



Dotzena Trobada de Joves Investigadors dels Països Catalans



24-26 de gener de 2022

**Facultat de Ciències. Universitat de Girona
Girona**

Benvinguda

La Dotzena Trobada de Joves Investigadors dels Països Catalans, organitzada per la Societat Catalana de Química (SCQ), torna a ser una oportunitat excel·lent perquè el nou 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 2012, Andorra 2014, Perpinyà 2016 i Barcelona 2018, Vilanova i la Geltrú 2020) constitueix un motiu de satisfacció, alhora que un repte per continuar treballant perquè la química als territoris de parla catalana tingui la qualitat, el pes i el prestigi que es mereix. Enguany, la Trobada té lloc a la Facultat de Ciències de la Universitat de Girona (UdG), la qual ha participat activament en l'organització.

Aquesta Dotzena Trobada oferirà una conferència inaugural (el dia 24 de gener) i tres conferències plenàries, impartides pels investigadors guanyadors de la primera edició dels premis de recerca de la SCQ, de 2021, quasi noranta comunicacions orals presentades per investigadors joves i distribuïdes en un variat programa els dies 25 i 26 de gener, i es clourà amb una taula rodona. Els objectius que es persegueixen són, d'una banda, 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 d'altra banda, escoltar investigadors experts que ens ajudaran a conèixer cap on va la química en l'actualitat.

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

Us donem la benvinguda i esperem aconseguir entre tots una Trobada reeixida no només des del punt de vista científic sinó també des del punt de vista humà.

Comitè Organitzador

Comitè Organitzador

Junta de la Societat Catalana de Química

Gregori Ujaque Pérez, Departament de Química de la UAB
Rosa M. Marcé Recasens, Departament de Química Analítica i Química Orgànica de la URV
Montserrat Heras Corominas, Departament de Química de la UdG
Jordi Cuadros Margarit, Institut Químic de Sarrià de la URL
Consol Blanch Colat, Departament de Biociències de la UVic-UCC
Aureli Caamaño Ros, Professor de secundària i UB jubilat
Eduard Cremades Martí, Escola Virolai, UB i UOC
Anna de Juan Capdevila, Secció de Química Analítica de la UB
Pere Grapí Vilumara, Institut d'Història de la Ciència de la UAB
Josefina Guitart Mas, CESIRE, Departament d'Educació i UB
Ciril Jimeno Mollet, Institut de Química Avançada de Catalunya (IQAC-CSIC)
Lurdes Jordi Vilaró, Fundació Bosch i Gimpera de la UB
Josep Lluís Lliberia Blasco, SCIEX
Arben Merkoçi, Institut Català de Nanociència i Nanotecnologia (ICN2)
Laia Pellejà i Puxeu, Institut Català d'Investigació Química (ICIQ)
Nora Ventosa Rull, Institut de Ciència de Materials de Barcelona (ICMAB-CSIC)
Anton Vidal i Ferran, Departament de Química Orgànica i Inorgànica de la UB
Jordi Llorca Piqué, Departament d'Enginyeria Química de la UPC
Benjamí Oller Salvia, Institut Químic de Sarrià de la URL

Mònica Colomer, Societat Catalana de Química, Institut d'Estudis Catalans.

Programa científic

Dilluns, 24 de gener de 2022	
17.30 h	Lliurament de documentació
18.00 h	<p>Inauguració de la Trobada (<i>Aula Magna de la Facultat de Ciències</i>)</p> <p>Dra. Maria Pla de Sola, vicerectora de recerca i transferència de coneixement de la UdG</p> <p>Dra. Mònica Iglesias, vicedegana de la Facultat de Ciències de la UdG</p> <p>Dr. Gregori Ujaque, president de la Societat Catalana de Química</p> <p>Dr. Miquel Solà, director de l'Escola de Doctorat de la UdG</p> <p>Dr. Benjamí Martorell, vocal jove de la Junta de la SCQ</p>
18.15 h	<p><i>Conferència inaugural (Aula Magna de la Facultat de Ciències)</i></p> <p>Dra. Anna Company Institut de Química Computacional i Catàlisi (IQCC), Departament de Química Universitat de Girona</p> <p>«Modelant la química dels enzims: síntesi i reactivitat d'espècies ferro-oxo d'alta valència»</p>

