



13a TROBADA DE
JOVES INVESTIGADORS
DELS PAÏSOS
CATALANS

Programa científic



Programa científic

29 – 31 de gener de 2024

Facultat de Química, Universitat Rovira i Virgili
Tarragona

Organitza



Patrocina



Benvinguda

La Tretzena Trobada de Joves Investigadors dels Països Catalans, organitzada per la Societat Catalana de Química (SCQ), torna a ser una oportunitat excel·lent perquè el col·lectiu d'estudiants que s'hi reunirà pugui presentar els resultats de la seva recerca i treure'n els fruits derivats de la discussió, de l'exposició de punts de vista diferents i de les experiències que puguin sorgir al llarg de les jornades programades en aquesta edició. L'èxit global de les Trobades anteriors (Sitges 2000, Girona 2002, Tarragona 2004, Lleida 2006, Vic 2008, València 2010, Palma de Mallorca 2012, Andorra 2014, Perpinyà 2016, Barcelona 2018, Vilanova i la Geltrú 2020 i Girona 2022) ens omple de satisfacció alhora que ens esperona a continuar treballant perquè la química en els territoris de parla catalana tingui la qualitat, el pes i el prestigi que es mereix. Enguany, la Trobada té lloc a la Facultat de Química de la Universitat Rovira i Virgili (URV), la qual ha participat activament en l'organització.

El desenvolupament d'aquesta Tretzena Trobada compta amb diverses novetats, ja que la Secció Jove de la SCQ s'ha involucrat molt activament formant part del comitè organitzador. Les seves aportacions han estat molt positives, per exemple proposant la inclusió de les comunicacions flaix. Així, la Trobada oferirà una conferència inaugural (el dia 29 de gener) i quatre conferències plenàries impartides pels investigadors guanyadors d'edicions anteriors dels premis de recerca de la SCQ, tant en la modalitat d'Excel·lència com de Talent jove. A més, hi haurà al voltant de vint comunicacions flaix i noranta comunicacions orals presentades per investigadors joves i distribuïdes en un variat programa els dies 30 i 31 de gener. La reunió es clourà amb un qüestionari flaix organitzat també per la secció jove que premiarà l'atenció dels assistents durant les presentacions a la Trobada.

Els objectius que es persegueixen són estimular la discussió i comunicació entre els diferents grups d'investigació en química i, per això, també agrair la participació activa dels directors de grup corresponents, i escoltar

investigadors experts i consolidats que ens ajudaran a conèixer cap on va la química en l'actualitat. D'altra banda, també és objectiu de la Trobada la promoció i consolidació de la llengua catalana en l'àmbit científic, i més concretament en el de la química.

Els membres del Comitè Organitzador volem agrair la col·laboració de tots els participants, que de ben segur contribuiran amb les seves aportacions a fer que la Tretzena Trobada de Joves Investigadors dels Països Catalans assolixi un nivell científic rellevant. Volem igualment fer extensiu aquest agraïment a la Facultat de Química i a la Universitat Rovira i Virgili, per la cessió dels espais i per la col·laboració i les facilitats donades en l'organització de la Trobada.

Us donem la benvinguda i esperem que aquesta Trobada sigui un èxit, no només des del punt de vista científic, sinó també des de l'humà.

Comitè Organitzador

Comitè Organitzador

Junta Directiva de la Societat Catalana de Química

Dr. Gregori Ujaque Pérez, president

Dra. Rosa Maria Marcé Recasens, vicepresidenta

Dra. Montserrat Heras Coromines, secretària

Dra. Anna de Juan Capdevila, vocal

Secció Jove de la Societat Catalana de Química

Bernat Oró Nolla, vocal jove

Araceli de Aquino Samper, vocal jove

Isabel Díez Palet

Ricard López Coll

Iván Sánchez Campillo

Horaris

Jornada 1 - Dilluns 29 de gener	
17.00	Lliurament de documentació
17.30	<p>Acte inaugural - <i>Paranimf</i></p> <p>Dr. Josep Pallarès Marzal, URV / Rector de la Universitat Dr. Joan Josep Carvajal Martí, URV / Degà de la Facultat de Química Dr. Gregori Ujaque Pérez, UAB / President de la SCQ Araceli de Aquino Samper, UB / Vocal de la Secció Jove de la SCQ</p>
18.00	<p>Conferència inaugural - <i>Paranimf</i></p> <p>Dra. Montserrat Diéguez Fernández Universitat Rovira i Virgili (URV)</p> <p>«Enfocaments sinèrgics pel disseny de catalitzadors eficients: deixar enrere els substrats models»</p>
18.45	<p>Activitat de la Secció Jove - <i>Paranimf</i></p> <p>Trivial de la Secció Jove <i>Edició especial Trobada a Tarragona</i></p>
19.45	Fi de la jornada

