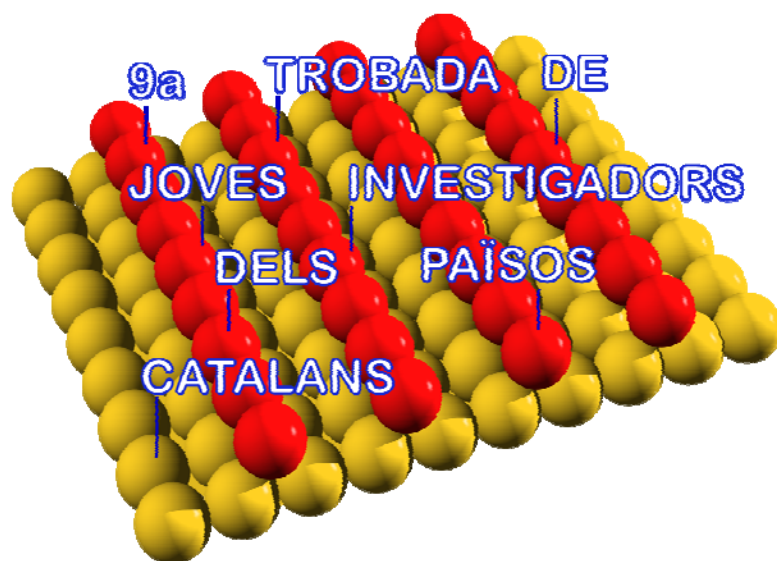




## **Novena Trobada de Joves Investigadors dels Països Catalans**



**3, 4 i 5 de febrer de 2016  
Perpinyà**





### Cronograma de la Novena Trobada de Joves Investigadors dels Països Catalans

<b>Dimecres 3 de febrer de 2016</b>	
17.00	<i>Acte Inaugural de la 9<sup>a</sup> Trobada (Campus Mailly)</i>
17.15	<i>Conferència Inaugural (Campus Mailly)</i> <b>Dr. Régis Olivès</b> PROMES CNRS, Univ. Perpignan Via Domitia «Concentrated solar power plants and thermal energy storage materials»

<b>Dijous 4 de febrer de 2016</b>				
8.30	Lliurament de documentació			
9.00	<i>Conferència Plenària 1 (Amfiteatre, A5)</i> <b>Prof. Marc Taillefer</b> CNRS, Montpellier «Metal catalyzed arylation of nucleophiles: recent progress and mechanistic insight»			
10.00	Pausa cafè			
	<i>Aula 1</i>	<i>Aula 2</i>	<i>Aula 3</i>	<i>Aula 4</i>
10.30	2.1	1.1	6.1	4.1
10.50	2.2	1.2	6.2	4.2
11.10	2.3	1.3	6.3	4.3
11.30	2.4	1.4	6.4	4.4
11.50	2.5	1.5	6.5	4.5
12.10	2.6	1.6	6.6	4.6
13.00	Dinar			
14.30	<i>Conferència Plenària 2 (Amfiteatre, A5)</i> <b>Prof. Montserrat Gómez</b> Univ. Paul Sabatier, Toulouse «Glycerol: a convenient solvent for synthesis and catalysis»			
	<i>Aula 1</i>	<i>Aula 2</i>	<i>Aula 3</i>	<i>Aula 4</i>
15.30	2.7	1.7	7.1	3.1
15.50	2.8	1.8	8.1	3.2
16.10	2.9	1.9	8.2	3.3
16.30	Pausa cafè			
17.00	2.10	1.10	8.3	3.4
17.20	2.11	5.1	8.4	3.5
17.40	2.12	5.2	8.5	3.6
20.30	Sopar			

