**Propostes de Treballs Finals de Màster (TFM) 17-18**

**Equilibris en solució i Quimiometría**

**- Desenvolupament de nanopartícules de plata estabilitzades amb cadenes de DNA**

Director: Raimundo Gargallo

*Les nanopartícules de plata són agregats d’unes pocs àtoms de plata estabilitzats per diferents molècules, com ara polímers. Aquests agregats són estables en solució en determinades condicions experimentals i presenten una sèrie de característiques òptiques que els fan de molt interès en Nanotecnologia. El treball final de màster proposat planteja l’estudi de l’efecte estabilitzador de diferents seqüències de DNA sobre les nanopartícules. En una primera etapa, es preveu sintetitzar les seqüències i caracteritzar-les. En una segona etapa, es preveu estudiar l’efecte que té la seqüència en la formació i estabilització de les nanopartícules de plata fent servir la fluorescència molecular.*

**- Determinació d’àcids orgànics en mostres de cava per cromatografia de líquids amb detecció UV-visible**

Director: Javier Saurina

*La determinació d’àcids orgànics de cadena curta en vins, en particular en vins escumosos o caves, és clau en el seu control de qualitat. Àcids com tartàric, cítric, màlic, làctic o acètic són indicadors d’estabilitat, vinificació i/o estat de conservació dels caves i, per tant, tenen gran importància tecnològica. Els mètodes analítics utilitzats per les empreses vitivinícoles són complexos i poc acurats. En aquest sentit, es requereixen nous mètodes analítics més ràpids, eficaços i fiables per a la quantificació d’aquests anàlits.*

*En aquest projecte de màster es pretén establir un nou mètode de cromatografia de líquids amb detecció per espectroscòpia UV-Vis per a la determació simultània dels àcids orgànics més importants en l’elaboració dels caves. S’optimitzaran les condicions de separació mitjançant els modes de fase inversa i HILIC (hydrophilic interaction chromatography). Es validarà el mètode i s’establiran els paràmetres de qualitat. El mètode s’aplicarà a la determinació d’àcids en mostres de diversos caves comercials.*

**Bioanálisis**

**- Desenvolupament de metodologies analítiques per a la caracterització de biofàrmacs emprats en malalties neurodegeneratives mitjançant tècniques de separació acoblades a l’espectrometria de masses**.

Directors: Dra. Victòria Sanz i Dra. Estela Giménez.

*La neuroEPO és una glicoproteïna generada com a subproducte durant la síntesis de l’eritropoetina recombinant humana (rhEPO), que s’està estudiant donat el seu potencial com a biofàrmac pel tractament dels ictus cerebrals i altres malalties neurodegeneratives. En aquest treball, es desenvoluparan diferents mètodes d’anàlisi a nivell de glicoproteïna intacta, glicopèptids i glicans per caracteritzar la glicosilació de la neuroEPO emprant cromatografia de líquids capil·lar i electroforesi capil·lar acoblades a l’espectrometria de masses. Aquests estudis permetran determinar de manera fiable les diferencies de glicosilació entre la neuroEPO y la rhEPO amb l’objectiu de conèixer millor el paper biològic de la neuroEPO en el sistema nerviós, i dissenyar estratègies terapèutiques pel tractament de danys cerebrals i malalties neurodegeneratives.*

**- Noves estratègies per a la preconcentració en línia de biomarcadors patològics en mostres biològiques emprant tècniques de separació acoblades a l’espectrometria de masses**.

Directors: Dra. Victòria Sanz i Dr. Fernando Benavente.