Jornada 2 - Dimarts 30 de gener - Matí

08.30	Lliurament de documentació			
09.00	Conferència plenària 1 - <i>Aula 101-102</i> Dr. Arjan W. Kleij Institut Català d'Investigació Química (ICIQ) «Striving towards circularity in the catalytic formation of biobased polymers»			
	Comunicacions orals: Sessió 1			
	<i>Aula 101-102</i>	<i>Aula 001</i>	<i>Aula 002</i>	<i>Aula 003</i>
09.45	1.01 Soler i Parpal	3.01 Montané Montané	7.01 Casallas Ojeda	2.01 Sarró Grané
10.00	1.02 Martínez i Bachs	3.02 Sala Teixidor	7.02 González Ruiz	2.02 de Aquino Samper
10.15	1.03 Brotons Rufes	3.03 Palà Sánchez	7.03 Llopart Roca	2.03 Torres Urtizberea
10.30	1.04 Buils Casanoves	3.04 Silvestre Llorca	7.04 Díez Palet	2.04 Monreal Corona
10.45	1.05 Vila Siles	3.05 Gubert Cellabo	7.05 Molera Janer	2.05 Marco Ariza
11.00	Pausa i cafè			
11.30	Comunicacions flaix: Sessió 1 - <i>Aula 101-102</i> F01 Sánchez Campillo F07 Romero Ribas F02 Bori Bru F08 Cassús Pascua F03 Rodríguez Barrios F09 Torralba Maldonado F04 Gil Ordóñez F10 Valencia Grajales F05 Navalón López F11 Tarr González F06 Jaén Fló			
	Comunicacions orals: Sessió 2			
	<i>Aula 101-102</i>	<i>Aula 001</i>	<i>Aula 002</i>	<i>Aula 003</i>
12.30	3.06 Morante del Pino	5.01 Martínez Castro	6.01 Oró Nolla	4.01 Aparicio Montaño
12.45	3.07 Sabrià Figueras	5.02 Alcaina Hernando	6.02 Pages Rebull	4.02 Puiggalí Jou
13.00	3.08 Garcia Duran	5.03 Lucana Meneses	6.03 Clivillé Cabré	4.03 Martí Balaguer
13.15	3.09 Guardià Blanch	5.04 Caravaca i Fuentes	6.04 Albert Tortosa	4.04 Gómez Mudarra
13.30	3.10 Bagherpour	5.05 Gómez Ventura	6.05 Queral Beltran	4.05 Pagès i Vilà
13.45	Dinar			

Jornada 2 - Dimarts 30 de gener - Tarda

15.15	<p>Conferència plenària 2 - <i>Aula 101-102</i></p> <p>Dra. Carla Casadevall Serrano Universitat Rovira i Virgili (URV) Institut Català d'Investigació Química (ICIQ)</p> <p>«From molecular complexes to hybrid systems for solar fuels and chemicals»</p>			
16.00	<p>Taula rodona - <i>Aula 101-102</i></p> <p>Mirant cap al futur: què es pot fer amb un doctorat?</p> <p>Moderadora: Dra. Laia Pellejà i Puxeu, ICIQ</p> <p>Dr. Omar Botureira Martín, URV Maria Rosa Marsal Clotet, BASF Española S.L. Jordi Arbusà Amorós, GLOO / IQS Dra. Elena Fernández Castañer, IBEC</p>			
17.00	Pausa i cafè			
	Comunicacions orals: Sessió 3			
	<i>Aula 101-102</i>	<i>Aula 001</i>	<i>Aula 002</i>	<i>Aula 003</i>
17.30	1.06 Bosch Coch	3.11 Moreno Guerra	5.06 Rafael Miguel	4.06 Bujaldón Carbó
17.45	1.07 Ylla	3.12 Boter Carbonell	5.07 Quintana García	4.07 Tenica
18.00	1.08 Cortes Llamas	3.13 Gómez Sánchez	5.08 Sánchez Hernández	4.08 Gutiérrez Orgaz
18.15	1.09 Gálvez Benítez	3.14 Lloreda Rodes	5.09 Castellar Álvarez	4.09 Capellán Busquets
18.30	1.10 Vega Sanchez	3.15 Vilanova Pérez		4.10 Eusamio Rodríguez
18.45	Fi de la jornada			

