

Programa

Dilluns 30/01/2023

9:30-10:00 Registre

10.00-10.20 Benvinguda

Moderadora Mercè Deumal

10.20-10.45 **Rosa Caballol – P1** Viatge en el temps de la Química Teòrica i Computacional de Catalunya

10.45-11.15 **Jordi Juárez - O1** Understanding cooperativity effects in the drug- dependent degradation of the Cereblon neosubstrate CK1 alpha

Marcel Swart – O2 Crossing the bridge from homogeneous catalysis to solid state physics

11.15-11.30 **Sílvia Escayola – F1** L'Intrigant Aromaticitat de les (sub)ftalocianines

Mercè Alemany-Chavarría – F2 TALAIA: un diccionari tridimensional per a proteïnes

Kemel Arafet – F3 Mechanistic modelling of Lys745 sulfonylation in EGFR C797S reveals chemical determinants for inhibitor activity and discriminates reversible from irreversible agents

11.30-12.00 Pausa i cafè - Pòsters

Moderador Antoni Frontera

12.00-12:25 **Enrique Ortí – P2** Estudi teòric de materials per a cèl·lules solars de perovskita

12:25-13:10 **Maria Fumanal – O3** Singlet Fission intramolecular en copolímers de tipus donador – acceptor

Ferran Feixas – O4 Caracterització de l'evolució temporal de processos bioquímics en resposta a canvis en l'entorn

Gerard Pareras – O5 Astrocatàlisi a la nebulosa Solar. Estudis mecanicistes sobre reaccions de tipus Fischer-Tropsch al medi interestel·lar

13.10-13.30 **Pau Besalú-Sala – F4** Modulant la cinètica i termodinàmica de reaccions de transferència de càrrega en estats excitats a través de camps elèctrics externs

Xavier Fernandez-luengo – F5 Simulacions dels camins de difusió de l'enzim HvExoI mitjançant un algoritme genètic multi-objectiu

Sergi Burguera – F6 Selenòxids com a donadors d'enllaç de calcogen: estudi teòric de l'efecte de la coordinació del metall

13.30-15.00 Dinar - Pòsters i Foto de grup

Moderador Vicent Moliner

15.00-15.25 **Josep Maria Lluch – P3** La Química Teòrica contra les malalties humanes de base inflammatòria

15:25-15:55 **Coen de Graaf – O6** GronOR, an open-source code for massively parallel and GPU-accelerated Non-Orthogonal CI

Isaac Alcón – O7 Control químic del transport electrònic en grafens nanoporosos

15.55-16.30 **Gerard Comas-Vilà – F7** Propietats Donor-Acceptor de lligands

Christian Curado-Carballada – F8 La importància de controlar la dinàmica conformacional en processos biocatalítics per a la síntesi d'amines quirals

Estefanía Díaz López – F9 Estudi microcinètic de la reformació seca del metà catalitzada per Rh (111)

Daniel Bosch – F10 Modelant propietats termodinàmiques i òptiques de la melanina a partir de xarxes neuronals basades en "fingerprints"

Guillem Casadevall – F11 Buscant els ecos del passat: reconvertint una liasa d'hidroxinitril en una esterasa

Anna Cholewinska – F12 Estudi del mecanisme de cicloadició catalítica de CO₂ a epòxid per formar carbonat cíclic

16.30-17.00	Pausa i cafè - Pòsters
Moderadora	Sílvia Osuna
17.00-17.30	Ramon Crehuet – O8 Ordre i desordre en les cadenes de polyglutamina. Bases moleculars i implicacions en el disseny de pèptids Albert Poater – O9 Com Reduir l'Empremta de Carboni
17.15-18.05	Marina Díaz-Ruiz – F13 Interaccions càrrega-càrrega en l'activació de l'enllaç C-H per a l'olefinació selectiva d'arens Miquel Estévez-Gay– F14 Computational Exploration and Design of new Halohydrin Dehalogenase variants Manuel Cánovas – F15 Conversió del CO ₂ en combustibles lleugers utilitzant catàlisi single-atom de Ru suportat en silicalita Stefano Ferrero – F16 Procés de Dissipació Energètica de les Reaccions d'Hydrogenació de Nitrogen Atòmic sobre Superfícies de Gel Judit Gálvez– F17 Potencial fotosensibilitzador de porfirines de Gd per teràpia fotodinàmica – efecte del SOC Diego Garay-Ruiz– F18 Grafs de coneixement en xarxes de reacció químiques
18.05-18.30	Agustí Lledós – P4 Predir el passat...pot ser complicat
20:30	Sopar a l'Hotel Catalonia Plaza Catalunya. Carrer de Bergara 11, Barcelona

