

Editorial

Quan s'acaba l'any, un cop més, la REVISTA DE LA SOCIETAT CATALANA DE QUÍMICA publica un número que ja està disponible a la xarxa. Hi trobareu un recull d'articles que no són res més que un reflex de l'activitat investigadora de la química a casa nostra. En aquest número del 2016, destaca un conjunt de treballs escrits per joves investigadors (sobretot estudiants de doctorat o postdoctorals) que han participat en la XIV Trobada de Joves Investigadors dels Països Catalans, que es va celebrar els dies 3, 4 i 5 de febrer de 2016 a Perpinyà, i que han destacat en algun dels diferents simposis celebrats. En aquests articles, de temàtiques ben diverses, ens expliquen la seva feina i ens acompanyen per camps de la química que potser no ens són familiars. A més d'aquesta alevada jove, trobareu alguns articles d'investigadors senyors i, finalment, la secció habitual de «Químics catalans al món» i una ressenya de les activitats més destacades de la nostra Societat al llarg del 2016.

L'edició d'enguany s'inicia amb el treball de Lluís Raich i la doctora Carme Rovira «Desxifrant mecanismes enzimàtics per mitjà d'eines computacionals: implicacions biotecnològiques en l'estudi de glicosidases», que explica alguns exemples d'èxit en l'ús de les eines computacionals per determinar mecanismes de reacció enzimàtics i proposar noves estructures millorades dels enzims estudiats. La trajectòria investigadora del grup de la doctora Rovira impressiona per la quantitat i la qualitat dels treballs generats que han estat recollits en revistes de primer nivell.

A continuació, trobarem un conjunt de vuit articles d'investigadors joves que van ser premiats per les seves presentacions orals en els diferents simposis de la XIV Trobada de Joves Investigadors dels Països Catalans que abans citàvem. Aquest material constitueix, sens dubte, el gros de la REVISTA d'enguany.

El primer és «Nous mètodes de captura i separació de CO₂ aplicables a processos industrials» i tracta d'una aplicació de la química computacional ben diferent de la de la doctora Rovira de l'article anterior. Un dels autors, Gerard Alonso, va ser el guanyador del simposi *Teoria i modelatge* de la XIV Trobada de Joves. El treball explica com un grup de químics del Departament de Ciència de Materials i Química Física de la Universitat de Barcelona, liderat pel professor Sayós, busquen *in sili-*

co les millors zeolites i materials afins amb una porositat òptima per retenir CO₂ atmosfèric. Sens dubte, la recerca d'una forma efectiva d'eliminar CO₂ i altres gasos d'efecte d'hivernacle és un objectiu de gran rellevància i actualitat al qual es dediquen grans esforços actualment. L'estudi computacional marca els paràmetres estructurals més prometedors (com ara la relació Si/Al) per a l'objectiu buscat.

Tot seguit trobarem l'article «Fotocatàlisi amb nanopartícules d'or basada en efectes plasmònics», que recull la presentació oral de Marc Padilla, guanyador del simposi *Materials i química de l'estat sòlid*. Ell mateix, i els coautors José Luis Bourdelande i Jordi Hernando, de la Universitat Autònoma de Barcelona, ens donen una idea de la seva recerca sobre les peculiars propietats òptiques que poden presentar les nanopartícules d'or i la seva aplicació com a potencials fotocatalitzadors. Els autors expliquen els notables avenços aconseguits en el seu laboratori.

Del simposi *Metodologia sintètica de compostos orgànics i inorgànics* ens arriben dos treballs. El primer, «Avenços cap a la síntesi de les formidolides B i C», té com a autors Alejandro Gil, Fernando Albericio i Mercedes Álvarez, de la Universitat de Barcelona i amb seu al Parc Científic. Es tracta d'un treball sobre la síntesi al laboratori d'uns productes orgànics d'estructura complexa, les formidolides, que s'aïllen en quantitats ínfimes d'una esponja que viu a l'oceà Índic. L'interès rau en la intensa activitat anticancerosa d'aquests nous compostos trobats per l'empresa PharmaMar, SA, que col·labora en el projecte. La font natural no pot proporcionar prou material per a les proves clíniques i el grup del doctor Albericio i la doctora Álvarez intenta suplir aquesta mancança amb una síntesi competitiva en els seus laboratoris. El projecte es troba força avançat i aviat en seran visibles els fruits. El segon treball, «A new class of purely inorganic ligands: carboranylphosphinic acids», d'Elena Oleshkevich, Francesc Teixidor i Clara Viñas, té un caire molt diferent i pertany a l'àmbit de la química inorgànica. La primera autora també ha estat premiada per la seva presentació al mateix simposi. Els autors descriuen la funcionalització de diferents carborans (compostos de tipus clúster de fórmula C₂B₁₀H₁₂) en forma de fosfinats o fosfonats que són aïllats i caracteritzats. Aquests nous compostos presenten diferents tipus d'isomeria a causa de la seva particular estructura i es comporten també com a lligands inorgànics aniònics capaços de coordinar-se amb metalls en medi aquós.