Jornada 3 - Dimecres 31 de gener - Matí

09.00	Conferència plenària 3 - Aula 101-102			
	Dr. Pablo Gago Ferrero			
	Institut de Diagnosi Ambiental i Estudis de l'Aigua (IDAEA)			
	«Eines analítiques per a la comprensió de l'exposoma químic»			
	Comunicacions orals: Sessió 4			
	Aula 101-102	Aula 001	Aula 002	Aula 003
09.45	1.11 Grebol	5.10 López Moral	7.06 Nogués Freixas	2.06 Fabregat Pallejà
10.00	1.12 Kakkar	5.11 Torres Coll	7.07 Olaya Rincón	2.07 Riesco i Llach
10.15	1.13 Posada Pérez	5.12 Pérez-Sánchez	7.08 Torres Agulló	2.08 Cuesta Troyano
10.30	1.14 Masip Sánchez	5.13 García Costas	7.09 Colomer Vidal	2.09 Gallego Gamo
10.45	1.15 Ortiz Garcia	5.14 Stampa López-Pinto	7.10 Serraïma López	
11.00	Pausa i cafè			
11.30	Comunicacions flaix: Sessió 2 - Aula 101-102			
	F12	Rovira Garrido	F18	Alemanya Chavarria
	F13	Moya Muñoz	F19	Wen
	F14	Das	F20	Sisó Moliné
	F15	Gracia Gil	F21	Haro Martínez
	F16	Teixidó Barahona	F22	Balaguer Garcia
	F17	Miró Martínez	F23	Cardona Olives
	Comunicacions orals: Sessió 5			
	Aula 101-102		Aula 002	Aula 003
12.30	1.16 Burguera Piña		6.06 Pérez López	4.11 Pascua Solé
12.45	1.17 Iglesias Reguant		6.07 Domínguez García	4.12 Cánovas Montes
13.00	1.18 Navarro Maestro		6.08 Menéndez Pedriza	4.13 Biosca Brull
13.15	1.19 Escayola Gordils		6.09 Moral Ruiz	4.14 Galeote Martín
13.30	1.20 Garay Ruiz		6.10 Muñoz Bustamante	4.15 Alsina Pla
13.45	Dinar			

Jornada 3 - Dimecres 31 de gener - Tarda	
15.15	<p>Conferència plenària 4 - <i>Aula 101-102</i></p> <p>Dra. Sílvia Osuna Oliveras Universitat de Girona (UdG)</p> <p>«Podem dissenyar computacionalment enzims altament eficients?»</p>
16.00	Kahoot flaix - <i>Aula 101-102</i>
17.15	<p>Entrega de premis i cloenda- <i>Aula 101-102</i></p> <p>Isabel Díez Palet, IDAEA / Secció Jove de la SCQ Ricard López Coll, UdG / Secció Jove de la SCQ Iván Sánchez Campillo, IQAC / Secció Jove de la SCQ</p> <p>Dr. Gregori Ujaque Pérez, UAB / President de la SCQ Bernat Oró Nolla, IDAEA / Vocal de la Secció Jove de la SCQ</p>
18.00	Fi de la Trobada

Ubicacions

Seu de la Trobada	Paranimf	Allotjament
<p>Facultat de Química Universitat Rovira i Virgili Campus Sescelades, edifici N4 Carrer de Marcellí Domingo, 1 43007 Tarragona https://www.fq.urv.cat/ca</p>	<p>Edifici del Rectorat Carrer de l'Escorxador, s/n 43003 Tarragona https://www.urv.cat/ca/universitat/directori/localitzacions/1/edifici-rectorat</p>	<p>Hotel SB Ciutat de Tarragona Pl. Imperial Tarraco, 5 43005 Tarragona https://www.hotelciutatdetarragona.com/ca/</p>

Conferències plenàries

Conferència inaugural – *Paranimf, 29/01, 18.00 h*

«Enfocaments sinèrgics pel disseny de catalitzadors eficients: deixar enrere els substrats models»

Dra. Montserrat Diéguez Fernández, Universitat Rovira i Virgili

Conferència plenària 1 – *Aula 101-102, 30/01, 09.00 h*

«Striving towards circularity in the catalytic formation of biobased polymers»

Dr. Arjan W. Kleij, Institut Català d'Investigació Química

Conferència plenària 2 – *Aula 101-102, 30/01, 15.15 h*

«From molecular complexes to hybrid Systems for solar fuels and chemicals»

Dra. Carla Casadevall Serrano, Universitat Rovira i Virgili / Institut Català d'Investigació Química

Conferència plenària 3 – *Aula 101-102, 31/01, 09.00 h*

«Eines analítiques per a la comprensió de l'exposoma químic»

Dr. Pablo Gago Ferrero, Institut de Diagnosi Ambiental i Estudis de l'Aigua

Conferència plenària 4 – *Aula 101-102, 31/01, 15.15 h*

«Podem dissenyar computacionalment enzims altament eficients?»

