

Pistes del concurs "Quina molècula sóc?" 2024

► Grups

AGENT 007, ALIATGE HIO4, CARRITO, KIMIKS, LA QUIMINETA, MOLECULAR TEA i MOLECULINHA TRAVIESA.

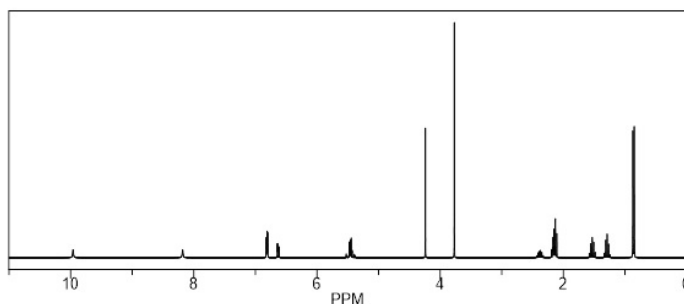
► Pistes

- Molècula 1

Pista	Informació	Data publicació	Punts
1	Es tracta d'un producte natural, concretament d'un alcaloide lipòfil amb propietats analgèsiques que s'utilitza tòpicament, ja que és fàcilment absorbit per la pell	09/01/2024	10
2	Està present en certa varietat de plantes, que generen aquest compost a partir de la fenilalanina com a defensa natural	12/01/2024	8
3	L'espectre de ressonància magnètica nuclear de ¹³ C del compost presenta els següents senyals: 172.9 ppm 147.3 ppm · 56.1 ppm 146.7 ppm · 43.9 ppm 139.6 ppm · 36.6 ppm 130.9 ppm · 33.3 ppm 129.3 ppm · 31.7 ppm 123.2 ppm · 28.9 ppm 115.4 ppm · 27.7 ppm 109.6 ppm · 22.6 ppm (2C)	15/01/2024	6

L'espectre de RMN de ¹H del compost és el següent:

Pista	Informació	Data publicació	Punts
-------	------------	-----------------	-------



- | | | | |
|---|---|------------|---|
| 4 | Des de l'any 1995, s'han registrat molts productes insecticides i rodenticides basats en aquesta substància a l'Agència de Protecció del Medi Ambient dels Estats Units | 18/01/2024 | 4 |
| 5 | Determinades varietats de pebrot picant deuen el seu gust picant a uns 14 compostos d'estructura relacionada amb la nostra molècula, tots ells amb un grup funcional tipus amida; sent la majoritària la molècula nº 1 del nostre concurs | 22/01/2024 | 2 |

- Molècula 2

Pista	Informació	Data publicació	Punts
1	Es tracta d'un producte inorgànic d'estructura plana entorn al seu àtom central, que es troba en molts minerals.	29/01/2024	10
2	És un sòlid blanc, soluble en aigua, actuant amb ella com un àcid de Lewis feble.	01/02/2024	8
3	És un retardant a la flama, pel que s'empra sobre certs materials per protegir-los del foc. També s'empra en productes oftalmològics, com a solució amortidora. En aquestes formulacions, s'utilitza conjuntament amb manitol.	05/02/2024	6
4	Presenta propietats antisèptiques, pel que s'ha emprat sobre tot en la conservació del marisc. Actualment però, el seu ús per aquesta finalitat no és legal.	08/02/2024	4

Pista	Informació	Data publicació	Punts
5	Es pot sintetitzar per tractament del bòrax amb àcid clorhídric.	12/02/2024	2

- Molècula 3

Pista	Informació	Data publicació	Punts
1	És un compost orgànic heterocíclic mitjanament àcid. No presenta enllaços C-H i és poc soluble en aigua.	19/02/2024	10
2	És un producte resultant del catabolisme de nucleòtids i bases nitrogenades en animals. En la darrera etapa de la seva biosíntesi un enzim oxidasa transforma un grup imino en una lactama.	22/02/2024	8
3	L'espectre d'IR mostra, entre d'altres, dues bandes significatives a 1678 cm^{-1} i 1592 cm^{-1} . L'espectre de RMN de ^{13}C presenta 5 senyals amb desplaçaments químics a 104.6; 156.5; 162.2; 165.4 i 167.7 ppm .	26/02/2024	6
4	En aus i rèptils terrestres, les deposicions contenen elevades quantitats d'aquest compost, és per això que són apreciades com a fertilitzant natural.	29/02/2024	4
5	Una elevada concentració en humans sol ser deguda a certes dietes o a disfuncions renals, i pot desembocar en l'acumulació en forma de cristalls en algunes articulacions, fet que resulta molt dolorós.	04/03/2024	2