Dimarts, 25 de gener de 2022				
9.00 h	Lliurament de documentació			
9.30 h	<p><i>Conferència plenària 1 (Aula Magna de la Facultat de Ciències)</i></p> <p>Prof. Jaume Veciana Institut de Ciència de Materials de Barcelona (CSIC) i CIBER-BBN Campus Universitari de Bellaterra</p> <p>«Nanomedicines: Un somni fet realitat amb nanovesícules multifuncionals»</p>			
10.30 h	Pausa i cafè			
	<i>Aula E6</i>	<i>Aula E8</i>	<i>Aula PB24</i>	<i>Aula Magna</i>
11.00 h	1.1	2.1	7.1	3.1
11.20 h	1.2	2.2	7.2	3.2
11.40 h	1.3	2.3	7.3	3.3
12.00 h	1.4	2.4	7.4	3.4
12.20 h	1.5	2.5	7.5	3.5
12.40 h	1.6	2.6	7.6	3.6
13.00	1.7	2.7	7.7	3.7
13.20 h	Dinar			
15.00 h	<p><i>Conferència plenària 2 (Aula Magna de la Facultat de Ciències)</i></p> <p>Dr. Aleix Comas-Vives Departament de Química, Universitat Autònoma de Barcelona / Universitat Tècnica de Viena</p> <p>«Reptes i oportunitats en la modelització dels catalitzadors heterogenis»</p>			
	<i>Aula E6</i>	<i>Aula E8</i>	<i>Aula PB4</i>	<i>Aula Magna</i>
16.00 h	3.8	2.8	7.8	4.1
16.20 h	3.9	2.9	7.9	4.2
16.40 h	3.10	2.10	7.10	4.3
17.00 h	3.11	2.11		4.4
17.20 h	Pausa i cafè			
	<i>Aula E6</i>	<i>Aula E8</i>	<i>Aula PB4</i>	<i>Aula Magna</i>
17.40 h	3.12	2.12	5.1	4.5
18.00 h	3.13	2.13	5.2	4.6
18.20 h		2.14	5.3	4.7
18.40 h			5.4	4.8
19.00 h				4.9
21.00 h	Sopar			

dimecres, 26 de gener de 2022				
9.00 h	<i>Conferència plenària 3 (Aula Magna de la Facultat de Ciències)</i> Dra. Clàudia Climent Department of Chemistry, Universitat de Pennsilvània Filadèlfia, Estats Units d'Amèrica «Química polaritònica: Modificant processos químics amb llum confinada»			
	<i>Aula E4</i>	<i>Aula PB24</i>	<i>Aula E10</i>	<i>Aula Magna</i>
10.00 h	6.1	1.8	5.5	4.10
10.20 h	6.2	1.9	5.6	4.11
10.40 h	6.3	1.10	5.7	4.12
11.00 h	Pausa i cafè			
	<i>Aula E4</i>	<i>Aula PB24</i>	<i>Aula E10</i>	<i>Aula Magna</i>
11.30h	6.4	1.11	5.8	4.13
11.50 h	6.5	1.12	5.9	4.14
12.10 h	6.6	1.13	5.10	4.15
12.30 h	6.7		5.11	4.16
12.50 h	6.8			4.17
13.10 h	Dinar			
15.00 h	<i>Taula rodona (Aula Magna de la Facultat de Ciències)</i> «Què es pot fer després d'un doctorat en Química?» Dr. Aleix Comas-Vives, U. Autònoma de Barcelona / U. Tècnica de Viena Dr. Xavier Rius, Citysens Dra. Sònia Sentellas, Universitat de Barcelona Dr. Josep Anton Vieta, Saint George's School, Girona Dr. Bernat Guixer, Celler de Can Roca (Esperit Roca)			
16.15 h	Cloenda i lliurament de premis (Aula Magna de la Facultat de Ciències)			

Ubicacions

Seu de la Trobada

Facultat de Ciències
Universitat de Girona

Maria Aurèlia Capmany, 69

17003 Girona

<https://www.udg.edu/ca/fc/>



<https://www.google.com/maps/place/Facultat+de+Ci%C3%A8ncies+Campus+de+Montilivi/@41.9625641,2.8287887,15z/data=!4m5!3m4!1s0x0:0xeffb2cd20d4238a72!8m2!3d41.9625641!4d2.8287887>