Dimarts 31/01/2023

Moderador	Josep Lluís Garcés
10.00 - 11.00	Daniel Gonzalo – F19 Els efectes d'apantallament de l'entorn impacten les distribucions de FRET en una proteïna desordenada Anna Vidal López – F20 Activitat catalítica del Cu/Mo ₂ CTx: hidrogenació de CO ₂ i CO a metanol Lucía Morán-González– F21 Desenvolupament de Nous Descriptors per a Fenòmens Químics Gonzalo D. Nuñez – F22 Predicció computacional de la lipofilitat i acidesa de molècules substituïdes amb grups tiofluoroalquils Jordi Soler – F23 Reconvertint un enzim P450 per a la hidroxidació selectiva de propà i metà Guillem Vila-Julà – F24 Obrint els ulls en l'al·losterisme de la proteïna proapoptòtica Bak Laura Tiessler-Sala – F25 Detecció de llocs d'unió d'hemo pel disseny d'hemoenzims artificials Markel Ylla – F26 Desenvolupament i aplicacions de la funció intracular de la densitat de parells Kilian Jutglar Lozano – F27 Commutadors Moleculars basats en canvis conformacionals de grups aril dipolars controlats per camp elèctric Berta Martínez-Bachs – F28 Procés de dissipació energètica de la formació de la formamida en superfícies interestel·lars d'aigua gelada
11.00-11.30	Josep Maria Poblet – P5 U ₂ @Ih-C80(7): El rol de la interacció metall-metall en l'estabilització de ful·lerens endoèdrics
11.30-12.00	Pausa i cafè - Pòsters

Moderadora Maria Besora	
12.00-12.45	<p>Santiago Alvarez – O10 Interpenetració de les crostes de Van der Waals de dos àtoms en diversos tipus d'interaccions</p> <p>Sergio Posada- Pérez– O11 Importància de les simulacions en la comercialització de bateries recarregables més eficients i ecològiques</p> <p>Sergi Vela – O12 cell2mol: Codificant la Química per Interpretar Dades Cristal·logràfiques</p>
12:45-13.30	<p>Pablo Lozano-Reis – F29 Revelant l'augment de l'activitat observada en clústers de Ni suportats sobre TiC(001): un estudi cinètic de Monte Carlo</p> <p>Jessica Perrero – F30 Formació d'acetaldehid en superfícies de gel H₂O:CO interestel·lar? Un investigació computacional</p> <p>Laia Navarro – F31 Explorant el Disseny Computacional dels sistemes aniònics amb transició de spin</p> <p>Yannick Roselló – F32 Uranoful·lerens Endohèdrics: interaccions Caixa-Metall i l'enllaç U2</p> <p>Laura Martínez-Castro – F33 En la cerca d'un protocol computacional pel disseny racional de metal·lo-pèptids catalítics</p> <p>Maria Núria Peralta – F34 Fragment dissolved Molecular Dynamics, una estratègia prometedora en el disseny de fàrmacs</p> <p>Representant Secció Jove SCQ</p>
13.30-15.00 Dinar - Pòsters	
Moderadora Laura Masgrau	
15.00-15.45	<p>Mireia Segado-Centellas – O13 Com entendre la química supra-molecular dels òxids metàl·lics moleculars en dissolució?</p> <p>Eric Mates-Torres – O14 Descobrint interaccions còsmiques per a la química prebiòtica mitjançant algoritmes d'alt rendiment</p> <p>Antonio Viayna – O15 Combinació de mecànica quàntica i aprenentatge automàtic en la caracterització de la espècie bioactiva de molècules similars a fàrmacs</p>
15.45-16.15	<p>Lorena Roldán – F35 Estudi computacional de l'impacte de la coordinació de Cu(II) i Al(III) a les fibres Amiloide β42</p> <p>Cristina Duran – F36 Disseny de variants de la triptòfan sintasa amb activitat aïllada</p> <p>Raúl Santiago Piera – F37 Molecular Orbital Descriptor Approach (MODA): Un descriptor Machine Learning basat en primers principis per predir acoblaments magnètics entre radicals orgànics</p> <p>Iker Zapirain – F38 Estudi del procés d'encapsulació en metal·locaixes amb metadinàmica</p>
16.15-16.45	Miquel Duran – P6 Reptes actuals de la química teòrica i computacional: una aproximació des de la màgia i la intel·ligència artificial
16.45-17.00 Clausura i entrega de premis	