*La finalitat principal del projecte és l’optimització i l’establiment de metodologies analítiques innovadores per a la preconcentració, purificació, separació, caracterització i determinació de pèptids, proteïnes i microRNAs biomarcadors de malalties neurodegeneratives o càncer en fluids biològics (p.ex. sèrum o plasma) emprant mètodes de pretractament de mostra acoblats en línia a les tècniques de separació d’alta resolució i l’espectrometria de masses (LC-MS i CE-MS). Les principals dificultats per tal d’assolir aquest objectiu rauen en la baixa concentració a la que es troben els compostos d’interès, en la complexitat de les mostres i en la microheterogeneïtat estructural de les molècules estudiades (p. ex. proteïnes amb diverses proteoformes degudes a les modificacions postraduccionals o microRNAs que poden tenir modificacions postranscripcionals).*

**PhysChem**

- **Retenció de compostos bioactius en cromatografia de líquids en columnes HILIC.**

Directors: Xavier Subirats i Martí Rosés.

- **Avaluació de les interaccions entre fàrmacs antidepressius i proteïnes mitjançant electroforesi capil·lar i fluorescència molecular.**

Directors: Susana Amézqueta i Clara Ràfols.

- **Comportament de fàrmacs en fluids biològics simulats.**

Directors: Elisabet Fuguet i Clara Ràfols.

 - **Efecte del polimorfisme en la solubilitat de principis actius farmacèutics**

Directors: Elisabet Fuguet, Xavier Subirats

**Fluorescència**

- **Anàlisi de polifenols d’origen natural mitjançant cromatografia de líquids.**
Directora: Mercè Granados

*Els polifenols es troben presents, de forma natural, a la fruita i verdura. Aquests compostos són els agents antioxidants més destacats en la dieta humana. Les seves propietats antioxidants els hi confereixen un caràcter beneficiós per a la salut.*

*Aquest TFM està centrat en l’avaluació de metodologia basada en l’ús de la cromatografia de líquids amb diferents sistemes de detecció (UV, fluorimetria, espectrometria de masses) per a l’anàlisi de compostos polifenòlics en extractes de fruites.*

- **Determinació de la matèria orgànica dissolta en aigua mitjançant cromatografia de líquids amb detecció per absorció UV i fluorescència molecular.**
Director: José Luis Beltrán

*Un dels problemes en les estacions de tractament d’aigües potables (ETAP) és el contingut en matèria orgànica dissolta (MOD), que es troba tant en aigües superficials com subterrànies. La MOD, a més de tenir certes característiques organolèptiques, dona lloc a una sèrie de subproductes en les diferents etapes de purificació, i per tant, ha de ser eliminada en les ETAP abans de passar posteriorment al consum públic.*

*En aquest projecte hom pretén determinar la MOD en les diferents etapes del procés de purificació, mitjançant cromatografia líquida d’exclusió (HPLC-SEC), emprant detectors d’absorció molecular (UV) i i de fluorescència molecular.*

- **Anàlisi de residus de fàrmacs veterinaris en matrius alimentàries líquides mitjançant LC-MS/MS**

Directora: Mercè Granados

*L’objectiu l d’aquest treball és el desenvolupament de metodologia per a l'anàlisi de residus de fàrmacs veterinaris en matrius alimentàries líquides, utilitzant la cromatografia de líquids amb diferents tècniques d’espectrometria de masses, de baixa i alta resolució. El mètode ha de proporcionar resultats d’elevada fiabilitat, per a ser aplicat al control oficial d’aliments, i al mateix temps ser el més senzill i ràpid que sigui possible.*

*D’entrada es considerarà l’opció d’una metodologia comuna als diferents tipus de matrius (ous, llet, etc); en el cas que no sigui adequada per a la seva aplicació a totes les matrius, es plantejaran modificacions que permetin l’anàlisi de les diferents matrius.*

*La part experimental d’aquest TFM es farà al Laboratori de l’Agència de salut Pública de Barcelona.*

**CECEM**

**- Determinació de benzofenones en aliments envasats mitjançant cromatografia de líquids d’ultra elevada eficàcia acoblada a l’espectrometria de masses en tàndem (UHPLC-MS/MS)**

Directora: Encarnación Moyano

**- Noves estratègies per a la determinació de contaminants orgànics polifluorats en mostres ambientals i alimentàries per cromatografia de gasos–espectrometria de masses.**