Allotjament

Hotel Carlemany

Plaça Miquel Santaló i Pavor, 1. 17002 Girona

<https://www.hotelcarlemanygirona.com/ca/>

<https://www.google.com/maps/place/Hotel+Carlemany+Girona/@41.9786298,2.8190888,17z/data=!3m1!4b1!4m5!3m4!1s0x12bae6d937c393f3:0xc5fdf4bce74df9b9!8m2!3d41.9785139!4d2.8212278>

Conferències plenàries

Conferència inaugural

«Modelant la química dels enzims: Síntesi i reactivitat d'espècies ferro-oxo d'alta valència»

Dra. Anna Company

Institut de Química Computacional i Catàlisi (IQCC), Departament de Química,
Universitat de Girona

Dilluns 24 de gener, a les 18.15 hores (*Aula Magna de la Facultat de Ciències*)

Conferència plenària 1

«Nanomedicines: Un somni fet realitat amb nanovesícules multifuncionals»

Prof. Jaume Veciana

Institut de Ciències de Materials de Barcelona (CSIC) i CIBER-BBN

Dimarts 25 de gener, a les 9.30 hores (*Aula Magna de la Facultat de Ciències*)

Conferència plenària 2

«Reptes i oportunitats en la modelització dels catalitzadors heterogenis»

Dr. Aleix Comas-Vives

Departament de Química, Universitat Autònoma de Barcelona / Universitat Tècnica de
Viena

Dimarts 25 de gener, a les 15 hores (*Aula Magna de la Facultat de Ciències*)

Conferència plenària 3

«Química polaritònica: Modificant processos químics amb llum confinada»

Dra. Clàudia Climent

Departament de Química, Universitat de Pennsilvània

Dimecres 26 de gener, a les 9.00 hores (*Aula Magna de la Facultat de Ciències*)

Taula rodona

«Què es pot fer després d'un doctorat en Química?»

Dimecres 26 de gener, a les 15.40 hores (*Aula Magna de la Facultat de Ciències*)

Moderadora:

Dra. Lurdes Jordi, Fundació Bosch i Gimpera-Universitat de Barcelona i membre de la Junta de la SCQ

Ponents:

Dr. Aleix Comas-Vives, Universitat Autònoma de Barcelona / Universitat Tècnica de Viena

Dr. Xavier Rius, Citysens

Dra. Sònia Sentellas, Universitat de Barcelona

Dr. Josep Anton Vieta, Saint George's School, Girona

Dr. Bernat Guixer, Celler de Can Roca (Esperit Roca)

Premis

La Societat Catalana de Química atorgarà un premi a la millor comunicació de cada simposi. El premi a la millor comunicació en cada simposi consisteix en la quota d'inscripció al 8th EuCheMS Chemistry Congress 2022 a Lisboa (*standard registration for students*, 325 euros) i una bossa de viatge de 200 euros. En qualsevol cas, es farà un lliurament de 200 euros a cadascun dels premiats durant el mes de març d'enguany i el pagament de la inscripció es realitzarà un cop presentada la factura de la inscripció a nom de la SCQ-IEC.

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 d'abril de 2022, que serà publicat a la revista (https://scq.iec.cat/?page_id=79) de la SCQ.

Comunicacions orals

Simposi 1. Teoria i modelatge

Sessió 1. Dimarts 25 de gener, a les 11 hores.

Moderadors: Carles Bo (ICIQ), Ramón Sayós (UB) i Marcel Swart (UdG)

