



ACTIVITATS

TESIS

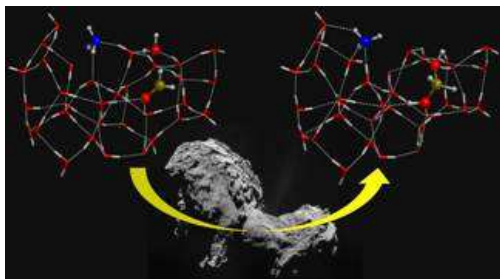
GRUPS DE RECERCA

ENTREVISTES

AVENÇOS

A FONTS

QUÍMICA



AVENÇOS

Nou dispositiu per a la detecció de citocrom c

En els últims anys s'han desenvolupat nombrosos dispositius capaços de detectar concentracions ínfimes d'elements, compostos o substàncies, com els biosensors, basats en sistemes de reconeixement biològic. Els autors d'aquest estudi han desenvolupat un tipus concret de biosensor, utilitzant aptàmers, per a la detecció de citocrom c, una proteïna amb importants funcions.

[+]

AVENÇOS

Estudi de les emissions gasoses del compostatge de fangs

En el tractament biològic de les aigües residuals urbanes es generen grans quantitats de fangs rics en matèria orgànica i determinats elements químics, composició que els fa un residu ideal per ser valoritzat mitjançant compostatge. Aquest article ha estudiat les emissions generades durant el procés de compostatge de dos tipus de fangs produïts en plantes depuradores.

[+]

AVENÇOS

Nou procés menys contaminant en l'adob de pell de boví

El Grup de Compostatge de Residus Sòlids Orgànics de la UAB ha dut a terme un estudi sobre un nou procés per adobar pell de boví sense utilitzar agents químics altament bàsics i oxidants que no només té un menor impacte ambiental sinó que també permet tancar el cicle de la matèria orgànica, de manera que es minimitza la producció d'aigües residuals i de residus sòlids.

[+]

A FONTS

Èxit del curs sobre tècniques de sincrotró aplicades a problemes ambientals

El curs introductor a les tècniques de raigs X sincrotró per a la caracterització química en sistemes ambientals va tancar amb èxit el 9 d'octubre. Durant el curs es van explicar els conceptes bàsics de les tècniques de Sincrotró, les seves aplicacions a estudis del medi ambient i de biomaterials, i les metodologies i l'anàlisi de dades per verificar i validar els resultats obtinguts.

[+]

03/2015 - Les simulacions al laboratori permeten entendre la composició dels cometes

L'objectiu de la missió espacial Rosetta és aterrar sobre el cometa 67P per realitzar experiments que permetin conèixer millor aquest tipus de cossos celestes, formats a les primeres etapes del nostre sistema planetari. Es pot estudiar la composició de la matèria dels cometes a partir d'experiments en laboratoris que simulin les reaccions que poden succeir en aquests astres. Investigadors de la UAB han participat en unes d'aquestes simulacions, els resultats de les quals coincideixen amb alguns dels obtinguts per la sonda Philae a la superfície del cometa.

Referències

Duvernay, F.; Rimola, A.; Theule, P.; Danger, G.; Sanchez, T.; Chiavassa, T. *Formaldehyde chemistry in cometary ices: the case of HOCH₂OH formation*. *Physical Chemistry Chemical Physics*. 2014, vol. 16, num. 44, p. 24200-24208. doi: 10.1039/C4CP03031A.

L'aposta més recent per tal d'entendre la natura i l'origen dels cometes de l'Agència Europea de l'Espai (ESA), juntament amb diverses agències europees i la NASA, és la missió Rosetta. Aquesta té per objectiu aterrar sobre el cometa 67P/Churyumov-Gerasimenko (quelcom inèdit!) per realitzar diversos experiments científics amb la finalitat de tenir un millor i més profund coneixement sobre aquests objectes primitius.

Els cometes del nostre sistema solar es formaren a les regions més allunyades del disc protoplanetari, un disc constituït de pols, gel i gas que envoltava el sol jove, i d'on va sorgir el sistema planetari. Per tant, aquests cometes són testimonis de primera mà per conèixer més sobre les etapes primerenques del nostre sistema planetari. Entre els 25 experiments científics que la missió Rosetta té previstos realitzar, una desena estan orientats a l'anàlisi fisicoquímica de la superfície, el subsòl i l'estructura interna del cometa, com també dels materials i gasos presents a la seva coma i cua. Com que els cometes es formaren a partir de l'agregació de partícules sòlides de minerals, diferents gels i matèria orgànica, estudiar les propietats químicofísiques de la matèria constituent del cometa 67P és estudiar un llegat dels materials precursors de la formació dels planetes. Conèixer quin tipus de matèria orgànica conté o quina és la distribució isotòpica de l'hidrogen i l'oxigen que conformen l'aigua gelada és important per avaluar el possible rol dels cometes en l'enriquiment d'aquests elements en una Terra primitiva, fet que tindria relació amb l'aparició de la vida.