Director: Francisco Javier Santos

*En els últims anys, la utilització de compostos polifluorats de caràcter neutre ha augmentat considerablement en aplicacions industrials i productes de consum degut a la seves propietats hidrofòbiques i antiadherents, i al seu ús com a substituts d’altres compostos d’elevada toxicitat, com l'àcid perfluorooctanoíc (PFOA) i el sulfonat de perfluooctà (PFOS). La presencia d’aquest compostos en el medi ambient suposa un risc per a la salut dels essers vius, ja que són precursor d’altres compostos perfluorats d’elevada persistència i perillositat. L'objectiu del present projecte és el desenvolupament de mètodes analítics ràpids i fiables per la determinació de diferents famílies de compostos polifluorats semi-volàtils, entre els quals es troben els fluorotelómeros alcohols i olefines, les N-alquil perfluorooctano sulfonamides i els N-alquil perfluorooctano sulfonamido etanoles, en mostres ambientals i alimentaries, 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 ambientals i alimentaries per tal de conèixer la seva presència i distribució en aquests tipus de matrius.*

**- Determinació de Polifenols i de Capsaicinoides Mitjançant Cromatografia de Líquids d'Ultraelevada Eficàcia Acoblada a l'Espectrometria de Masses en Tàndem (UHPLC-MS/MS) per a la Caracterització i Classificació de Pebres Vermells amb Denominació d'Origen Protegida (DOP).**

Director: Oscar Núñez

**Questram R**

**- Determinació de 239+240Pu en mostres biològiques per donar resposta rápida en situacions d'emergencia**

Directors: Montserrat Llauradó i Jordi Fons

*En aquest treball es desenvoluparà i validarà metodologia analítica ràpida per a la determinació d’isòtops de plutoni en mostres biològiques per tal d’avaluar la dosi absorbida pel personal contaminat després d’una situació accidental. D’aquesta forma es podrien iniciar tractaments mèdics basats en la quelació que evitarien que el plutoni es retingui en els ossos del personal contaminat.*

*En el desenvolupament de la metodologia caldrà optimitzar el pretractament de la mostra que es basarà en una etapa de mineralització, una de concentració i la preparació del vial de comptatge. Finalment la mesura es realitzarà per espectrometria d’escintil·lació líquida emprant la desconvolució d’espectres per a la quantificació dels radionúclids d’interès.*

- **Preparació d'una resina escintil·ladora selectiva per l'anàlisi de Ni-63**

Directors: Héctor Bagán / Alex Tarancón

*Les estructures metàl·liques dels reactors nuclears inclouen níquel, que durant el funcionament de les centrals, s’activa formant isòtops de vida llarga com és el cas del 63Ni. La mesura d’aquest isòtops és clau en el procés de desmantellament de les centrals nuclears per un correcta i eficient gestió del residus que es generen. En el cas particular del 63Ni, es presenta una dificultat addicional donat que és un emissor beta de baixa energia. Una tècnica per a la mesura selectiva de la radioactivitat d’emissors beta és l’escintil·lació plàstica en forma de microesferes selectives. En aquesta tècnica certes substancies fluorescents s’encapsulen en un polímer i el resultat, amb forma de microesfera, és recobert amb un extractant selectiu respecte l’analit que es vol analitzar. D’aquesta forma el radionúclid es extret i pre-concentrat per la resina selectiva i mes pot ser mesurat directament gracies a les propietats fluorescents del polímer que suporta la resina. L’objectiu d’aquest treball és el desenvolupament d’una resina escintil·ladora plàstica per a la separació i mesura de 63Ni en mostres procedents de instal·lacions radioactives.*