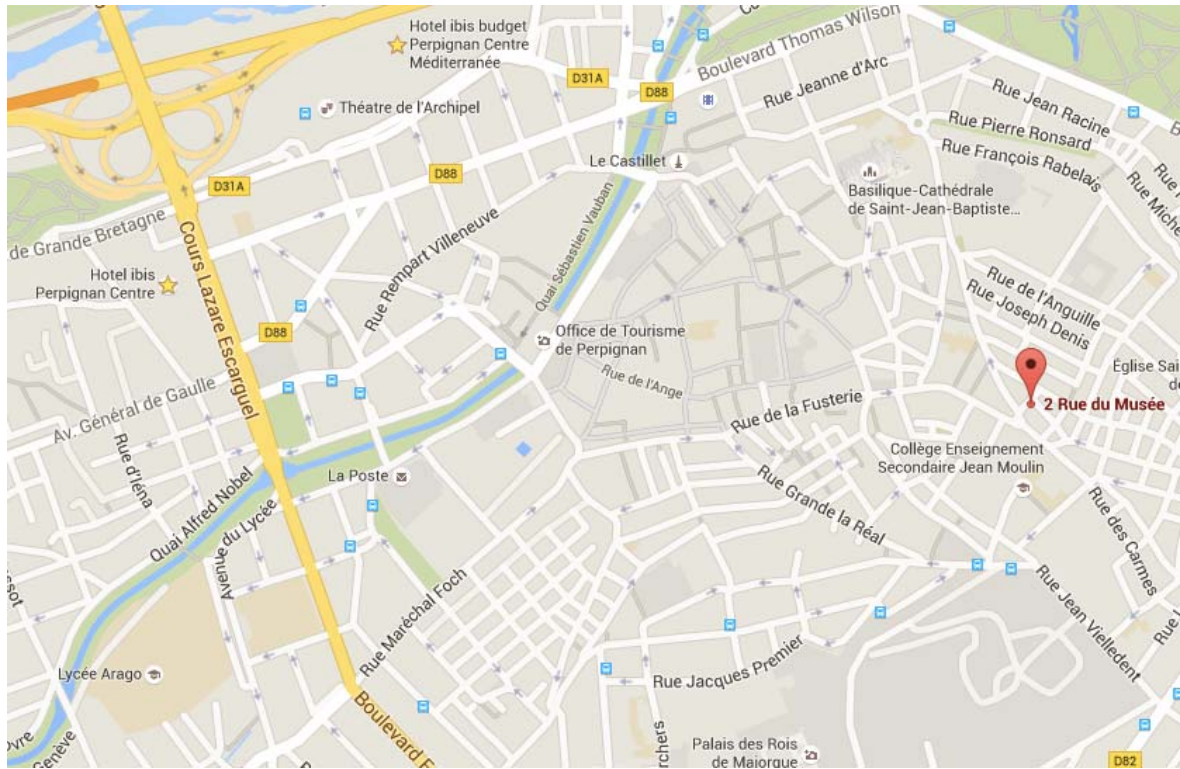


Divendres 5 de febrer de 2016				
9.00	<i>Conferència Plenària 3 (Amfiteatre, A5)</i> <b>Prof. Romà Tauler</b> IDAEA-CSIC, Barcelona «La quimiometria, una eina fonamental per a l'anàlisi i interpretació de les mesures i dades químiques»			
10.00	Pausa cafè			
	<i>Aula 1</i>	<i>Aula 2</i>	<i>Aula 3</i>	<i>Aula 4</i>
10.30	2.13	5.3	8.6	4.7
10.50	2.14	5.4	8.7	4.8
11.10	2.15	5.5	8.8	4.9
11.30	2.16	5.6	8.9	4.10
11.50	2.17	5.7		4.11
12.10	2.18	5.8		4.12
12.30		5.9		
13.00	Dinar			
14.30	<i>Taula Rodona (Amfiteatre A5)</i>  «Hi ha vida més enllà del laboratori per a un químic?»  <b>Dra. Marta López</b> , Cap del Servei de Recerca, IMIM <b>Dra. Isabel Masip</b> , Gestora de Transferència de Coneixement, IQAC-CSIC <b>Dra. Carina Arasa</b> , Associate Publisher for Surface Science, Elsevier <b>Dr. Joan Cirujeda</b> , Cap de System House Iberia, Bayer Material Science			
16.00	Cloenda i lliurament de Premis			



