiques i/o cromatogràfiques.

QUESTRAM_R

Desenvolupament d'un mètode per a la quantificació de coeficients de distribució sòlid-líquid de poloni en sòls
Directors: Dr. Àlex Tarancón i Dra. Anna Rigol
El coeficient de distribució sòlid-líquid (K_d) és un paràmetre d'entrada clau en molts models d'avaluació del risc derivat d'un episodi de contaminació, ja que proporciona informació sobre la mobilitat del contaminant. En el marc d'un projecte internacional en el que participa el grup de recerca, un dels objectius és crear una base de dades de valors de K_d de Po-210, un radionúclid d'origen natural, en un nombre elevat de sòls de característiques molt diferenciades i poder proposar valors de K_d vàlids per ser emprats en aquests models. El grup de recerca disposa de mètodes per determinar Po-210 en mostres d'aigua mitjançant tècniques radioquímiques, però la seva quantificació en extractes de sòl, pas necessari per al càlcul de la K_d, pot ser força més complexa per la presència de possibles interferències. L'objectiu del present treball és, per tant, desenvolupar un nou mètode vàlid i robust per quantificar Po-210 en extractes de sòl i calcular-ne els valors de K_d.

Desenvolupament d'una PSresin per a la mesura ràpida de ^{210}Pb
Directors: Dr. Héctor Bagán i Dr. Alex Tarancón
Per tal de garantir la seguretat de l'aigua que consumim, s'han de determinar diversos paràmetres entre els quals hi ha la mesura de diversos elements radioactius. Dintre d'aquests, un dels més habitualment mesurats és el ^{210}Pb que prové de la cadena de desintegració de l'^{238}U present a les roques del llit fluvial. La mesura d'aquestes mostres requereix de mètodes ràpids i amb menor consum de reactius i que presentin una bona separació respecte radionúclids interferents. Una bona alternativa als mètodes clàssics per assolir-ho és l'ús de PSresins, microesferes d'escintil·lació plàstica recobertes d'un extractant selectiu, les quals permeten la separació i mesura en el mateix suport. Per tant, l'objectiu d'aquest treball és el desenvolupament d'una nova PSresin per a la mesura ^{210}Pb i un mètode ràpid que permeti la seva determinació en mostres d'aigua.

Millora de l'eficiència de biocarbons com a sorbents per a la descontaminació d'aigües.
Directors: Dr. Miquel Vidal i Dra. Anna Rigol
La gestió d'aigües contaminades requereix de sistemes per atenuar el seu impacte que, sovint, es basen en l'ús de materials sorbents per retenir els contaminants, essent el carbó activat un dels més emprats. En els darrers anys s'estan investigant materials alternatius més ecosostenibles i barats com són els biocarbons, obtinguts a partir de la piròlisi de restes vegetals.

El grup de recerca té molta experiència en la determinació de paràmetres de sorció en *batch* i recentment ha implementat una tècnica de sorció en continu. Tanmateix, la grandària de partícula del material o característiques operacionals de la tècnica en continu (direcció del flux, volum de material en la columna) poden ser factors clau en la determinació del paràmetre de sorció. En el present projecte es pretén avaluar la influència d'aquests factors per tal de millorar l'eficiència dels biocarbons en l'eliminació de contaminants, concretament lantànids i radionúclids d'origen natural.

BIOANÀLISI

Anàlisi de glicans biomarcadors de càncer per cromatografia de líquids acoblada a l'espectrometria de masses.

Directores: Dra. Victòria Sanz i Dra. Estela Giménez

Les glicoproteïnes son proteïnes que contenen cadenes de carbohidrats unides covalentment a determinats residus de la cadena polipeptídica. Aquests carbohidrats, també anomenats glicans, es poden veure alterats en presència d'algunes patologies. Per aquest motiu, la identificació i quantificació dels glicans en mostres biològiques resulta d'utilitat per al diagnòstic i el seguiment de malalties com el càncer.