**- Ús de biochars com a sorbents per a la gestió d’aigües i sòls contaminats**

Directors: Anna Rigol i Miquel Vidal

*Alguns materials com el biochar, o altres subproductes d'origen orgànic, s’han mostrat adequats per a l’eliminació de metalls pesants i contaminants orgànics presents en aigües i poden arribar a ser una alternativa ecològica a sorbents tradicionals, més cars, com el carbó activat. L'eficàcia d'aquests sorbents depèn del seu origen, de la seva porositat i superfície específica, del tipus de contaminant que s'ha d'eliminar i de les condicions en què es produeix la sorció (ex. composició i pH de la solució aquosa), per la qual cosa resulta útil obtenir dades de sorció de contaminants, tant d’origen orgànic com inorgànic, en aquests materials, així com modificar-los (ex., canvi de condicions de piròlisi, augment porositat i superfície específica, augment del nombre de grups funcionals polars) per tal que la sorció dels contaminants sigui més eficaç.*

**- Desenvolupament i aplicació de metodologia analítica per l’estudi d’Obres del Patrimoni: datació d’escultures de Benin i anàlisi de manuscrits il·luminats del s. XII i XIII.**

Directors: José F. García i Héctor Bagán

*Els objectes del patrimoni cultural presenten unes característiques singulars que requereixen del desenvolupament de metodologia analítica específica per a la seva caracterització material.*

*Aquest treball es centrarà en l’estudi de dos tipus d’objectes i problemàtiques específiques: la datació d’escultures metàl·liques del regne de Benin i l’anàlisi de les miniaturares il·luminades de manuscrits del s. XII i XIII.*

*En la datació de les escultures metàl·liques de Benin, estudiarem, amb la col·laboració del Museu dels Cinc Continents de Munich, la viabilitat de l’aplicació d’un mètode de datació basat en el 210Pb prèviament desenvolupat. En l’anàlisi de les miniatures il·luminades, estudiarem les miniatures del Liber Feudorum Maior (de l’Arxiu de la Corona d’Aragó) caracteritzat per Fluorescència de Raigs X amb el desenvolupament d’un sistema de replicats transversals.*

**Questram M**

**- Preparació de nous patrons per a l’especiació d’arsènic en algues comestibles mitjançant HPLC-ICP-MS.**

Directors : Dra. Angels Sahuquillo i Dr. José Fermín López

*La importància de la determinació d’espècies d’arsènic en aliments queda palesa en la legislació vigent que 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 d’aquestes espècies. En aquest treball es pretén implementar una metodologia analítica per aïllar arsenosucres a partir de mostres reals seleccionades prèviament i procedir a la seva caracterització mitjançant espectrometria de masses. En tots els casos, la determinació d’espècies d’arsènic es durà a terme mitjançant HPLC-ICP-MS.*

**- Especiació d’arsènic en productes de la pesca mitjançant HPLC-ICP-MS: desenvolupament metodològic.**

Directors : Dra. Angels Sahuquillo i Dr. José Fermín López.

Aquest treball es durà a terme en col·laboració amb el Servei de Química del Laboratori de l’Agència de Salut Pública de Barcelona (ASPB).

*Per a l’estimació del risc per la salut associat a la ingesta d’arsènic, cal disposar de dades analítiques fiables de les espècies d’arsènic presents als aliments, essent l’arsènic inorgànic (iAs: As (III) + As (V)) la forma més perillosa degut a la seva toxicitat. Mentre que per cert tipus de matrius alimentàries s’ha demostrat que la quantificació d’iAs és independent del mètode d’anàlisi emprat, la situació no és la mateixa en altres matrius com els productes de la pesca.*

*En aquest treball es durà a terme un estudi sistemàtic que permeti l’establiment de mètodes d’anàlisi que proporcionin resultats comparables al mètode de referència mitjançant HPLC-ICP-MS en matrius de bivalves i mol·luscs de composicions i proporcions relatives entre espècies d’arsènic diferents. Addicionalment, i amb l’objectiu de disposar d’una mostra caracteritzada per a la comparació de mètodes analítics, es durà a terme un estudi de viabilitat per a la preparació d’un material de referència.*