- 1.1 **Control del comportament de transició de spin de la família [Cr(indenil)₂] mitjançant la funcionalització del lligand.**
Laia Navarro, Departament de Química Inorgànica i Orgànica i Institut de Química Teòrica i Computacional (IQTC), UB .
- 1.2 **Avaluació ràpida i senzilla de la catàlisi i selectivitat induïda per camps elèctrics.**
Pau Besalú Sala, Institut de Química Computacional i Catàlisi, Departament de Química, UdG.
- 1.3 **Predicció de paràmetres Mössbauer ⁵⁷Fe precisos a partir de bases gaussianes generals.**
Gerard Comas-Vilà, UdG.
- 1.4 **Caracterització del pont d'halogen entre molècules fluorescents i fluorobenzens halogenats.**
Alex Iglesias-Reguant, Institut de Química Computacional i Catàlisi, i Departament de Química, UdG.
- 1.5 **Mecanismes de formació i diagrames d'especiació dels òxids metàl·lics moleculars.**
Enric Petrus, Departament de Química Física i Inorgànica, URV.
- 1.6 **Xarxes de reacció en catàlisi homogènia computacional: construcció, anàlisi i intercanvi de dades.**
Diego Garay-Ruiza, Institut Català d'Investigació Química (ICIQ), BIST.
- 1.7 **L'evolució dirigida d'un enzim P450 permet catalitzar l'oxidació anti-Markovnikov d'alquens mitjançant el control dinàmic dels intermedis.**
Jordi Soler, Institut de Química Computacional i Catàlisi, i Departament de Química, UdG.

Sessió 2. Dimecres 26 de gener, a les 10.00 hores.

Moderadors: Carles Bo (ICIQ), Ramón Sayós (UB) i Marcel Swart (UdG)

- 1.8 **Explorant la flexibilitat de receptors moleculars bioinspirats amb simulacions computacionals.**
Ricard López Col, Institut de Química Computacional i Catàlisi (IQCC), UdG.
- 1.9 **Estudis teòrics de l'acoblament creuat Suzuki-Miyaura catalitzat amb coure(I).**
Francisco Alonso Gómez Mudarra, Institut de Química Teòrica i Computacional (IQTC) i Secció de Química Inorgànica, Departament de Química Inorgànica i Orgànica, UB.

1.10 ***Machine learning to predict adsorption energies on copper bimetallic alloys.***

Andrés Felipe Usuga, Departament de Química, UAB.

Sessió 3. Dimecres 26 de gener, a les 11.30 hores.

Moderadors: Carles Bo (ICIQ), Ramón Sayós (UB) i Marcel Swart (UdG)

1.11 **Eliminant la dependència de l'origen en les descomposicions de la polaritzabilitat.**

Marc Montilla, Institut de Química Computacional i Catàlisi, Departament de Química, UdG.

1.12 **Estudi de l'empaquetament cristal·lí de cadenes alifàtiques llargues.**

Eduard Colomer, Departament de Ciència de Materials i Química Física i Institut de Química Teòrica i Computacional (IQTC), UB.

1.13 **Commutadors moleculars basats en canvis conformacionals de grups aril dipolars controlats per camp elèctric.**

Kílian Jutglar Lozano, Departament de Ciència de Materials i Química Física, i Institut de Química Teòrica i Computacional (IQTC), UB.

Simposi 2. Metodologia sintètica

Sessió 1. Dimarts 25 de gener, a les 11 hores.

Moderadors: Anna Belen Cuenca (URL), Marta Planas (UdG) i Anton Vidal (UB)

2.1 **Síntesi enantioselectiva de *cis*-decahidroquinolines: estudis en la síntesi total de la schoberina B.**

Arnau Calbó, Departament de Farmacologia, Toxicologia i Química Terapèutica, UB.

2.2 **Com obtenir fosforescència a temperatura ambient? Efecte de l'or(I) en determinats cromòfors.**

Araceli de Aquino, Departament de Química Inorgànica i Orgànica, UB.

2.3 **Síntesi de nous antibiòtics fotocommutadors: desenvolupament de noves metoxilacions per activació C-H.**

Albert Ruiz, Facultat de Farmàcia i Ciències de l'Alimentació, UB.

2.4 **Estructura supramolecular tipus matriòxica de tres capes per a l'obtenció de ful·lerens bi-funcionalitzats purs.**

Ernest Ubasart, IQCC i Departament Química, UdG.

2.5 **Síntesi estereoselectiva de la kopsiyunanina K i l'intermedi de Kerr a partir de *building blocks* amb un estereocentre quaternari.**

Sergi Ordeix, Facultat de Farmàcia i Ciències de l'Alimentació, UB.

2.6 **A la recerca de nous sistemes supramoleculars multifuncionals: propostes que combinen la transició d'espín amb altres propietats moleculars.**

Leoní A. Barrios, IN2, Facultat de Química, UB.