## Mapes

### 1. Hotels ★ i Campus Maily (2, Rue de Musée)







## Conferències plenàries

### Conferència Inaugural (oberta al públic)

*«Concentrated solar power plants and thermal energy storage materials»*

Dr. Régis Olivès

PROMES CNRS, Univ. Perpignan Via Domitia

Dimecres, 3 de febrer a les 17:15 hores (*Campus Mailly*)

### Conferència plenària 1

*«Metal catalyzed arylation of nucleophiles: recent progress and mechanistic insight»*

Prof. Marc Taillefer

CNRS, Montpellier

Dijous, 4 de febrer a les 9:00 hores (*Amfiteatre, A5*)

### Conferència plenària 2

*«Glycerol: a convenient solvent for synthesis and catalysis»*

Prof. Montserrat Gómez

Univ. Paul Sabatier, Toulouse

Dijous, 4 de febrer a les 14:30 hores (*Amfiteatre, A5*)

### Conferència plenària 3

*«La quimiometria, una eina fonamental per a l'anàlisi i interpretació de les mesures i dades químiques»*

Prof. Romà Tauler

IDAEA-CSIC, Barcelona

Divendres, 5 de febrer a les 9:00 hores (*Amfiteatre, A5*)



## Taula Rodona

### ***Hi ha vida més enllà del laboratori per a un químic?***

Divendres, 5 de febrer a les 14:30 hores (*Amfiteatre, A5*)

#### **Moderadora:**

Dra. Nora Ventosa, Vicepresidenta Societat Catalana de Química

#### **Ponents:**

Dra. Marta López, Cap del Servei de Recerca, IMIM

Dra. Isabel Masip, Gestora de Transferència de Coneixement, IQAC-CSIC

Dra. Carina Arasa, Associate Publisher for Surface Science, Elsevier

Dr. Joan Cirujeda, Cap de System House Iberia, Bayer Material Science

## Premis

La Societat Catalana de Química otorgarà un premi a la millor comunicació de cada simposi, sempre i quan el nombre de comunicacions al simposi sigui superior a 3. Si el nombre de comunicacions és inferior, aquestes comunicacions seran avaluades conjuntament amb les d'un simposi de temàtica relacionada.

El premi a la millor comunicació en cada simposi consisteix en la quota d'inscripció al **EuCheMS Congress Seville 2016** (*early registration for students, 275€*). En qualsevol cas, es farà un lliurament de 100 euros a cadascun dels premiats durant el mes de febrer d'enguany, i es complementarà la diferència quan es presenti el justificant del pagament de la inscripció al congrés.

D'altra banda, serà un requisit per al lliurament del premi que l'autor es comprometi a presentar un article curt sobre la seva presentació oral a la Trobada, abans del mes de juny de l'any 2016, que serà publicat a la revista de la SCQ.





## Simposi 1. Teoria i Modelatge

### Sessió 1, Dijous 4, 10:30. Moderador: Ramón Sayós, UB

- 1.1 *Iron – Cerium adducts as intermediates in the water oxidation reaction.*  
Ferran Acuña, Dept. Química i Institut de Química Computacional i Catàlisi (IQCC), UdG.
- 1.2 *Spin-Crossover en complexos de Ni-porfirina.*  
Gerard Alcover, Química Física i Inorgànica, URV.
- 1.3 *Hydroamination of alkenes catalyzed by rhodium complexes: reaction mechanism and origin of anti-Markovnikov regioselectivity.*  
Almudena Couce-Rios, Dept. Química, UAB.
- 1.4 *H<sub>2</sub> evolution mechanism by an iridium(III)-photosensitized polyoxotungstate.*  
Magda Pascual-Borràs, Dept. Química Física i Inorgànica, URV.
- 1.5 *Estudi mecanístic sobre la reacció de copolimerització de diòxid de carboni amb ciclohexè.*  
Joan González-Fabra, Institut Català d'Investigació Química (ICIQ) i Dept. Química Física i Inorgànica, URV.
- 1.6 *Selective capture and separation of industrial post-combustion gases using different zeolites. A theoretical approach.*  
Gerard Alonso, Dept. Química Física i Institut de Química Teòrica i Computacional, UB.