El passat 12 de novembre de 2014, la sonda Rosetta va alliberar el seu "aterrador", anomenat Philae, per posar-se a una zona concreta del cometa que va ser anomenada Agilkia. Estava previst que el Philae quedés fixat a la superfície del cometa per mitjà d'uns arpons. No obstant, el mecanisme de fixació no va funcionar i el Philae va rebotar successivament fins que una paret el va aturar. Sembla ser que el Philae no va fixar-se perquè els arpons van ser incapaçs de perforar la superfície del cometa atesa la seva extraordinària duresa, fet que fa sospitar que a poca profunditat ja s'hi troben gels. Gràcies a la paret, el Philae va aturar-se, però la seva inesperada ubicació fa que les seves bateries solars només es carreguin una hora i mitja diàriament. Actualment, el Philae està en un període d'hibernació forçat tot esperant que la orientació del cometa respecte el sol sigui adequada per carregar les seves bateries secundàries (pròxim juliol). Malgrat això, abans d'hibernar el Philae va utilitzar el que li quedava d'energia per realitzar alguns dels experiments previstos com ara analitzar el contingut de deuteri present a les molècules d'aigua.

Entre la desena d'instruments que el Philae conté, un és el ROSINA, un espectròmetre de masses que permet analitzar els compostos volàtils del cometa. D'acord amb observacions radioastronòmiques realitzades en altres cometes, tals com el Hyakutake i el Hale-Bopp, aquests compostos volàtils poden ser gels d'aigua (H₂O) "bruts" amb amoníac (NH₃), monòxid de carboni (CO), formamida i metanol (H₂CO i CH₃OH) i altres molècules orgàniques relativament senzilles.

Una manera d'estudiar la composició de la matèria dels cometes és a partir d'experiments realitzats en laboratoris terrestres que simulen reaccions que poden succeir en les superfícies dels cometes sota les condicions extremes de l'espai. La interpretació d'aquestes reaccions a escala molecular s'efectua mitjançant simulacions computacionals basades en mètodes de la química quàntica.

En una col·laboració entre el grup de Química Bioinorgànica Computacional del Departament Química de la UAB i el *Groupe de Physique des Interactions Ioniques et Moléculaires* de la Universitat de Marsella s'ha estudiat des d'un punt de vista experimental i teòric les reaccions que es donen en gels constituïts per H₂O, NH₃ i H₂CO quan s'escalfen progressivament. Els experiments, efectuats a Marsella, s'han realitzat congelant gasos d'aquests tres compostos amb diferents composicions i, a mesura que s'escalfava la mescla (des de -258 a -78 °C), s'ha realitzat una anàlisi in situ mitjançant tècniques d'espectroscòpia d'infraroig i d'espectrometria de masses per tal de conèixer els productes sintetitzats.

S'han realitzat tres experiments els resultats dels quals són els següents:

- un gel predominantment d'H₂O amb una certa quantitat d'NH₃ i H₂CO de concentració semblant dona lloc a la formació d'aminometanol (NH₂CH₂OH) i també, en menor mesura, dels respectius polímers de cadenes curtes tals com l'NH₂-(CH₂-O)₂-CH₂-OH;
- el mateix gel però amb una concentració de H₂CO superior a la d'NH₃ produeix la

formació de metilen glicol (HOCH₂OH) i dels respectius polímers curts com l'HO-(CH₂-O)₂-CH₂-OH;
iii) el mateix gel però en absència d'NH₃ no genera cap producte.

A partir de treballs previs coneixem que la formació de l'NH₂CH₂OH és el resultat de la reacció entre H₂CO i NH₃ i que l'H₂O actua de catalitzador. En canvi, la formació de l'HOCH₂OH no estava clara, com tampoc el paper de l'NH₃. I és aquí on els càlculs teòrics, realitzats a la UAB, han tingut el seu paper. Aquests càlculs han permès simular les etapes de la reacció que dona lloc a la formació de l'HOCH₂OH, tot mostrant que aquesta molècula es forma per reacció entre l'H₂O i l'H₂CO, mentre que l'NH₃ actua de catalitzador. S'ha trobat que la reacció evoluciona a través d'etapes diferents a les de la formació de l'NH₂CH₂OH i que en absència d'NH₃ la reacció és inviable, tal i com els resultats experimentals indiquen. Els càlculs teòrics, a més, han permès simular l'espectre infraroig d'un model de gel d'HOCH₂OH que s'ha comparat amb l'espectre experimental. La molt bona concordança entre l'espectre experimental i el simulat és una prova més que el que s'ha format és metilen glicol.

Aquests resultats són en la línia d'alguns experiments realitzats pel Philae abans d'hibernar ja que s'ha trobat que la superfície del cometa 67P està cobert per capes de compostos orgànics i polímers estables que contenen grups carboni-hidrogen (C-H) i oxigen-hidrogen (O-H). Haurem d'esperar nous experiments per conèixer amb més exactitud la naturalesa d'aquests materials, entre els quals podrien trobar-se certament el metilen glicol i els seus polímers.

Figura superior esquerra: Representació de la reacció de formació del metilen glicol en una mescla de gels d'aigua, amoníac i formamida sobre la superfície del cometa 67P.

Albert Rimola
Grup de Química Bioinorgànica Computacional
Departament de Química
Albert.Rimola@uab.cat

Si tens propostes: premsa.ciencia@uab.es

E-mail per rebre el nostre butlletí

Enviar