Dra. Sílvia Osuna Oliveras, Universitat de Girona

Simposis – Comunicacions orals

Simposi 1: Teoria i modelatge

Moderadors

Dr. Xevi Biarnés Fontal, Institut Químic de Sarrià

Dr. Toni Frontera Beccaria, Universitat de les Illes Balears

Primera part: Sessió 1 - Aula 101-102, 30/01, 09.45 h

1.01 «Computational-aided engineering of a selective unspecific peroxygenase towards enantiodivergent?-ionone hydroxylation»

Jordi Soler i Parpal, Universitat de Girona

1.02 «Procés de dissipació energètica de la formació de la formamida en superfícies interestel·lars d'aigua gelada»

Berta Martínez i Bachs, Universitat Autònoma de Barcelona

1.03 «Estudi computacional de catalitzadors macrocíclics per a metàtesi d'olefines quimiosselectiva»

Artur Brotons Rufes, Universitat de Girona

1.04 «Simulacions de xarxes de reacció complexes d'òxids de molibdè»

Jordi Buils Casanovas, Institut Català d'Investigació Química

1.05 «Oscil·lacions espúries en les propietats òptiques no lineals»

Guillem Vila Siles, Universitat de Girona

Segona part: Sessió 3 - Aula 101-102, 30/01, 17.30 h

1.06 «Modelant propietats termodinàmiques i òptiques de la melanina a partir de xarxes neuronals basades en *fingerprints*»

Daniel Bosch Coch, Universitat de Girona

1.07 «Desenvolupament d'indicadors de correlació electrònica»

Markel Ylla, Euskal Herriko Unibertsitatea / Universitat del País Basc

1.08 «Disseny de diradicals orgànics commutables mitjançant reaccions de tautomerització induïdes per camps elèctrics»

Arnau Cortés Llamas, Universitat de Barcelona

- 1.09** «Estudis computacionals del potencial fotosensibilitzador de derivats de porfirines per teràpia fotodinàmica»

Judit Gálvez Benítez, Universitat de Girona

- 1.10** «Bindscan computational tool and its application to glycoside hydrolase engineering»

Aitor Vega Sanchez, Institut Químic de Sarrià

Tercera part: Sessió 4 - Aula 101-102, 31/01, 09.45 h

- 1.11** «Aromaticity indicators from robust Hilbert-space analyses»

Joan Grebol, Universitat de Girona

- 1.12** «Investigating CO₂ formation pathways on interstellar water ice: a computational study»

Harjasnoor Kakkar, Universitat Autònoma de Barcelona

- 1.13** «Simulació de la interacció fulleré-perovskita»

Serio Posada Pérez, Universitat de Girona

- 1.14** «La màgia rere el liti. Entenent com l'agregació alcalina assisteix en la reducció electrocatalítica de dinitrogen en un polioxotungstat de tipus Keggin tri-ferro»

Albert Masip Sánchez, Universitat Rovira i Virgili

- 1.15** «Metal oxides towards the fixation of CO₂ with epoxides: from homogeneous to heterogeneous catalysis»

Thalia Ortiz Garcia, Universitat de Girona

Quarta part: Sessió 5 - Aula 101-102, 31/01, 12.30 h

- 1.16** «Regium-*p* bonds involving nucleobases: theoretical study and biological implications»

Sergi Burguera Piña, Universitat de les Illes Balears

- 1.17** «Descodificant els canvis en l'Ir deguts a la formació de complexos moleculars: el cas d'enllaços d'halogen en complexos amb piridina»

Alex Iglesias Reguant, Universitat de Girona

- 1.18** «Explorant el disseny computacional de sistemes aniònics de Fe(II) amb transició de spin»
Laia Navarro Maestro, Universitat de Barcelona
- 1.19** «Modulant la naturalesa electrònica dels *para*-quinodimetans en l'estat excitat a través de l'anàlisi de l'aromaticitat»
Sílvia Escayola Gordils, Universitat de Girona
- 1.20** «Xarxes de reacció a la xarxa: estenent ioChem-BD»
Diego Garay Ruiz, Institut Català d'Investigació Química

Simposi 2: Metodologia sintètica

Moderadors

Dr. Ramon Alibés Arqués, Universitat Autònoma de Barcelona

Dra. Montserrat Heras Coromines, Universitat de Girona

Primera part: Sessió 1 - Aula 003, 30/01, 09.45 h

- 2.01** «Construcció d'enllaços C(sp₂)-C(sp₃) a través de la fotoactivació de sals de sulfoni»
Pau Sarró Grané, Universitat Autònoma de Barcelona
- 2.02** «Influència dels lligands en la població de l'estat triplet en compostos d'Au(I): efecte estèric i electrònic»
Araceli de Aquino Samper, Universitat de Barcelona
- 2.03** «Unlocking the full potential of pyrido[2,3-*d*]pyrimidines by isolating an orthogonally functionalizable intermediate»
Endika Torres Urtizberea, Universitat Ramon Llull
- 2.04** «Estudi computacional de la síntesi estereoretentiva de ciclobutans per contracció de pirrolidines»
Roger Monreal Corona, Universitat de Girona
- 2.05** «Hidrogels basats en espiropirans per a l'absorció i detecció de CO₂»
Arnau Marco Ariza, Universitat Autònoma de Barcelona

Segona part: Sessió 4 - Aula 003, 31/01, 09.45 h

2.06 «Nous semiconductors orgànics basats en azo-triindoles per a transistors fotomodulables»