### Sessió 2, Dijous 4, 15:30. Moderadora: Rosa Caballol, URV

- 1.7 *El mecanisme de formació de l'enllaç O-O en una nova família de catalitzadors de coure per a ruptura d'aigua.*  
Ignacio Funes-Ardoiz, Institut Català d'Investigació Química (ICIQ).
- 1.8 *Conformational landscape of small ligands: a multilevel strategy to determine the conformational penalty of bioactive ligands.*  
Antonio Viayna, UB.
- 1.9 *Effect of the substrate and solvent into computational studies of the alkane-hydroxylation mechanism by non-heme Fe=O catalyts.*  
Veronica Postils, Dept. Química i Institut de Química Computacional i Catàlisi (IQCC), UdG.
- 1.10 *Difusió en medis intracel·lulars. Simulació per dinàmica browniana.*  
Mireia Via, Dept. Química Física i Institut de Química Teòrica i Computacional (IQTUB), UB.



## Simposi 2. Metodologia sintètica de compostos orgànics i inorgànics

### Sessió 1, Dijous 4, 10:30. Moderador: Jordi García, UB

- 2.1 *A rapid access to morphans and normorphans through enamines from dichloro- and trichloroacetamidocyclohexanones.*  
Juan A. Montiel, Lab. Química Orgànica, UB.
- 2.2 *Variació de la temperatura de polimerització de benzoxazines: efecte dels substituents.*  
Alba Martos, Dept. Química, UAB.
- 2.3 *Always be critic with your synthetic pathways.*  
Alejandro Gil, Institut Recerca Biomèdica i Dept. Química Orgànica, UB.
- 2.4 *Enantioselective total synthesis of marine alkaloids: lepadins.*  
Alexandre Pinto, Lab. Química Orgànica i Institut de Biomedicina, UB.
- 2.5 *ATG4B inhibitors as selective modulators of autophagy.*  
Ana Bilbao, Institut de Química Avançada de Catalunya (IQAC).
- 2.6 *A unified strategy for the enantioselective synthesis of madangamines A, C and E.*  
Celeste Are, Lab. Química Orgànica, UB.

### Sessió 2, Dijous 4, 15:30. Moderador: Àngel Messeguer, IQAC-CSIC

- 2.7 *Highly enantioselective  $\alpha$ -amination of aryl fluororous  $\beta$ -ketoesters.*  
Albert Granados, Dept. Química i Centre d'Innovació i Química Avançada (ORFEO-CINQA), UAB.
- 2.8 *Design and synthesis of new coumarin-based sphingosine-1-phosphate lyase probes.*  
Pol Sanllehí, Dept. Farmacologia i Química Mèdica, UB.
- 2.9 *A versatile dihydroceramide desaturase substrate to monitor enzyme activity.*  
Ana Pou, Dept. Química Biomèdica, IQAC-CSIC.
- 2.10 *Síntesi del fragment C9–C19 de la pelorusida A.*  
Stuart C. Kennington, Dept. Química Orgànica, UB.
- 2.11 *Addicions Michael estereoselectives a enones i nitroalquens.*  
Alejandro Gómez Palomino, Dept. Química Orgànica, UB.
- 2.12 *Supramolecular aggregates in water based on Gold (I) centers and bipyridyl and terpyridyl units.*  
Elisabet Aguiló, Dept. Química Inorgànica, UB.