2.7 **"*Clip-off-Chemistry*": Nou mètode sintètic de complexos de rodi a partir de la ruptura controlada de poliedres metal·loorgànics (MOPs).**

Anna Broto-Ribas, Institut Català de Nanociència i Nanotecnologia (ICN2).

Sessió 2. Dimarts 25 de gener, a les 16 hores.

Moderadors: Anna Belen Cuenca (URL), Marta Planas (UdG) i Anton Vidal (UB)

2.8 **Reaccions de Michael enantioselectives sobre aldehids α,β -insaturats.**

Oriol Galeote, Departament de Química Inorgànica i Orgànica, UB.

2.9 **Lligació química nativa mitjançant connectors de diaminobenzè (Dbz).**

Iván Sánchez-Campillo, Institut de Química Avançada de Catalunya (IQAC-CSIC).

2.10 **Acoblaments en posicions C-H «propulsats» per iode hipervalent: reordenació iodo-Claisen com a via d'entrada cap a diversitat estructural.**

Wei W. Chen, Departament de Química Biològica, IQAC-CSIC i Departament de Química Orgànica i Farmacèutica, IQS-URL.

2.11 **Síntesi de xarxes metal·loorgàniques (MOFs) per desasseblatge programat.**

Borja Ortín-Rubio, Institut Català de Nanociència i Nanotecnologia (ICN2), CSIC, BIST.

Sessió 3. Dimarts 25 de gener, a les 17.40 hores.

Moderadors: Anna Belen Cuenca (URL), Marta Planas (UdG) i Anton Vidal (UB)

2.12 Reaccions d'alquil·lació directes i enantioselectives catalitzades per complexos quirals de Ni(II).

Miguel Mellado-Hidalgo, Departament de Química Inorgànica i Orgànica, UB.

2.13 *Studies on the enantioselective synthesis of E-Ethylidene-bearing Spiro[indolizidine-1,30-oxindole] alkaloids.*

Valentina Piras, Facultat de Farmàcia i Ciències de l'Alimentació, UB.

2.14 Síntesi de compostos ciclometal·lats de platí(II) amb lligands alquil·aromàtics per a l'estudi de les seves propietats luminescents i la formació d'excímers.

Ariadna Lázaro, Departament de Química Inorgànica i Orgànica, UB.

Simposi 3. Materials

Sessió 1. Dimarts 25 de gener, a les 11.00 hores.

Moderadors: Pere Alemany (UB), Guillem Aromí (UB) i Nora Ventosa (ICMAB-CSIC)

- 3.1 **Funcionalització de superfícies amb molècules magnètiques i luminescents.**
Guillem Gabarró-Riera, Departament de Química Inorgànica i Orgànica, UB.
- 3.2 **Nous helicats supramoleculars de Co(II) que actuen com a imants unimoleculars. Encapsulació d'espècies per efecte plantilla.**
Núria Capó Serrano, Departament de Química Orgànica i Inorgànica de la UB.
- 3.3 **Heterometallic [LnLn'Ln] molecules as enhanced 3-qubit quantum gates.**
Diamantoula Maniaki, Departament de Química Inorgànica i Orgànica i Institut Català de Nanociència i Nanotecnologia (ICN2), UB.
- 3.4 **Nous politiouretans híbrids tipus vitrimèric. Síntesi i caracterització.**
Federico Guerrero, Departament de Química Analítica i Química Orgànica, URV.
- 3.5 **Regioselective bis-functionalization of fullerene C₇₀ via supramolecular mask strategy.**
Valentina Iannace, Institut de Química Computacional i Catàlisi, Facultat de Ciències, UdG.
- 3.6 **Efecte de l'encapsulació de SMM mononuclears.**
Adriana Silvestre-Llora, Departament de Química Inorgànica i Orgànica i Institut de Química Teòrica i Computational, UB.
- 3.7 **Funcionalització regioselectiva del full·lerè C₆₀ mitjançant la reacció Diels-Alder utilitzant màscares supramoleculars.**
Tània Pèlach Monell, Institut de Química Computacional i Catàlisi, Departament de Química, UdG.

Sessió 2. Dimarts 25 de gener, a les 16 hores.