Aquest treball té com a principal objectiu desenvolupar mètodes de derivatització de glicans que siguin ràpids, fiables i sensibles per poder analitzar els glicans per cromatografia de líquids (LC) i electroforesi capil·lar (CE) acoblades a l'espectrometria de masses (MS). Primerament, amb un glicà patró com la maltohexosa, s'avaluaran diversos derivatitzants i condicions de reacció mitjançant espectrometria de masses (electrosprai, ESI-MS, i desorció/ionització per làser assistida per matriu, MALDI-MS). Una vegada seleccionat l'agent derivatitzant i optimitzades les condicions de reacció, el mètode establert s'aplicarà a l'anàlisi dels N-glicans de la alfa-1-glicoproteïna àcida humana (hAGP), per LC-MS i CE-MS, en patrons i en mostres biològiques, per tal d'avaluar el seu potencial com a biomarcador de càncer de pàncrees.

Desenvolupament de mètodes de cromatografia de líquids i electroforesi capil·lar acoblades a l'espectrometria de masses i masses en tàndem per a la caracterització de biofàrmacs glicoproteics

Directors: Dr. Fernando Benavente i Dra. Estela Giménez

L'eritropoietina humana (hEPO) és una hormona glicoproteica que estimula la producció de glòbuls vermells a la medul·la òssia, i que també és un reconegut biofàrmac obtingut per tecnologies d'ADN recombinant (eritropoietina humana recombinant (rhEPO)). L'anàlisi dels glicopèptids resultants de la digestió enzimàtica de les glicoproteïnes, és una de les aproximacions més emprades en els estudis de la glicosilació aplicats al control de qualitat dels biofàrmacs glicoproteics, i en el cas de la rhEPO també té un gran potencial en el control del dopatge, per a la detecció del seu ús fraudulent per a la millora del rendiment esportiu. Aquest treball es centrarà en el desenvolupament de metodologies d'anàlisi de glicopèptids de diferents tipus d'rhEPO, emprant LC-MS, CE-MS i MS-MS i tècniques avançades de processament de dades.

Desenvolupament de mètodes de cromatografia de líquids i electroforesi capil·lar acoblades a l'espectrometria de masses i masses en tàndem per a la caracterització de biomarcadors glicoproteics

Directors: Dr. Fernando Benavente i Dra. Laura Pont

Les glicoproteïnes són uns biomarcadors excel·lents per la seva participació en molts processos biològics i perquè alteracions en la seva concentració o en la composició dels seus carbohidrats poden derivar en patologies diverses. És el cas, per exemple, de la glicoproteïna antigen carcinoembrionari (CEA), que és un reconegut biomarcador de càncer colorectal, o la glicoproteïna espícula (Spike, S) del SARS-CoV-2, el virus que causa la COVID-19, que és la principal via d'entrada del virus en les cèl·lules humanes i que juga un paper fonamental en el desenvolupament de la resposta immune. L'anàlisi dels glicopèptids resultants de la digestió enzimàtica de glicoproteïnes biomarcadores és una de les aproximacions més prometedores en els estudis de la glicosilació aplicats a l'establiment de fragments biomarcadors característics de la molècula original. Aquest treball es centrarà en el desenvolupament de metodologies d'anàlisi de glicopèptids de diferents biomarcadors glicoproteics, emprant LC-MS, CE-MS i MS-MS i tècniques avançades de processament de dades.

ChroMS-EnviFood

Determinació de nous retardants de flama halogenats i organofosforats en mostres de interès ambiental mitjançant cromatografia de gasos acoblada a l'espectrometria de masses.