Clara Fabregat Pallejà, Universitat de Barcelona

2.07 «Síntesi de diazabiciclo[3.2.1]octans a partir de 3-oxidopirazinis i la seva conversió en altres derivats bicíclics i tricíclics»

Gerard Riesco i Llach, Universitat de Girona

2.08 «Síntesi assistida per plantilla d'heteroestructures 1D van der Waals»

Alejandro Cuesta Troyano, Institut de Ciència de Materials de Barcelona

2.09 «Fosfonació d'arens mitjançant complexos donadors-acceptors d'electrons (EDA)»

Albert Gallego Gamo, Universitat Autònoma de Barcelona

Simposi 3: Materials

Moderadors

Dra. Mercè Deumal Solé, Universitat de Barcelona

Dr. Xavier Montané Montané, Universitat Rovira i Virgili

Primera part: Sessió 1 - Aula 001, 30/01, 09.45 h

3.01 «Preparació i caracterització de noves membranes conductores de ions derivades de poli(2-oxazoline)s amb propietats cristall-líquid»

Xavier Montané Montané, Universitat Rovira i Virgili

3.02 «Síntesi de PAH quirals i luminescents a través de l'activació d'enllaços C(sp₂)-F: coneixement del mecanisme de la reacció de Scholl»

Judith Sala Teixidor, Universitat de Girona

3.03 «Valorització química de dissolvents verds derivats d'àcid làctic per obtenir materials polimèrics funcionals d'alt valor afegit»

Marc Palà Sánchez, Universitat Rovira i Virgili

3.04 «Variació del temps de relaxació dels metal·locens encapsulats»

Adriana Silvestre Llorà, Universitat de Barcelona

3.05 «Regeneració de la interfase osteocondral»

Sara Gubert Cellalbo, Institut Químic de Sarrià

Segona part: Sessió 2 - Aula 101-102, 30/01, 12.30 h

3.06 «Condensadors d'alt emmagatzematge d'energia basats en materials ferroelèctrics»

Nerea Morante del Pino, Universitat de Barcelona

3.07 «Regio-funcionalització del C₇₀ amb màscares supramoleculares»

Clara Sabrià Figueras, Universitat de Girona

3.08 «Separació i transport de càrrega en Covalent Organic Frameworks bidimensionals per a optoelectrònica»

Arnau Garcia Duran, Universitat de Barcelona

3.09 «Membranes híbrides amb suports de fusta. Nova aproximació en el desenvolupament de membranes per al transport de protons»

Jordi Guardiola Blanch, Universitat Rovira i Virgili

3.10 «Interaction of functionalized microparticles with living cells and their application for biosensing and photodynamic therapy»

Saman Bagherpour, Universitat de Barcelona

Tercera part: Sessió 3 - Aula 001, 30/01, 17.30 h

3.11 «Hidrogels basats en lignina per una captació eficient i sostenible de CO₂»

Adrián Moreno Guerra, Universitat Rovira i Virgili

3.12 «Síntesi de catalitzadors de base Ir, suportats sobre nanotubs de TiO₂ dopats, per a l'electròlisi de H₂O»

Josep Boter Carbonell, Universitat de Barcelona

3.13 «Polimerización frontal UV-LED en sistemas epoxi: Retos y Logros»

Javier Gómez Sánchez, Institut Químic de Sarrià

- 3.14** «Preparació electroquímica de catalitzadors per a l'obtenció sostenible d'hidrogen a partir de biogàs»

Judit Lloreda Rodes, Universitat de Barcelona

- 3.15** «Nous vitrímers bio basats amb enllaços imines curats fotoquímicament o tèrmica: materials prometedors per a impressió 3D»

Anna Vilanova Pérez, Universitat Rovira i Virgili

Simposi 4: Catàlisi

Moderadors

Dra. Montserrat Diéguez Fernández, Universitat Rovira i Virgili

Dr. Arnald Grabulosa Rodríguez, Universitat de Barcelona

Primera part: Sessió 2 - Aula 003, 30/01, 12.30 h

- 4.01** «Desenvolupament de nous catalitzadors estèricament congestionats per a l'oxidació asimètrica d'enllaços C(sp₃)-H no activats»

Eric Aparicio Montaña, Universitat de Girona

- 4.02** «Modelatge de la formació directa d'amides catalitzades per clústers Zr-oxo»

Jordi Puiggalí Jou, Universitat Rovira i Virgili

- 4.03** «Nanopartícules de ruteni com a (foto)catalitzadors per a la generació d'hidrogen»

Gerard Martí Balaguer, Universitat Autònoma de Barcelona

- 4.04** «Preparació d'alcohols fluorats: optimització de la síntesi a través de seqüències catalítiques»

Francisco Alonso Gómez Mudarra, Universitat de Barcelona

- 4.05** «Halogenació selectiva d'enllaços C-H alifàtics amb complexos de tipus Fe(IV)-oxo»