### Sessió 3, Divendres 5, 10:30. Moderadora: Anna Roglans, UdG

- 2.13 *Building highly dense multibranchedcarborane derivatives: New materials for molecular medical diagnostic and chemotherapy.*  
Ines Bennour, Institut de Ciència de Materials de Barcelona (ICMAB-CSIC).
- 2.14 *Ciclacions radicalàries: síntesi de cis-octahidroindoles, "building blocks" per a alcaloides yuzurimina.*  
Sergi Jansana, Lab. Química Orgànica, UB.



- 2.15 *Catalizadores híbridos de rutenio basados en terpiridinas funcionalizadas.*  
Rosa M. González-Gil, Dept. Química, UAB.
- 2.16 *Palladium complexes and nanoparticles with NHC ligands. The Suzuki-Miyaura scenario.*  
Jonathan De Tovar, Dept. de Química, UAB.
- 2.17 *Síntesis y estudio isomérico del nuevo complejo polipiridínico [Ru<sup>II</sup>(bpy<sub>2</sub>PYMe)Cl]Cl.*  
Marcos Gil-Sepulcre, Dept. de Química, UAB.
- 2.18 *Carboranylphosphinic acids: a new class of purely inorganic ligands. Synthesis, characterization and applications.*  
Elena Oleshkevich, Institut de Ciència de Materials de Barcelona (ICMAB-CSIC).

### Simposi 3. Materials i química de l'estat sòlid

#### Sessió 1, Dijous 4, 15:30. Moderadora: Nora Ventosa, ICMAB-CSIC

- 3.1 *Efecte de les nanoparticules de pal·ladi en els processos d'oxidació del diòxid d'urani.*  
Alexandra Espriu-Gascon, Dept. Enginyeria Química, UPC.
- 3.2 *Funcionalització de superfícies de silici amb un termòmetre molecular.*  
Mafalda Rodrigues, Dept. Farmacologia i Química Terapèutica i Institut de Nanociència i Nanotecnologia (IN2UB), UB.
- 3.3 *Molecular electronics devices based on stable organic free radicals.*  
Carlos Franco, Institut de Ciència de Materials de Barcelona (ICMAB-CSIC).
- 3.4 *Compressed CO<sub>2</sub> for the preparation of biomolecule-functionalized nanoconjugates for the treatment of Fabry disease.*  
Dolores Bueno, Institut de Ciència de Materials de Barcelona (ICMAB-CSIC).
- 3.5 *Synthesis and characterization of CTA (Ag@NPs) membranes.*  
Montserrat Resina, Dept. Química, UAB.
- 3.6 *Nanopartícules d'or funcionalitzades amb ciclodextrines: combinació d'efectes supramoleculares i plasmònics per promoure reaccions fotoinduides.*  
Marc Padilla, Dept. Química, UAB.

### Simposi 4. Biomolècules, metal·lobiomolècules i biomimetisme

#### Sessió 1, Dijous 4, 10:30. Moderador: Jean-Louis Marty, U. Perpignan Via Domitia

- 4.1 *A detailed investigation of the influence of N-terminal structural modification of alamethicin by peptidomimetic scaffold in the quest of a potent anti-bacterial agent.*  
Sanjit Kumar Das, U. Perpignan Via Domitia.



- 4.2 *A label free electrochemical impedimetric aptasensor for aflatoxin B1 detection.*  
K. Yugender Goud. BAE Laboratory, U. Perpignan Via Domitia.
- 4.3 *Trapping a highly reactive non-heme iron intermediate that oxygenates strong C-H bonds with stereoretention.*  
Joan Serrano-Plana, Grup Química Bioinspirada, Supramolecular i Catàlisi, UdG.
- 4.4 *Binding of a poly-cationic peptoid (SICHI) to glycosaminoglycans: a new strategy for inhibition of sema3a chemorepulsive activity.*  
Miriam Corredor, Dept. Biological Chemistry and Molecular Modelization (IQAC/ CSIC).
- 4.5 *Synthetic peptide vaccines against foot-and-mouth disease: success at last.*  
Sira Defaus, Dept. Ciències Experimentals i de la Salut, UPC.
- 4.6 *High-valent non-heme tosylimido-iron (IV) species in TACN-based  $n_5$ -pentadentate ligands.*  
Gerard Sabenya, Institut de Química Computacional i Catàlisi (IQCC) i Dept. Química, UdG.