- Molècula 4

Pista	Informació	Data publicació	Punts
1	És una molècula que va ser aprovada com a medicament a principis dels anys 1990. Es prescriu en adults en forma de píndola.	11/03/2024	10
2	És poc soluble en aigua, i la seva estructura presenta dos heterocicles aromàtics fusionats, sent un d'ells un imidazole. La	14/03/2024	8

Pista	Informació	Data publicació	Punts
	banda més intensa en l'espectre infraroig del compost es troba a 1637 cm ⁻¹ . Es tracta d'un compost bàsic amb un pKa del seu àcid conjugat proper a 6.		
3	<p>La caracterització estructural per RMN en cloroform deuterat presenta els següents senyals (ppm):</p> <p>¹H RMN (400 MHz):</p> <p>7.99 (d, ⁴J_{HH} = 1.7 Hz, 1H), 7.53 (d, ³J_{HH} = 7.4 Hz, 2H), 7.51 (d, ³J_{HH} = 9.2 Hz, 1H), 7.25 (d, ³J_{HH} = 7.4 Hz, 2H), 7.03 (dd, ³J_{HH} = 9.2 Hz, ⁴J_{HH} = 1.7 Hz, 1H), 4.07 (s, 2H), 2.94 (s, 3H), 2.87 (s, 3H), 2.39 (s, 3H), 2.33 (s, 3H).</p> <p>¹³C RMN (100 MHz):</p> <p>168.3, 144.1, 143.7, 137.5, 131.8, 129.4 (x2), 128.5 (x2), 127.6, 122.3, 121.8, 116.6, 113.7, 37.6, 35.9, 30.3, 21.3, 18.5.</p>	18/03/2024	6
4	Aquest principi actiu millora alguns problemes del son, escurçant el temps per a conciliar-lo i/o allargant la durada del mateix. Quan s'administra en les dosis adequades (típicament de 10 mg), causa nul·la o feble dependència.	21/03/2024	4
5	Un conegut home de negocis i estafador nord-americà va cometre un intent de suïcidi prenent un dels medicaments que tenen com a principi actiu aquesta molècula.	02/04/2024	2

- Molècula 5

Pista	Informació	Data publicació	Punts
1	És un producte natural, un metabòlit secundari d'origen exclusivament vegetal, que és insoluble en aigua.	08/04/2024	10
2	Es consumeix habitualment en dietes equilibrades. També s'utilitza com a additiu alimentari per les seves propietats antioxidants i/o colorants, en alguns productes farmacèutics i en suplementos alimentaris. Aquest compost té un valor mundial de mercat superior als 350 milions de dòlars.	11/04/2024	8
3	El compost cristal·lí pur presenta, al seu espectre d'absorció UV-Vis, un màxim a una longitud d'ona propera als 440 nm.	15/04/2024	6
4	És un compost dihidroxilat que es pot presentar en forma de 8 diastereoisòmers, però un d'ells és el més abundant. Es	18/04/2024	4

Pista	Informació	Data publicació	Punts
	biosintetitzada a les plantes per la ruta del metileritritol 4-fosfat (MEP).		
5	Aquesta molècula s'acumula a la màcula ocular, millorant la visió i retardant la degeneració responsable de les cataractes.	22/04/2024	2

La data límit per enviar les respostes a l'adreça deganat.fq@urv.cat és el dia 26/04/24 a les 12 h. A l'assumpte del correu cal posar

Equip (nom de l'equip): solució molècula X

En aquest correu cal indicar clarament, amb el màxim rigor i correcció: la fórmula/estructura i el nom de la molècula, i també el seu nº CAS.