Moderadors: Pere Alemany (UB), Guillem Aromí (UB) i Nora Ventosa (ICMAB-CSIC)

- 3.8 **Políedres metal·loorgànics com a «nanopartícules moleculares».**
Laura Hernández-López, Institut Català de Nanociència i Nanotecnologia (ICN2).
- 3.9 **El joc de l'atzar, la identitat biològica vs. la identitat sintètica de les nanomedicines.**
Coral García Fernández, Grup d'Enginyeria de Materials (GEMAT), IQS-URL.
- 3.10 **Coordinació-eliminació de contaminants orgànics de l'aigua amb MOPs solubles en aigua.**
Alba Cortés Martínez, Institut Català de Nanociència i Nanotecnologia (ICN2), CSIC, BIST.
- 3.11 **Desenvolupament de nanopartícules amb capacitat de penetrar mucoses.**
Laura Olmo, Grup d'enginyeria de materials (GEMAT), IQS-URL.

Sessió 3. Dimarts 25 de gener, a les 17.40 hores.

Moderadors: Pere Alemany (UB), Guillem Aromí (UB) i Nora Ventosa (ICMAB-CSIC)

3.12 Apropant-nos a la complexitat dels teixits biològics.

Glòria Nieva Esteve, Grup d'Enginyeria de Materials (GEMAT), IQS-URL.

3.13 Recobriments multicapa de TiN/CrN dipositats per HiPIMS.

Neus Sala Bascompte, Grup d'Enginyeria de Materials (GEMAT), IQS-URL.

Simposi 4. Catàlisi

Sessió 1. Dimarts 25 de gener, a les 16 hores.

Moderadors: Anna Pla (UdG), Alex Shafir (IQAC) i Xavier Verdaguer (UB)

4.1 ***Halogen bond-assembled transition metal-based catalytic systems: synthesis, characterization and application in catalysis.***

Alba Martínez-Bascuñana, Departament de Química Inorgànica i Orgànica, UB.

4.2 ***Chiral functional materials. TAMOF: from chiral chromatography to catalytic kinetic resolutions.***

José Luis Núñez-Rico, Departament de Química Inorgànica i Orgànica, UB.

4.3 ***Estudi DFT de l'adsorció de CO₂, CH₄, H₂ i H₂O en single atom catalysts suportats en silicalita.***

Manuel Antonio Cánovas, Institut de Química Teòrica i Computacional (IQTC) de la UB.

4.4 ***Estudi mecanístic de la reducció electroquímica de CO₂ amb un catalitzador organometàl·lic de manganès(I).***

Sergio Fernández, Institut Català d'Investigació Química (ICIQ), BIST.

Sessió 2. Dimarts 25 de gener, a les 17.40 hores.

Moderadors: Anna Pla (UdG), Alex Shafir (IQAC) i Xavier Verdaguer (UB)

4.5 ***Síntesi, tautomeria NH/PH i aplicació en la hidrogenació asimètrica del lligand P-estereogènic MAdPHOS.***

Marina Bellido, Institut de Recerca Biomèdica de Barcelona.

4.6 ***Efecte de l'addició de ruteni en un catalitzador de cobalt suportat en CeO₂ per al reformat en sec de metà.***

Marina Armengol Profitós, Institut de Tècniques Energètiques, Departament d'Enginyeria Química, UPC.

4.7 ***Evaluation of electronic aspects and hat mechanism in nickel-hypochlorite species.***

Adrià Juvanteny i Palomeras, Institut de Química Computacional i Catàlisi, Facultat de Ciències, UdG.

4.8 ***La importància del bite angle dels Metall(III)-Salen catalitzadors en el segrest de CO₂ amb epòxids en condicions suaus.***

Anna Vidal-López, Institut de Química Computacional i Catàlisi, Departament de Química de la UdG i Departament de Química de la UAB.

4.9 ***Explorant la química intramolecular d'espècies ferro(V)-oxo-carboxilat.***

Andrea Álvarez, Institut de Química Computacional i Catàlisi (IQCC), Departament de Química, UdG.

Sessió 3. Dimecres 26 de gener, a les 10.00 hores.

Moderadors: Anna Pla (UdG), Alex Shafir (IQAC) i Xavier Verdaguer (UB)

4.10 Cicllació en cascada d'1,5-bisal·lens i alquins catalitzada per Rh(I) per a la formació de *cis*-3,4-arylvinilpirrolidines i ciclopentans.