**Sessió 2, Divendres 5, 10:30. Moderador: Antoni Planas, URL**

- 4.7 *Detecció intracel·lular d'espècies reactives d'oxigen (ROS) utilitzant micropartícules bi-funcionals pel tractament de càncer.*  
Ezhil Amirthalingam, Dept. Farmacologia i Química Terapèutica i Institut de Nanociència i Nanotecnologia UB (IN2UB), UB.
- 4.8 *Biotechnological production of chitosans with defined acetylation patterns: Engineering Chitin Deacetylases.*  
Hugo Aragunde, Lab. Bioquímica, Institut Químic de Sarrià, URL.
- 4.9 *Estabilitat de les espècies de  $Cu^+$   $A\beta(1-16)$  i la seva influència en la formació de superòxid.*  
Andrea Mirats, Dept. Química, UAB.
- 4.10 *New design proposal for mimic the joint structure between bone and hyaline cartilage.*  
Anna Mas, Institut Químic de Sarrià, URL.
- 4.11 *Stretchable silver strain gauge for skin-attached characterization.*  
Robert Teixidó, Institut Químic de Sarrià, URL.
- 4.12 *Fluorescent markers for amyloid detection: a game of charge transfer and delocalization.*  
Francesca Peccati, Dept. Química, UAB.



## Simposi 5. Catàlisi

### Sessió 1, Dijous 4, 17:20. Moderador: Carles Bo, ICIQ

- 5.1 *Hidrogenacions enantioselectives d'enamides cícliques mitjançant complexos d'iridi amb lligands P\*,N.*  
Ernest Salomó, Institute for Research in Biomedicine, Barcelona.
- 5.2 *Dynamic assembly of a zinc-templated bifunctional organocatalyst in the presence of water for the asymmetric aldol reaction.*  
Anna Serra-Pont, Dept. Química Biològica i Modelització Molecular, Institut de Química Avançada de Catalunya (IQAC-CSIC).

### Sessió 2, Divendres 5, 10:30. Moderador: Gregori Ujaque, UAB

- 5.3 *Ir-catalyzed asymmetric hydrogenation of unfunctionalized olefins using novel P/S ligands: In situ HP-NMR and DFT calculations for the characterization of reaction intermediates.*  
Carlota Borràs, Dept. Química Física i Inorgànica, URV.
- 5.4 *Síntesi de sistemes tricíclics fusionats mitjançant cicloaddicions [2+2+2] catalitzades per Rh(I).*  
Daniel Cassú, Institut de Química Computacional i Catàlisi, UdG.
- 5.5 *New simple and ready available catalysts for enantioselective reduction and C-X coupling reactions. Theoretically-guided ligand optimization.*  
Maria Biosca, Dept. Química Física i Inorgànica, URV.
- 5.6 *A practical guide in Ullmann-type C-O and C-N couplings: the quest for orthogonal discrimination among functional groups.*  
Mireia Rovira, Institut de Química Computacional i Catàlisi, UdG.
- 5.7 *Spectroscopy and reactivity of two high-valent ni-oxygen oxidizing species.*  
Teresa Corona, Institut de Química Computacional i Catàlisi, UdG.
- 5.8 *Photocatalytic efficiencies of nanocatalyst ZNO alloyed calcium elaborated with different precursors.*  
Aurélien Rosset, CNRS-PROMES Laboratory i University of Perpignan Via Domitia (UPVD).
- 5.9 *Reusable manganese compounds containing pyrazole-based ligands for olefin epoxidation reactions.*  
Ester Manrique, Dept. Química, UdG.