A continuació, ens arriba, de Francesca Peccati, Xavier Solans Monfort i Mariona Sodupe, de la Universitat Autònoma de Barcelona, l'article «La química computacional aplicada al disseny de marcadors fluorescents per a la diagnòsi de la malaltia d'Alzheimer», on es descriu una nova aplicació de la química computacional en sistemes biològics complexos. Diverses tècniques de càlcul permeten als autors la descripció dels estats excitats de certes molècules orgàniques petites que actuen com a marcadors fluorescents dels agregats de proteïnes de les fibres amiloides causants de la malaltia d'Alzheimer. Aquesta fluorescència pot oferir una imatge de la quantitat i distribució *in vivo* de les fibres amiloides en irradiar amb llum infraroja i pot ser d'una gran utilitat per al diagnòstic i l'avaluació de la malaltia. Els càlculs poden ajudar en la recerca de marcadors més eficients. La malaltia d'Alzheimer té uns efectes devastadors i progressius sobre els malalts que la pateixen i constitueix una greu amenaça per a la salut mental de la gent gran, per la qual cosa els avenços en el seu diagnòstic precoç són de vital importància.

El treball següent porta per títol «Síntesi i aplicacions en catàlisi de lligands P-estereogènics: SIP, MaxPHOS, MaxPHOX» i els autors són Ernest Salomó, Antoni Riera i Xavier Verdaguer, del Departament de Química Inorgànica i Orgànica de la Universitat de Barcelona i de l'Institut de Recerca Biomèdica. En aquest treball, premiat al simposi *Catàlisi*, es descriuen la preparació i les aplicacions d'uns catalitzadors quirals nous desenvolupats en el grup dels doctors Riera i Verdaguer que s'han mostrat molt eficients en diferents transformacions, com ara cicloaddicions o hidrogenacions catalítiques. Aquests catalitzadors actuen en el cicle catalític del procés com a lligands d'un metall de transició (Ir, Rh, etc.). Estructuralment, es caracteritzen per la presència d'un àtom de fòsfor estereogènic. En el cas dels catalitzadors MaxPHOX, el lligand porta incorporat un anell d'oxazolina quiral addicional que li confereix el caràcter de bidentat i un excel·lent comportament catalític.

Els dos últims treballs d'aquest número que tenen l'origen en la XIV Trobada de Joves Investigadors tenen en comú el fet que aborden problemàtiques de tipus analític. Així, en el simposi *Metodologia analítica*, va destacar el treball «Anàlisi directa per espectrometria de masses: desorció per electroesprai (DESI-HRMS)», de Raquel Seró, del Departament d'Enginyeria Química i Química Analítica de la Universitat de Barcelona. La Raquel ens introdueix en les tècniques anomenades *ambient mass spectrometry*, adequades per a l'anàlisi directa de mos-

tres d'origen natural, però també en anàlisi forense o en restauració artística. Aquestes tècniques d'espectrometria de masses operen en un sistema obert a pressió atmosfèrica i permeten l'anàlisi directa de la superfície de la mostra (per exemple, una fulla de planta) amb la mínima manipulació possible. Les mostres poden ser sòlides, líquides i, fins i tot, de gasos adsorbits. En particular, el grup de la Universitat de Barcelona fa servir una font d'ionització per electroesprai (DESI) i en el seu treball ens explica les anàlisis realitzades sobre el perfil de polifenols en fulles de romaní o la contaminació creuada de medicaments veterinaris en pinsos. El treball «Consum i destí dels fàrmacs citostàtics al medi aquàtic», que va presentar com a comunicació oral Helena Franquet-Griell, del Departament de Química Ambiental (IDAEA-CSIC), en el simposi *Medi ambient i qualitat de vida*, apareix ara en forma d'article signat també per Francesc Ventura i Sílvia Lacorte. En el treball s'aborda la problemàtica que generen per al medi ambient certs fàrmacs citostàtics que s'utilitzen per al tractament del càncer (es calcula que se'n consumeixen unes cinc tones anuals a Catalunya), ja que molts (o alguns dels seus metabòlits) són poc biodegradables i apareixen en les aigües del clavegueram. Després, a les depuradores no són eliminats completament i arriben al medi aquàtic de rius i del mar. Els autors del treball determinen les concentracions previstes de cada fàrmac, PEC (*predicted environmental concentrations*), a partir de les dades facilitades pel CatSalut, i es controlen les dades experimentals de les analítiques de rius i depuradores (a l'entrada i a la sortida). Els autors assenyalen que l'àcid micofenòlic és el citostàtic amb la PEC més alta detectada i en recomanen el monitoratge en el futur.