- **Estudis dels mecanismes de migració d’antimoni en PET per ús alimentari.**

Directors : Dra. Angels Sahuquillo i Dr. José Fermín López

*El tereftalat de polietilè (PET) és el plàstic més utilitzat per l’envasat d'aliments. Una de les substàncies més emprades com a catalitzador en la fabricació de PET és el triòxid d'antimoni (Sb2O3) que origina concentracions residuals en PET. Tot i que les concentracions d’antimoni en begudes envasades en PET sol ser inferior als valors recomanats per aigua de beguda a la Unió Europea (5 g·L-1), la temperatura i temps d’emmagatzematge poden produir un ràpid alliberament d’antimoni a la matriu, tal i com demostren estudis previs al grup de recerca.*

*En aquest treball s’estudiarà la migració d’antimoni des de diferents tipus de PET aplicant diferents tipus de test de lixiviació. Els continguts totals i d’espècies d’antimoni es determinaran mitjançant mètodes basats en ICP-MS i HPLC-ICP-MS, respectivament.*

**Electroanàlisis**

Línees de investigació en la web:  <http://www.ub.edu/dqaelc/recerca.html>

- **Determinació de productes bioactius per a la caracterització de mostres de pebre vermell mitjançant cromatografia de líquids amb detecció amperomètrica.**
Directors: Núria Serrano i Oscar Núñez

- **Determinació de residus farmacèutics per voltamperometria i cromatografia de líquids.**
Directors: José Manuel Díaz i Núria Serrano

**- Determinació voltamperomètrica de residus metàl·lics en medicaments.**
Director: Cristina Ariño

- **Filtres solars i productes de transformació en el medi ambient: Estudi mitjançant tècniques electroquímiques i cromatografia  de líquids acoblada a espectrometria de masses**
Directors: José Manuel Díaz i Sílvia Díaz (IDAEA-CSIC).

**CSIC**

**- Estudio de la biodegradación de pesticidas apolares mediante los hongos. *Trametes versicolor.***

Directora: Ethel Eljarrat

**- Exploració de canvis i transformacions de teixits biològics mitjançant espectrometria de masses d'imatges (MSI)**

Director: Romà Tauler

**- Determinación de contaminantes orgánicos en lagos de alta montaña del Pirineo catalán.**

Directors: Barend van Drooge y Pilar Fernández

**- Estudi metabolòmic i fenotípic dels efectes d’agents estressants ambientals en cultius d’espècies vegetals.**

Directors: Dra. Carmen Bedia i Dr. Joaquim Jaumot

**- Disrupción endocrina en el crustaceo *Daphnia magna*. Determinación analítica de neurotransmisores y otras hormonas por LC-MS/MS.**

Directors: Cristian Gómez Canela y Carlos Barata

**- Uso de la cromatografia liquida acoplada a la espectrometria de masas de alta resolución para la determinación de la distribución y metabolismo de fármacos en lechugas cultivadas en invernadero**

Directores: Nicola Montemurro y Sandra Perez Solsona

**- Fiabilidad  y nivel de confianza de la assignación por LC-HRMS /AMM en el análisis  de desconocidos en muestras ambientales**Directors:   Josep Caixach i Cintia Flores
Tutor : Encarna Moyano

**Campus Torribera.**

- **Determinació de Fenoximetilpenicil.lina i els seus metabolits en múscul i fetge de pollastre per LC-MS (Campus de l’Alimentació de Torribera).**

Directors: C. Minguillón, D. Barrón

El treball es desenvoluparia al Campus Torribera.

- **Aplicació de l’espectrometria de masses per a l’autenticació d’aliments (Campus de l’Alimentació de Torribera).**

Directors: S. Vichi, D. Barrón

El treball es desenvoluparia al Campus Torribera.

**AGBAR**

**- Anàlisi d’Àcids Haloacètics en aigües potables per cromatografia de líquids acoblada a espectrometria de masses en tàndem**.

Laboratori de Química Orgànica d’ Aigües de Barcelona
Director: Dra Mª Rosa Boleda
Tutor : Dra Encarnación Moyano

El treball es desenvoluparia al Laboratori de Química Orgànica d’Aigües de Barcelona.