Neus Pagès i Vilà, Universitat de Girona

Segona part: Sessió 3 - Aula 003, 30/01, 17.30 h

4.06 «Revaloració de la biomassa mitjançant fonts d'hidrogen alternatives: síntesi de la gamma-valerolactona»

Roger Bujaldón Carbó, Universitat de Barcelona

4.07 «Electronic and torsional effects directing site-selective hydroxylation of 1,4-disubstituted cyclohexane derivatives»

Diana María Tenica, Universitat de Girona

4.08 «Catalitzadors moleculars de coure per a l'oxidació d'amoniac heterogènia»

Josep Antoni Gutiérrez Orgaz, Institut Català d'Investigació Química

4.09 «Síntesi de complexos de ferro(II) actius en reaccions de transferència asimètrica de carbè»

David Capellán Busquets, Universitat de Girona

4.10 «Hidroacilació intermolecular catalitzada per complexos de rodi(II) amb lligands P-estereogènics de pont metilè»

Javier Eusamio Rodríguez, Universitat de Barcelona

Tercera part: Sessió 5 - Aula 003, 31/01, 12.30 h

4.11 «Entenent el mecanisme de reacció del PdCo/CeO₂ per a l'oxidació de metà fent ús de caracterització avançada amb llum sincrotró»

Laia Pascua Solé, Universitat Politècnica de Catalunya

4.12 «Hidrogenació de CO₂ amb Ru encapsulat en silicalita: estudi DFT i model microcinètic»

Manuel Antonio Cánovas Montes, Universitat de Barcelona

4.13 «Catalitzadors d'iridi altament efectius per a la hidrogenació asimètrica de substrats complicats»

Maria Biosca Brull, Universitat Rovira i Virgili

4.14 «Reaccions de Michael directes, estereodivergents i catalítiques entre tioimides i aldehids α,β -insaturats. Síntesi total del Tapentadol»

Oriol Galeote Martín, Universitat de Barcelona

- 4.15** «Experimental and computational studies on the catalytic alcohol coupling reaction through borrowing hydrogen process»
Núria Alsina Pla, Universitat de Girona

Simposi 5: Biomolècules

Moderadors

Dr. Benjamí Oller Salvia, Institut Químic de Sarrià

Dr. Antoni Planas Sauter, Institut Químic de Sarrià

Primera part: Sessió 2 - Aula 001, 30/01, 12.30 h

- 5.01** «Designing metallopeptides: a computational protocol»
Laura Martínez Castro, Universitat Autònoma de Barcelona
- 5.02** «Noves nanovesícules amb components d'origen vegetal per aplicacions tòpiques»
Marta Alcaina Hernando, Institut de Ciència de Materials de Barcelona
- 5.03** «El peptidomimètic BrainBike permet un transport eficient de derivats de proteïnes a través de l'endoteli cerebral»
Maria Celia Lucana Meneses, Institut Químic de Sarrià
- 5.04** «Lipopèptids amb activitat biològica contra *Xylella fastidiosa*»
Pau Caravaca i Fuentes, Universitat de Girona
- 5.05** «Cap al fotocontrol de l'activitat biològica amb l'excitació de dos fotons en l'infraroig proper»
Marc Gómez Ventura, Universitat Autònoma de Barcelona

Segona part: Sessió 3 - Aula 002, 30/01, 17.30 h

- 5.06** «L'era de la farmacologia basada en la inducció de proximitat: PROTACs i nous horitzons»
Sergi Rafael Miguel, Institut de Recerca Biomèdica

5.07 «Determinació de llocs d'unió al·lostèrics en GPCRs mitjançant l'entrada de lligands amb metadinàmica molecular»

Aleix Quintana García, Universitat Autònoma de Barcelona

5.08 «SproPM: una nova eina pel disseny computacional d'enzims»

Janet Sánchez Hernández, Universitat de Girona

5.09 «Nanovesícules Delos incorporades en gels termoreversibles per a l'administració subcutània de fàrmacs»

Carla Castellar Álvarez, Institut de Ciència de Materials de Barcelona

Tercera part: Sessió 4 - Aula 001, 31/01, 09.45 h

5.10 «Lligands CAT-PEG per biocompatibilitzar nanopartícules magnètiques de carbur de ferro»

Alba López Moral, Universitat Autònoma de Barcelona

5.11 «Vacunes inhalades de mRNA basades en polímers zwitteriònics com a tractament no invasiu pel càncer de pulmó»

Antoni Torres Coll, Institut Químic de Sarrià

5.12 «Entendre la COX-2 per al disseny de nous fàrmacs contra el càncer: estudi computacional mitjançant un compost fotocròmic específic»

Álex Pérez-Sánchez, Universitat Autònoma de Barcelona

5.13 «Electron Paramagnetic Resonance study of the stability of quatsome nanovesicles membrane»

Rubén García Costas, Institut de Ciència de Materials de Barcelona

5.14 «Revestiment de virus adenoassociats per millorar l'eficàcia de la teràpia gènica per a la distròfia muscular de Duchenne»