Directors: Dr. Francisco Javier Santos i Dra. Encarnación Moyano

Els retardants de flama s'han utilitzat durant anys com a resposta eficaç per lluitar contra els incendis i prevenir o retardar la combustió de materials tant diversos com tèxtils, plàstics, fusta o components elèctrics. Entre els retardants de flama destaquen els de caràcter halogenat, com els difenilèters polibromats (PBDEs). Encara que aquests compostos s'han utilitzat àmpliament durant anys en una gran varietat d'aplicacions degut a les seves propietats ignifugues, s'ha vist que provoquen efectes tòxics en els esser vius i presenten una elevada persistència i capacitat de bioacumulació a través de la cadena tròfica. Degut a aquests efectes nocius la seva utilització ha estat prohibida per diverses organitzacions internacionals, com la Convenció d'Estocolm, i substituïts per altres que presenten propietats similars, com diversos derivats bromats del benzè, decabromodifeniletà (DBDPE), bis (2-etilhexil)-3,4,5,6-tetrabromo-ftalat (TBPH), alguns norbornens halogenats, com ara el Dechlorane Plus i els seus compostos relacionats, i el esters organofosforats (OPEs). Encara que aquest nous retardants de flama presenten una menor toxicitat, fins al moment la informació que es disposa sobre la seva presencia i distribució en el medi ambient és molt limitada i els mètodes existents no permeten la seva adequada determinació. Per aquesta raó, hi ha un elevat interès per disposar de mètodes analítics ràpids i fiables que permetin conèixer el seu impacte en el medi ambient. L'objectiu del present treball és el desenvolupament d'un mètode analític per a la determinació d'aquestes noves famílies de retardants de flama emprant diferents tècniques de micro-extracció i preconcentració combinades amb cromatografia de gasos-espectrometria de masses (GC-MS). Els mètodes analítics establerts s'aplicaran a la determinació d'aquests compostos en diferents mostres d'interès ambiental per tal de disposar de noves dades sobre la seva presència i distribució en el medi ambient.

Identificació i caracterització de colorants en aliments mitjançant espectrometria de masses amb ionització a pressió atmosfèrica.

Directors: Dra. Encarnación Moyano i Dr. Francisco Javier Santos

Alguns colorants alimentaris són perjudicials per a la salut i han estat catalogats com cancerígens. L'ús d'aquests colorants nocius està prohibit, però es continuen fent servir en pràctiques fraudulentes, la qual cosa constitueix un perill per al consumidor. Per detectar aquest tipus de frau cal desenvolupar mètodes d'anàlisi que permetin als laboratoris de control la detecció ràpida i inequívoca dels colorants prohibits. Per aquest objectiu es fan servir generalment mètodes analítics basats en l'espectrometria de masses. Però, les matrius alimentàries són complexes i requereixen un tractament de mostra laboriós i llarg per fer compatible els extractes amb els sistemes de tècniques cromatogràfiques acoblats a l'espectrometria de masses (LC-MS o de GC-MS). No obstant, en l'última dècada, s'han desenvolupar unes tècniques noves anomenades "Ambient Ionization" que fan possible l'anàlisi directa de mostres amb espectrometria de masses. Així, en aquest projecte s'exploraran algunes d'aquestes tècniques "Ambient MS" (DESI, DART, Paper Spray) per desenvolupar mètodes que permeti la detecció i quantificació de colorants prohibits en matrius alimentàries d'una manera ràpida. S'estudiaran els mecanismes d'ionització, els paràmetres més crítics per a l'òptima ionització, així com la fragmentació per espectrometria en tàndem per a disposar d'informació estructural per a la confirmació. El mètodes es validaran i s'analitzaran mostres d'aliments i de productes de consum sospitosos de contenir colorants prohibits i per tant fraus.

Identificació i caracterització de proantocianidines (PACs) en aliments i productes nutricèutics mitjançant metodologies analítiques basades en espectrometria de masses.

Directors: Dr. Lluis Puignou i Dra. Encarnación Moyano

El consum de fruits vermells (nabiu vermell) presenta efectes beneficiosos i saludables degut al seu valor nutritiu i a les seves propietats terapèutiques. Els extractes naturals d'aquest productes es solen emprar en la preparació de nutricèutics (complements dietètics). Les propietats beneficioses per a la salut (activitat antioxidant i anticancerígena, efectes antibacterians, etc.) semblen estar associades a la presència de flavanols en forma monomèrica o polimèrica que donen lloc a les proantocianidines (PACs). Encara que aquests compostos també es troben en molts altres productes naturals com el te, xocolata, raïm i altres nabius, algunes PACs només es troben en els nabius vermells i hi ha estudis que han relacionat l'especificitat terapèutica dels nabius vermells amb l'estructura molecular d'aquestes PACs.