Pòsters

- F1 – Sílvia Escayola** – L’Intrigant Aromaticitat de les (sub)ftalocianines
- F2 – Mercè Alemany-Chavarría** – TALAIA: un diccionari tridimensional per a proteïnes
- F3 – Kemel Arafet** – Mechanistic modelling of Lys745 sulfonylation in EGFR C797S reveals chemical determinants for inhibitor activity and discriminates reversible from irreversible agents
- F4 – Pau Besalú-Sala** – Modulant la cinètica i termodinàmica de reaccions de transferència de càrrega en estats excitats a través de camps elèctrics externs
- F5 – Xavier Fernandez-luengo** – Simulacions dels camins de difusió de l’enzim HvExol mitjançant un algoritme genètic multi-objectiu
- F6 – Sergi Burguera** – Selenòxids com a donadors d’enllaç de calcogen: estudi teòric de l’efecte de la coordinació del metall
- F7 – Gerard Comas-Vilà** – Propietats Donor-Acceptor de lligands
- F8 – Christian Curado-Carballada** – La importància de controlar la dinàmica conformacional en processos biocatalítics per a la síntesi d’amines quirals
- F9 – Estefanía Díaz López** – Estudi microcinètic de la reformació seca del metà catalitzada per Rh (111)
- F10 – Daniel Bosch** – Modelant propietats termodinàmiques i òptiques de la melanina a partir de xarxes neuronals basades en “fingerprints”
- F11 – Guillem Casadevall** – Buscant els ecos del passat: reconvertint una liasa d’hidroxinitril en una esterasa
- F12 – Anna Cholewinska** – Estudi del mecanisme de cicloadició catalítica de CO₂ a epòxid per formar carbonat cíclic
- F13 – Marina Díaz-Ruiz** – Interaccions càrrega-càrrega en l’activació de l’enllaç C-H per a l’olefinació selectiva d’arens
- F14 – Miquel Estévez-Gay** – Computational Exploration and Design of new Halohydrin Dehalogenase variants
- F15 – Manuel Cánovas** – Conversió del CO₂ en combustibles lleugers utilitzant catàlisi single-atom de Ru suportat en silicalita
- F16 – Stefano Ferrero** – Procés de Dissipació Energètica de les Reaccions d’Hidrogenació de Nitrogen Atòmic sobre Superfícies de Gel
- F17 – Judit Gálvez** – Potencial fotosensibilitzador de porfirines de Gd per teràpia fotodinàmica – efecte del SOC
- F18 – Diego Garay-Ruiz** – Grafs de coneixement en xarxes de reacció químiques
- F19 – Daniel Gonzalo** – Els efectes d’apantallament de l’entorn impacten les distribucions de FRET en una proteïna desordenada
- F20 – Anna Vidal López** – Activitat catalítica del Cu/Mo₂C₂Tx: hidrogenació de CO₂ i CO a metanol
- F21 – Lucía Morán-González** – Desenvolupament de Nous Descriptors per a Fenòmens Químics
- F22 – Gonzalo D. Nuñez** – Predicció computacional de la lipofilitat i acidesa de molècules substituïdes amb grups tiofluoroalquils
- F23 – Jordi Soler** – Reconvertint un enzim P450 per a la hidroxidació selectiva de propà i metà
- F24 – Guillem Vila** – Obrint els ulls en l’al·lostèria de la proteïna proapoptòtica Bak
- F25 – Laura Tiessler-Sala** – Detecció de llocs d’unió d’hemo pel disseny d’hemoenzims artificials
- F26 – Markel Ylla** – Desenvolupament i aplicacions de la funció intracular de la densitat de parells
- F27 – Kilian Jutglar Lozano** – Commutadors Moleculars basats en canvis conformacionals de grups aril dipolars controlats per camp elèctric
- F28 – Berta Martínez-Bachs** – Procés de dissipació energètica de la formació de la formamida en superfícies interestel·lars d’aigua gelada