María Stampa López-Pinto, Institut Químic de Sarrià

Simposi 6: Metodologia analítica

Moderadors

Dra. Anna de Juan Capdevila, Universitat de Barcelona

Dra. Rosa Maria Marcé Recasens, Universitat Rovira i Virgili

Primera part: Sessió 2 - Aula 002, 30/01, 12.30 h

6.01 «Desenvolupament d'un nou mètode analític UHPLC-MS/MS per a l'anàlisi de ftalats en ous de *Larus audouinii* i *Larus michahellis*»

Bernat Oró Nolla, Institut de Diagnosi Ambiental i Estudis de l'Aigua

6.02 «Autenticació de canyella mitjançant HPLC-UV i quimiometria»

Josep Pages Rebull, Universitat de Barcelona

6.03 «Desenvolupament i comparació de dos mètodes per la determinació de benzodiazepines i opioides en orina»

Pol Clivillé Cabré, Universitat Rovira i Virgili

6.04 «Estudi de l'evolució dels pigments de plom en les pintures murals romanes de la domus Avinyó mitjançant μ SR-XRD i tècniques complementàries»

Francesc Albert Tortosa, Universitat Politècnica de Catalunya

6.05 «Validació de GC-Orbitrap-MS i ROIMCR per l'anàlisi de contaminants orgànics persistents (COP) en un material de referència»

Aina Queral Beltran, Institut de Diagnosi Ambiental i Estudis de l'Aigua

Segona part: Sessió 5 - Aula 002, 31/01, 12.30 h

6.06 «ROIMCR per a la resolució dels senyals d'espectrometria de masses obtingudes mitjançant l'adquisició independent de dades (DIA)»

Carlos Pérez López, Institut de Diagnosi Ambiental i Estudis de l'Aigua

6.07 «Desenvolupament d'un mètode ràpid d'injecció directa per a la determinació de 90 residus farmacèutics en aigua de riu mitjançant cromatografia líquida d'espectrometria de masses en tàndem»

Pol Domínguez García, Institut Químic de Sarrià

6.08 «Optimització de tecnologies d'espectrometria de masses en imatge per a la seva aplicació en toxicologia ambiental»

Albert Menéndez Pedriza, Institut de Diagnosi Ambiental i Estudis de l'Aigua

6.09 «Preparació d'un nou material polimèric amb caràcter amfotèric i aplicació a l'extracció en fase sòlida»

Alberto Moral Ruiz, Universitat Rovira i Virgili

6.10 «Optimització d'un mètode analític per a la determinació i quantificació simultània de plaguicides en mostres d'orina»

Carolina Muñoz Bustamante, Institut de Diagnosi Ambiental i Estudis de l'Aigua

Simposi 7: Medi ambient

Moderadors

Dra. Sílvia Lacorte Bruguera, Institut de Diagnosi Ambiental i Estudis de l'Aigua

Dr. Romà Tauler Ferré, Institut de Diagnosi Ambiental i Estudis de l'Aigua

Primera part: Sessió 1 - Aula 002, 30/01, 09.45 h

7.01 «Anàlisi del cicle de vida del procés de producció de formatge incloent estratègies de valorització a través de la digestió anaeròbica»

Miguel Reinaldo Casallas Ojeda, Universitat de Barcelona

7.02 «Explorant l'exposició als EDC en l'alopecia frontal fibrosant»

Ana González Ruiz, Institut d'Investigació Sanitària Pere Virgili

7.03 «Biocarbó com a eina sostenible per a l'adsorció de microcontaminants en aigua ultrapura i aigües residuals»

Pere Llopart Roca, Universitat de Barcelona

7.04 «Identificació de les fonts principals de compostos orgànics volàtils (COV) i avaluació del seu rol en la formació de contaminants secundaris en llocs rurals, suburbans i industrials de Catalunya»

Isabel Díez Palet, Institut de Diagnosi Ambiental i Estudis de l'Aigua

7.05 «Oxidació de glicerol com a alternativa a l'oxidació de l'aigua»

Martí Molera Janer, Universitat de Barcelona

Segona part: Sessió 4 - Aula 002, 31/01, 09.45 h

7.06 «Avaluació de l'estat ambiental d'aigües avall del pantà de Flix»

Martí Nogués Freixas, Institut de Diagnosi Ambiental i Estudis de l'Aigua

7.07 «Estudi de la biodegradació de mostres de bioplàstics d'àcid polilàctic (PLA)»

Carlos Mario Olaya Rincón, Universitat de Barcelona

7.08 «Identificació de microplàstics, i altres contaminants orgànics en aire mitjançant Pyr-GC-Orbitrap»

Ana Maria Torres Agulló, Institut de Diagnosi Ambiental i Estudis de l'Aigua

7.09 «Avaluació dels nivells i tendències de les substàncies perfluoroalquilades regulades pel conveni d'Estocolm en aigua de la conca del Duero»