Jordi Vila, Institut de Química Computacional i Catàlisi (IQCC) i Departament de Química de la UdG.

4.11 Estudi mecanístic de la conversió de carbonats cíclics de cinc a sis membres.

Alba Villar-Yanez, Institut Català d'Investigació Química (ICIQ), BIST.

4.12 *Hemilabile C^N ligands allow Au(I)/Au(III) reactivity. Development of gold-mediated 1,2-arylation/lactonization of alkenoic acids.*

Pau Font, Institut de Química Computacional i Catàlisi, Facultat Ciències, UdG.

Sessió 4. Dimecres 26 de gener, a les 11.30 hores.

Moderadors: Anna Pla (UdG), Alex Shafir (IQAC) i Xavier Verdaguer (UB)

4.13 Desaromatització oxidativa asimètrica d'arens.

Najoua Choukairi Afailal, Institut de Química Computacional i Catàlisi (IQCC) i Departament de Química, UdG.

4.14 Nous catalitzadors Ir-P,S per hidrogenació asimètrica dissenyats per DFT.

Jorge Faiges Marcos, Departament de Química Física i Inorgànica, URV.

4.15 *Kinetic Monte Carlo simulations of the Dry Reforming of Methane on Ru(0001) from DFT based calculations.*

Estefanía Díaz López, Departament de Química, UAB.

4.16 Catalitzadors bis(fenoxi-imina) fluxionals per a la polimerització de polietilè.

Artur Brotons Rufes, UdG.

4.17 Catàlisi supramolecular sobre una reacció de ciclació.

Iker Zapirain Gysling, Unitat de Química Física, UAB.

Simposi 5. Biomolècules

Sessió 1. Dimarts 25 de gener, a les 17.40 hores.

Moderadors: Lúdia Feliu (UdG), Benjamí Oller (IQS) i Antoni Planas (IQS)

- 5.1 **Introducció d'agents quimioterapèutics en forma de prodroga mitjançant oligonucleòtids.**
Anna Clua, IQAC-CSIC.
- 5.2 **Trobem la petjada del [o-COSAN]⁻ a les cèl·lules mare de glioblastoma mitjançant microespectroscòpia infraroja amb llum de sincrotró.**
Miquel Nuez-Martínez, ICMAB-CSIC.
- 5.3 **Determinació de l'estructura secundària de lipopèptids i de pèptids conjugats antimicrobians mitjançant ressonància magnètica nuclear.**
Gerard Riesco-Llach, LIPPSO, UdG.
- 5.4 **Nou tractament per a la cicatrització de ferides complexes basat en nanoconjugats de quatsomes i factor de creixement epidèrmic humà recombinant.**
Lúdia Ballell-Hosa, Institut de Ciència de Materials de Barcelona (ICMAB-CSIC).

Sessió 2. Dimecres 26 de gener, a les 10.00 hores.

Moderadors: Lúdia Feliu (UdG), Benjamí Oller (IQS) i Antoni Planas (IQS)

- 5.5 **Ús d'hidroxilamines per a l'estudi de la S-acilació.**
Carla Busquets-Hernández, Institut de Química Avançada de Catalunya (IQAC-CSIC).
- 5.6 **Síntesi i aplicacions en imatge PET de metallacages conjugades a ¹⁸F-organotrifluoroborats per a l'alliberament de cisplatí.**
Raúl Cosialls, Departament de Química Orgànica i Farmacèutica i Departament de Bioenginyeria, IQS-URL.
- 5.7 ***Extracellular vesicles as delivery systems for the treatment of Non-Small Cell Lung Cancer.***
Mònica Guarro Ferrer, Departament de Bioenginyeria, IQS-URL.

Sessió 3. Dimecres 26 de gener, a les 11.30 hores.

Moderadors: Lúdia Feliu (UdG), Benjamí Oller (IQS) i Antoni Planas (IQS)

- 5.8 **Desenvolupament de pèptids cíclics per al transport de teràpies a través de la barrera hematoencefàlica.**
Maria C. Lucana Meneses, Departament de Bioenginyeria, IQS-URL.
- 5.9 **Nous grups protectors fotolàbils basats en fluoròfors COUPY per a aplicacions terapèutiques.**
Marta López-Corrales, Departament de Química Inorgànica i Orgànica, UB.