- F29 – Pablo Lozano-Reis** – Revelant l'augment de l'activitat observada en clústers de Ni suportats sobre TIC(001): un estudi cinètic de Monte Carlo
- F30 – Jessica Perrero** – Formació d'acetaldehid en superfícies de gel H₂O:CO interestel·lar? Un investigació computacional
- F31 – Laia Navarro** – Explorant el Disseny Computacional dels sistemes aniònics amb transició de spin
- F32 – Yannick Roselló** – Uranoful·lerens Endohèdrics: interaccions Caixa-Metall i l'enllaç U2
- F33 – Laura Martínez-Castro** – En la cerca d'un protocol computacional pel disseny racional de metal·lo-pèptids catalítics
- F34 – Maria Núria Peralta** – Fragment dissolved Molecular Dynamics, una estratègia prometedora en el disseny de fàrmacs
- F35 – Lorena Roldán** – Estudi computacional de l'impacte de la coordinació de Cu(II) i Al(III) a les fibres Amiloide β 42
- F36 – Cristina Duran** – Disseny de variants de la triptòfan sintasa amb activitat aïllada
- F37 – Raúl Santiago Píera** – Molecular Orbital Descriptor Approach (MODA): Un descriptor Machine Learning basat en primers principis per predir acoblaments magnètics entre radicals orgànics
- F38 – Iker Zapirain** – Estudi del procés d'encapsulació en metal·locaixes amb metadinàmica
-
- P1 – Niccolò Bancone** - Dimerització d'HCN en superfícies de silicats còsmics. Una investigació computacional
- P2 – Katerina Barmpidi** - Activator vs inhibitor of β -AMPK: towards the understanding of isoform selectivity
- P3 – Jordi Buils** - POMSimulator: Estudiant el mecanisme de formació de l'anió Keggin en solució aquosa
- P4 – Renato D. Cunha** - Extending the MST model to large biomolecular systems: parametrization of the ddCOSMO-MST continuum solvation model
- P5 – Nayanika Das** - Understanding the step one of Mammalian Redox Regulating Glutathione Peroxidase using QM and QM/MM calculations
- P6 – Natàlia De-Moya** - Cerca de compostos que activin selectivament la proteïna proapoptòtica Bax
- P7 – Christian Domínguez-Dalmases** - Desenvolupament i aplicació d'un camp de forces ReaxFF per a la hidrogenació de CO₂ amb zeolites funcionalitzades amb ruteni
- P8 – Özge Ergün** - Characterizing drug binding through Förster Resonance Energy Transfer
- P9 – Marc Garcia-Borràs** - COMPUTATIONAL CHARACTERIZATION OF ENZYMATIC REACTIVE INTERMEDIATES FOR THE DISCOVERY AND DESIGN OF NEW BIOCATALYTIC ACTIVITIES
- P10 – Nestor Garcia-Romeral** - Un Anàlisi Teòric Del Acoblament Magnètic En El Mxene Ti₂C
- P11 – Helena Giramé** - Differences in Protonation States of Distal Residues Alter Enzyme-Ligand Binding Pathways in Molecular Dynamics Simulations
- P12 – Mireia Gómez** - Factors moleculars que regulen els biometabòlits de la microbiota intestinal: El cas específic de Choline Trimethylamine-Lyase
- P13 – Harjasnoor Kakkar** - Energies d'enllaç de molècules interestel·lars orgàniques complexes en superfícies d'aigua gel mitjançant càlculs ab initio

- P14 – Salome Llabres** - Domain dynamics enable the cholesterol transport through the NPC1L1 transporter
- P15 – Joan Mariñoso** - Monòmers de silicats (MgSiO₃)⁺ i la seva interacció amb l'oxigen: Rellevància astronòmica
- P16 – Javier Orradre** - Caracterització de les isoterms de protonació de poli- electròlits que mimetitzen la matèria orgànica dissolta
- P17 – Beste Ozaydin** - Using molecular dynamics simulations with organic solvent/water mixtures to identify imidazoline I2 receptor binding sites
- P18 – Jordi Poater** - 3D and 2D aromatics: Like oil and water? The case of benzocarborane derivatives and 3D/3D fusion
- P19 – Cristian Privat** - Es pot descriure la variació del pKa d'un polipèptid en funció del pH mitjançant isoterms de complexació?
- P20 – Pedro Renault** - Simulacions de dinàmica molecular de la dimerització entre els receptors μ -opioide i cannabinoide CB1opioide i cannabinoide CB1
- P21 – Jhonathan R. Souza** - In solution and in phospholipid bilayer behavior of p- methoxyphenyl-pyranoflavylum cation described by molecular dynamics
- P22 – Janet Sánchez** - Disseny computacional de noves kinases per la teràpia del gen suïcida
- P23 – Laura Sanchez – Muñoz** - Empaquetament molecular cristal·li: transicions de fase i fases rotadores en n-alcans
- P24 – Guillem Vila** - Evaluation of quantum-mechanical methods for the calculation of nonlinear optical properties by partitioning the properties into molecular orbitals
- P25 – Artur Brotons-Rufes** – Enllaços Pont d'Hidrogen en la Formació d'Iniciadors Latents per a Polimerització amb Metàtesis d'Olefines



Institut
 d'Estudis
 Catalans