

Línies de recerca i professorat adscrit a aquestes línies

Programa de doctorat Química Analítica i Medi Ambient (HDK15)

Contaminants orgànics en el medi ambient – 101303

En aquesta línia s'estableix i es valida metodologia analítica per determinar nous contaminants orgànics en mostres procedents dels diferents compartiments ambientals i s'estudia la presència, origen, interacció, transport i transformació de compostos orgànics naturals i antropogènics en el medi. Igualment s'avaluen procediments d'eliminació de contaminants i s'estudia la formació de subproductes i metabòlits. Dins d'aquesta línia també s'identifiquen i s'estudien compostos traçadors del canvi climàtic en el passat i s'avalua la toxicitat de contaminants orgànics i el seu efecte sobre la genòmica, lipidòmica i metabonòmica d'organismes vius.

Les tècniques de referència per aquests estudis són la cromatografia de gasos i la de líquids acoblades a l'espectrometria de masses.

Investigadors adscrits:

Beltrán Abadía, Josep Lluís; de Juan Capdevila, Anna; Díaz Cruz, José Manuel; Granados Juan, Mercè; Moyano Morcillo, Encarnación; Núñez Burcio, Oscar; Puignou García, Lluís; Rigol Parera, Anna; Santos Vicente, Fco. Javier; Serrano Planas, Núria; Vidal Espinar, Miquel; Abad Holgado, Esteban; Barata Martí, Carlos; Barceló Culleres, Damià; Bayona Termens, Josep Maria; Díaz Cruz, Sílvia; Díez Salvador, Sergi; Eljarrat Esebag, Ethel; Farré Urgell, Marinel·la; Fernández Ramón, M. Pilar; Grimalt Obrador, Joan; Lacorte Bruguera, Sílvia; López de Alda Villaizán, Miren; Marco Colas, M. Pilar; Minguillón Bengochea, M. Cruz; Pérez Solsona, Sandra; Raldua Pérez, Demetrio

Contaminants inorgànics i radioquímics en el medi ambient - 101304

En aquesta línia s'investiga l'especiació i biodisponibilitat de metalls pesants, lantànids i metal·loides en mostres ambientals, mitjançant l'optimització del pretractament de la mostra i la mesura per tècniques de separació acoblades amb tècniques espectroscòpiques o electroquímiques. A més, s'estableixen nous mètodes radioquímics més selectius, que generin menys residus i que millorin la determinació de paràmetres de cribratge. També s'examina la interacció de contaminants inorgànics i radioquímics en matrius d'interès ambiental (sòls; sediments; fangs de depuradora; biochars) mitjançant el desenvolupament i l'ús d'experiments de sorció-desorció i de difusió. Els resultats d'aquests estudis presenten aplicacions rellevants en camps mediambientals com ara la remediació de sòls contaminats, l'emmagatzematge de residus radioactius o la valorització de residus. Les activitats es completen amb estudis de viabilitat i desenvolupament de nous materials de referència.

Investigadors adscrits:

Ariño Blasco, Cristina; Bagán Navarro, Héctor; Díaz Cruz, José Manuel; Esteban Cortada, Miquel; García Martínez, José Fco.; López Sánchez, José Fermín; Rigol Parera, Anna; Sahuquillo Estrugo, Àngels; Tarancón Sanz, Alex; Vidal Espinar, Miquel; Díez Salvador, Sergi; Minguillón Bengochea, M. Cruz; Moreno Pérez, Teresa; Querol Carceller, Xavier; Viana Rodríguez, Mar

Caracterització de substàncies orgàniques d'interès biològic i ambiental - 101305

En aquesta línia es desenvolupen mètodes de caracterització físico-química de fàrmacs, d'àcids nucleics i altres substàncies bioactives. S'utilitzen sistemes cromatogràfics, electroforètics, potenciomètrics, espectrofotomètrics i calorimètrics per a la caracterització de l'acidesa, lipofilicitat, solubilitat i interaccions proteïna-fàrmac, propietats que determinen el comportament i distribució dels compostos en estudi. També es procedeix a l'elucidació estructural de fàrmacs i altres substàncies bioactives mitjançant espectrometria de masses i, per altra banda, s'estableixen models per a l'estimació de l'activitat biològica dels compostos esmentats.