Pere Colomer Vidal, Instituto de Química Orgánica General (IQOG)

7.10 «Estudi de la interacció d'urani i poloni en sòls»

Dídac Serraïma López, Universitat de Barcelona

Comunicacions flaix

Moderadors

Araceli de Aquino Samper, Universitat de Barcelona

Isabel Díez Palet, Institut de Diagnosi Ambiental i Estudis de l'Aigua

Bernat Oró Nolla, Institut de Diagnosi Ambiental i Estudis de l'Aigua

Ricard López Coll, Universitat de Girona

Sessió 1 - Aula 101-102, 30/01, 11.30 h

- F01** «Lligadura química nativa mitjançant selenoèsters»
Iván Sánchez Campillo, Institut de Química Avançada de Catalunya
- F02** «Metabolisme i resistència farmacològica en càncer de còlon»
Berta Bori Bru, Universitat de Barcelona
- F03** «Transferencia entre dos instrumentos de modelos de calibración multivariante basados en espectroscopía de infrarrojo para la determinación de la densidad y número de cetano en diésel»
Maria Suliany Rodríguez Barrios, Universitat Rovira i Virgili
- F04** «Diastereo- and enantioselective synthesis of spiropyrazolones through N-heterocyclic carbene catalysis»
Marta Gil Ordóñez, Universitat Autònoma de Barcelona
- F05** «Revelant el misteri del trànsit cel·lular de les nanopartícules de poli (β-amino ester)»
Maria Navalón López, Institut Químic de Sarrià
- F06** «Efectes de les condicions atmosfèriques en els aerosols orgànics contaminants i la seva importància en la salut»
Clara Jaén Fló, Institut de Diagnosi Ambiental i Estudis de l'Aigua
- F07** «Descobrint les intuïcions mecanístiques de les reaccions de metilació catalitzades per Cp*Co(III) en els enllaços C-H»
Marta Romero Ribas, Institut Català d'Investigació Química
- F08** «Preparació de reactius electrofílics per la di- i trifluoroetil·lació directa d'indoles»
Paula Casasús Pascua, Universitat Rovira i Virgili

- F09** «Noves plataformes de lligands bifuncionals per a complexos estables i inerts com a agents de contrast en imatges PET»
Daniel Torralba Maldonado, Universitat Autònoma de Barcelona
- F10** «Quantificació de la interacció carboxilat-Pi en aigua»
Esteban Aicardo Valencia Grajales, Institut Català d'Investigació Química
- F11** «Addressing the challenges of asymmetric hydrogenation of exocyclic benzofused-based alkenes with new Ir-P,N catalysts»
Daniel Tarr González, Universitat Rovira i Virgili

Sessió 2 - Aula 101-102, 31/01, 11.30 h

- F12** «OCPLS-DA per a la determinació semiquantitativa d'adulteració de mel»
Glòria Rovira Garrido, Universitat Rovira i Virgili
- F13** «Síntesi i caracterització fotoquímica de nous filtres solars intel·ligents»
Cristina Moya Muñoz, Universitat Autònoma de Barcelona
- F14** «On peroxidase activity of glutathione peroxidase»
Nayanika Das, Universitat de Vic – Universitat Central de Catalunya
- F15** «Hidrogenació de CO₂ sobre Ni(III): comparació dels mètodes Monte Carlo cinètic i model microcinètic basats en càlculs DFT»
Alejandro Gracia Gil, Universitat de Barcelona
- F16** «Specificity of a MurNAc/GlcNAc peptidoglycan deacetylase acting on chitooligosaccharides. A mutational study»
Mònica Teixidó Barahona, Institut Químic de Sarrià
- F17** «Síntesi d'esfingolípid al·lènics per al disseny d'inhibidors selectius de l'esfingosina quinasa 2 (SphK2)»
Eric Miró Martínez, Universitat Rovira i Virgili
- F18** «Descripció molecular del procés d'encapsulació d'un lligand en una metal·locaixa»
Mercè Alemany Chavarria, Universitat Autònoma de Barcelona

- F19** «Cyclometallated cyclic imides for the H-bond directed iridium-catalyzed asymmetric hydrogenation of N-methyl and N-alkyl imines»
Yisong Wen, Institut de Recerca Biomèdica
- F20** «Desxifrant els enigmes dels punts de carboni»
Rut Sisó Moliné, Universitat Rovira i Virgili
- F21** «Disseny de nanopartícules polimèriques dirigides selectivament a l'escorça anterior cingulada carregades amb miRNAs pel tractament de la depressió»
Elena Haro Martínez, Institut Químic de Sarrià
- F22** «De reaccions estequiomètriques a catalítiques amb enolats metàl·lics»
Eduard Balaguer Garcia, Universitat de Barcelona
- F23** «Estudi computacional d'acoblament hiperfí en Qubits moleculars»
Joan Cardona Olives, Universitat de Barcelona