## Simposi 6. Metodologia analítica

### Sessió 1, Dijous 4, 10:30. Moderadora: Cristina Palet, UAB

- 6.1 *Determination of emerging organic contaminants in marine organisms.*  
Laura Trabalón, Dept. Química Analítica i Química Orgànica, URV.
- 6.2 *Novel molecularly imprinted polymer for indomethacin removal from wastewater.*  
Nurlin Abu Samah, Dept. Química, UAB.
- 6.3 *Anàlisi directa per espectrometria de masses: desorció per electrospai (DESI-HRMS).*  
Raquel Seró, Dept. Química Analítica, UB.
- 6.4 *Nou dispositiu basat en una membrana funcionalitzada per a l'especiació de metalls en aigües.*  
Ruben Vera, Dept. Química, UdG.
- 6.5 *Possibilitats analítiques de la fluorescència de raigs-X per reflexió total per a la determinació de nanopartícules de plata en estudis d'adsorció en sòls.*  
Laura Torrent. Dept. Química, UdG.
- 6.6 *Formation of carbon nanotubes thin films on carbon electrode surface for aptasensing applications.*  
Akhtar Hayat, Interdisciplinary Research Centre in Biomedical Materials (IRCBM), COMSATS Institute of Information Technology (Pakistan).

## Simposi 7. Enginyeria i control de processos

### Sessió 1, Dijous 4, 15:30. Moderadora: Maria Teresa Galceran, UB

- 7.1 *Valorització de salmorra de dessalinització d'aigua de mar mitjançant la integració de nanofiltració i electrodiàlisi amb membranes bipolars per a la producció de reactius (de residu a producte).*  
Mònica Reig, Dept. Enginyeria Química, UPC.

## Simposi 8. Medi ambient i qualitat de vida

### Sessió 1, Dijous 4, 15:50. Moderadora: Maria Teresa Galceran, UB

- 8.1 *<sup>1</sup>H NMR monitoring of yeast starvation metabolism: a 4 case-study.*  
Francesc Puig-Castellví, Dept. Química Ambiental, Institut Diagnosi Ambiental i Estudis de l'Aigua (IDAEA-CSIC).
- 8.2 *Mostrejadors passius DGT per a la determinació de fàrmacs citostàtics en aigües.*  
Helena Franquet-Griell, Dept. Química Ambiental, Institut Química Ambiental i Estudis de l'Aigua (IDAEA-CSIC).



- 8.3 *Advance antimony recovery materials based on superparamagnetic iron oxide nanoparticles (SPION).*  
Veronica Verdugo, Dept. Química, UAB.
- 8.4 *Simple synthetic routes for the functionalization of nanodiamonds as biocompatible carbon nanoallotropes for future sensing and (bio)targeting applications.*  
Jingjing Zhao, Dept. Química, UAB.
- 8.5 *Untargeted lipidomic study of UV radiation effects in melanoma cells.*  
Núria Dalmau, Dept. Química Ambiental, Institut Química Ambiental i Estudis de l'Aigua (IDAEA-CSIC).

**Sessió 2, Divendres 5, 10:30. Moderadora: Sílvia Lacorte, IDAEA-CSIC**

- 8.6 *Avaluació de diferents paràmetres per a la determinació de compostos orgànics volàtils en mostres d'aire mitjançant desorció tèrmica acoblada a cromatografia de gasos.*  
Alba Maceira, Dept. Química Analítica i Química Orgànica, URV.
- 8.7 *Selenium speciation and distribution in Se-enriched wheat by XAS and XRF mapping.*  
Maria Àngels Subirana. Dept. Química, UAB.
- 8.8 *Nivells de contaminants organohalogenats en mares de l'hemisferi sud.*  
Natàlia Bravo, Institut Química Ambiental i Estudis de l'Aigua (IDAEA-CSIC).
- 8.9 *Ingesta de compostos organoclorats mitjançant la dieta.*  
Eva Junque, Institut Química Ambiental i Estudis de l'Aigua (IDAEA-CSIC).