Generalment els mètodes d'anàlisi actuals són molt poc selectius respecte a la naturalesa i estructura química de les PACs, la qual cosa fa necessari disposar de metodologia analítiques més eficaces i fiables per tal de identificar i caracteritzar aquests compostos i detectar possibles fraus en la preparació de nutricèutics.

En aquet Treball Final de Màster, es desenvoluparà un mètode per a la identificació i caracterització de PACs en preparats nutricèutics emprant la tècnica "Direct Analysis in Real Time-Mass Spectrometry" (DART-MS). Es compararan les capacitats d'aquest mètode d'anàlisi directe amb les dels mètodes basats en cromatografia de líquids acoblada a l'espectrometria de masses (LC-MS). Amb el mètode de DART-MS desenvolupat s'analitzaran mostres de productes nutricèutics sospitosos de ser fraudulents.

UHPLC-MS/MS anàlisi de compostos orgànics d'elevada mobilitat en el medi aquàtic.
Director: Dra. Encarnación Moyano i Dr. Francisco Javier Santos
En els darrers anys, la presencia de compostos orgànics d'elevada mobilitat en entorns aquàtics ha suscitat un gran interès i preocupació degut a que són substancies de caràcter iònic, d'elevada polaritat i baixa capacitat de degradació i provocant efectes tòxics en els organismes vius. Aquests compostos s'introdueixen en el medi aquàtic a través dels abocaments d'aigües residuals d'origen industrial i presenten un temps de vida mitjana en aigües superior a 40 dies i uns coeficients de distribució octanol-aigua molts baixos (log K_{ow} < 4,5). A causa de les seves propietats, aquests compostos poden ser parcialment eliminats per les plantes potabilitzadores que disposen de tecnologies avançades de tractament d'aigua i, per tant, la seva presència a les aigües tractades pot suposar un risc potencial per la salut dels consumidors. A causa de la seva elevada polaritat, aquests compostos són difícils d'analitzar en mostres d'aigua i els mètodes existents només permeten l'anàlisi d'un nombre límits de compostos. Per tant, hi ha una gran necessitat de disposar de mètodes d'anàlisi fiable i senzill que permetin l'adequada identificació i determinació d'aquests compostos en aigües de diferent procedència i avaluar l'eficàcia dels processos de tractament d'aigua avançats.

En aquet Treball Final de Màster, es desenvoluparà un mètode per a la identificació i caracterització de compostos orgànics d'elevada mobilitat en aigües basats en l'ús de la cromatografia de líquids acoblada a l'espectrometria de masses. Atès que aquests compostos presenten un ampli rang polaritat, s'avaluaran diferents mètodes de tractament de mostra i s'estudiarà la seva separació cromatogràfica mitjançant l'ús de columnes en fase inversa (RPLC) i d'interacció hidròfila (HILIC). El mètode desenvolupat s'aplicarà a l'anàlisi de aigües d'entrada i sortida de diferents plantes de tractament d'aigües residuals i potabilitzadores.

CSIC -IDAEA

Application of HRMS-based non-target strategies to determine seawater intrusion tracers and submarine groundwater discharge in coastal aquifers
Directors: Dr. Pablo Gago i Dr. Ruben Gil

N, S, and O containing polyciclic aromatic hydrocarbons in the oceanic seawater and atmosphere
Directors: Dra. Maria Vila-Costa i Dr. Jordi Dachs

CO2 dynamics, vegetation and agriculture, particulate matter, NO2 and organic molecules in urban and rural schools relevant to the development of sustainability and climate change adaptation initiatives
Directora: Dra. Belen Martrat

Chemometric strategies for the identification of potential biomarkers on metabolomic studies
Director: Dr. Joaquim Jaumot

Analysis of chemical risks associated to the use of regenerated wastewater for irrigation in agriculture.
Directora: Dra. Miren López de Alda