La Societat Catalana de Química organitza, pel desembre de cada any, un acte dirigit als seus membres, als estudiants de química i al públic en general, i hi convida un especialista del nostre entorn a fer una conferència divulgativa sobre el Premi Nobel d'aquell any. El desembre passat, el conferenciant convidat va ser el doctor Ramon Eritja, de l'Institut de Química Avançada de Catalunya (IQAC-CSIC), vell conegut nostre, que va impartir la conferència «El Premi Nobel de Química 2015: els mecanismes de reparació del DNA». En l'apartat d'activitats destacades de la Societat d'aquest mateix número de la REVISTA teniu una ressenya de l'acte. La REVISTA d'enguany recull un article amb el contingut molt ben condensat de la conferència fet pel mateix autor sobre els treballs de T. Lindahl, P. Modrich i A. Sancar, guardonats amb el Premi Nobel de Química 2015.

En el treball següent, «Nova ruta sintètica per a l'obtenció de piridazinones *N*-arilades a partir de sals d'arildiazoni», Daniel Cassú, Ouissam El Bakouri, Miquel Solà, Anna Pla-Quintana i Anna Roglans, de l'Institut de Química Computacional i Catàlisi (IQCC) i del Departament de Química de la Universitat de Girona, ens mostren com un resultat inesperat es pot convertir en una troballa valuosa. En l'estudi d'un acoblament creuat catalitzat per pal·ladi entre una sal de diazoni i el 2-furantrifluoroborat de potassi, s'obtingué com a producte majoritari una piridazinona *N*-arilada en lloc del producte d'acoblament «normal». L'anàlisi i l'aprofitament d'aquesta nova reacció han portat a l'establiment d'una nova via sintètica a aquestes estructures heterocícliques presents en productes naturals i en certs pesticides sintètics i que té lloc en condicions suaus, sense la necessitat de catalitzador i en medi aquós. Daniel Cassú Ponsatí va rebre per aquest treball de recerca el Premi de la Societat Catalana de Química 2015 en el marc dels Premis Sant Jordi de l'Institut d'Estudis Catalans.

Tot seguit trobem la secció «Químics catalans al món», que ens presenta exemples de químics i químiques de Catalunya que desenvolupen la seva carrera professional, en àmbits de vegades ben variats, en altres països. En aquest número coneixerem la Carina Arasa, que va fer la tesi doctoral al Departament de Química Física de la Universitat de Barcelona sobre un estudi teòric de les reaccions produïdes en les superfícies dels vehicles espacials que tenen lloc durant la seva reentrada a l'atmosfera de la Terra. Després d'haver fet estades postdoctorals a Finlàndia i Holanda, la Carina ha abandonat la química amb ordinadors i s'estabilitza professionalment a Holanda com a editora científica a Elsevier. En el seu article, descriu aquest periple professional i personal.

Aquest número recull també ressenyes breus de les activitats destacades de la Societat durant l'any que s'acaba. Tractarem la ja esmentada XIV Trobada de Joves Investigadors de Perpinyà del febrer de 2016, en un escrit del nostre company Gre-

gori Ujaque. També les conferències Enric Casassas i Fèlix Seratosa, la primera celebrada a la Universitat de Lleida el desembre de 2015 i la segona, a cavall entre Tarragona i Barcelona, l'abril d'enguany. Destacarem altres activitats i actes científics patrocinats, en la mesura de les seves possibilitats, per la Societat. I també dos actes importants organitzats a la seu de l'Institut d'Estudis Catalans: la desena edició dels Premis de Batxillerat 2016, amb una participació molt àmplia, i la Jornada de Commemoració del Premi Nobel de Química 2015.

Aquest editorial acaba, un any més, amb una cordial invitació dels editors a participar en la nostra revista. Els articles que trobareu i que us hem presentat en aquest editorial deriven, en gran manera, de suggeriments o invitacions dels editors, però no sempre és així. La REVISTA està al servei de la comunitat de persones del nostre país que treballen o s'interessen per la química des de qualsevol àmbit (acadèmic, industrial o d'altres). Si voleu fer divulgació de la vostra recerca acadèmica o industrial en aquest camp, o tractar algun tema d'història de la química o d'algun altre àmbit d'aquesta disciplina que pugui ser d'interès per a la nostra comunitat, no dubteu a contactar amb nosaltres (rscq@iec.cat) per enviar-nos treballs per publicar. També per formular-nos qualsevol dubte o suggeriment, que rebrem amb molt de gust. Fins aviat.

Els editors,

Jordi Garcia Gómez
Universitat de Barcelona
jordigarciagomez@ub.edu

Anna Roglans i Ribas
Universitat de Girona
anna.roglans@udg.edu

Xavier Tomàs Morer
Universitat Ramon Llull
xavier.tomas@iqs.edu