Investigadors adscrits:

Amézqueta Pérez, Susana; Barbosa Torralbo, José; Barrón Bueno, Dolores; Beltrán Abadía, Josep Lluís; Benavente Moreno, Fernando; Fuguet Jordà, Elisabet; Gargallo Gómez, Raimundo; Giménez López, Estela; Ràfols Llach, Clara; Rigol Parera, Anna; Rosés Pascual, Martí; Sanz Nebot, Victoria; Subirats Vila, Xavier; Alfonso, Ignacio

Substàncies orgàniques i bioactives en matrius biològiques i alimentàries - 101306

En aquesta línia s'estableix metodologia analítica per a separar, identificar i determinar substàncies orgàniques i organometàl·liques en mostres alimentàries i biològiques. Aquestes metodologies s'orienten, d'una banda, a l'àmbit de la seguretat alimentària i la caracterització d'aliments amb la determinació i confirmació de contaminants, residus, additius i substàncies endògenes dels aliments. D'altra banda, en l'àmbit de la bioanàlisi, es caracteritzen i determinen pèptids, proteïnes, glicoproteïnes i altres substàncies bioactives d'interès farmacològic, clínic i forense. Les tècniques de referència emprades per aquests estudis són les tècniques de separació (cromatografia de gasos, cromatografia de líquids i electroforesi capil·lar) acoblades a l'espectrometria de masses.

Investigadors adscrits:

Barbosa Torralbo, José; Barrón Bueno, Dolores; Benavente Moreno, Fernando; Giménez López, Estela; Granados Juan, Mercè; Hernández Cassou, Santiago; López Sánchez, José Fermín; Moyano Morcillo, Encarnación; Núñez Burcio, Oscar; Puignou García, Lluís; Sahuquillo Estrugo, Àngels; Santos Vicente, Fco. Javier; Sanz Nebot, Victoria; Saurina Purroy, Javier; Serrano Planas, Núria; Barceló Culleres, Damià; Eljarrat Esebag, Ethel; Fernández Ramón, M. Pilar; Galve Bosch, Roger; Lacorte Bruguera, Sílvia; Marco Colas, M. Pilar; Pérez Solsona, Sandra; Porte Visa, Cinta; Salvador Vico, Juan Pablo

Desenvolupament de mètodes quimiomètrics i aplicació a problemes analítics - 101307

En aquesta línia es desenvolupen mètodes quimiomètrics d'exploració i de resolució multivariant per analitzar mesures instrumentals complexes i dades fusionades multitécnica o multiexperiment. També s'estudia la modelització de processos d'interès biològic i ambiental a partir de dades electroquímiques, cromatogràfiques i espectroscòpiques. A més s'estableixen i validen Relacions Quantitatives Estructura/Propietat/Activitat (QSAR, QSPR, QPAR). Des del punt de vista dels camps d'aplicació, s'analitzen dades -òmiques d'interès ambiental, recollides en plataformes instrumentals molt diverses (GC, LC, NMR, micromatrius de DNA, ...). Un altre àrea d'interès és l'adquisició i tractament d'imatges hiperespectrals per a la caracterització d'obres d'art i de mostres d'interès (bio)químic i alimentari. També s'usa la quimiometria en problemes associats a l'estudi dels aliments, on s'analitzen, classifiquen i autentiquen mostres agroalimentàries.

Investigadors adscrits:

Amézqueta Pérez, Susana; Ariño Blasco, Cristina; Bagán Navarro, Héctor; de Juan Capdevila, Anna; Díaz Cruz, José Manuel; Esteban Cortada, Miquel; Fuguet Jordà, Elisabet; García Martínez, José Fco.; Gargallo Gómez, Raimundo; Hernández Cassou, Santiago; Núñez Burcio, Oscar; Ràfols Llach, Clara; Rosés Pascual, Martí; Saurina Purroy, Javier; Jaumot Soler, Joaquim; Tauler Ferré, Romà