5.10 **Desenvolupament d'una nanomedicina efectiva per a tractar la malaltia de Fabry.**

Judit Tomsen-Melero, Institut de Ciència de Materials de Barcelona, ICMAB-CSIC.

5.11 **Producció biotecnològica de vitamina B₁₂ en *Propionibacterium freudenreichii* subs. *Shermanii*.**

Álvaro Calvillo, Laboratori de Bioquímica, IQS-URL.

Simposi 6. Metodologia analítica

Sessió 1. Dimecres 26 de gener, a les 10.00 hores.

Moderadors: Anna de Juan (UB) i Rosa Maria Marcé (URV)

- 6.1 **Reciclatge de residus agroalimentaris per a la recuperació d'agents bioactius.**
Aina Mir-Cerdà, Departament d'Enginyeria Química i Química Analítica, UB.
- 6.2 **Caracterització de neurotransmissors nomoaminèrgics en cervells de ratolins exposats a N-etil-petilona.**
Marina Bellot, Departament de Química Analítica i Aplicada, School of Engineering (IQS).
- 6.3 **Presència de residus de fàrmacs en aigües dels rius Llobregat i Besòs.**
Pol Domínguez García, Departament de Química Analítica i Aplicada, School of Engineering (IQS).

Sessió 2. Dimecres 26 de gener, a les 11.30 hores.

Moderadors: Anna de Juan (UB) i Rosa Maria Marcé (URV)

- 6.4 **Autenticació de cafès mitjançant mètodes de GC-MS i quimiometria. Aplicació a la detecció i quantificació de mostres de cafè adulterades.**
Nerea Núñez, Departament d'Enginyeria Química i Química Analítica, UB.
- 6.5 ***Simultaneous updating of near-infrared calibration models using a sample selection algorithm based on D-optimal criterion.***
Andrés Cruz-Conesa, Departament de Química Analítica i Química Orgànica, URV.
- 6.6 **Ús de membranes d'inclusió polimèrica (PIMs) per al control de contaminants en aigües naturals.**
Berta Alcalde, Departament de Química, UdG.
- 6.7 **Anàlisi de tintes de bolígrafs per a l'estudi de documents falsificats mitjançant imatgeria de Raman i tècniques quimiomètriques.**
Adrián Gómez-Sánchez, Grup de Quimiometria, UB.
- 6.8 **Determinació de compostos orgànics d'interès ambiental en mostres d'aire.**
Reyes García, Departament de Química Analítica i Química Orgànica, URV.

Simposi 7. Medi ambient

Sessió 1. Dimarts 25 de gener, a les 11.00 hores.

Moderadors: Jordi Cuadros (IQS), Joan Grimalt (IDAEA-CSIC) i Rosa Maria Marcé (URV)

- 7.1 **Determinació de compostos d'alt volum de producció en peixos de consum.**
Sílvia Borrull, Departament de Química Analítica i Química Orgànica, URV.
- 7.2 **Electrorreducció del CO₂ a àcid fòrmic usant catalitzadors de magnesi i estany.**
Neus Sunyer Pons, Institut Català d'Investigació Química (ICIQ).
- 7.3 **PSresin basades en l'àcid medrònic per a l'anàlisi d'emissors alfa.**
Isaac Giménez Guerra, Departament d'Enginyeria Química i Química Analítica, UB.
- 7.4 ***Migration of microplastics from face masks.***
Giuseppina Zuri, Departament de Química Ambiental i Departament de Geociències (IDAEA-CSIC).
- 7.5 **Estudi de la distribució vertical de compostos orgànics volàtils i la seva influència en la formació d'ozó troposfèric.**
Isabel Díez, Institut de Diagnòstic Ambiental i Estudis de l'Aigua (IDAEA-CSIC).
- 7.6 **Influència de les inversions tèrmiques en l'aerosol orgànic: mostreig amb globus meteorològics.**
Clara Jaén Fló, Institut de Diagnòstic Ambiental i Estudis de l'Aigua (IDAEA-CSIC).
- 7.7 **Desenvolupament i optimització d'una metodologia per a l'obtenció de microesferes escintil·ladores de plàstic entrecruat.**
Arnau Coma Garcia, Departament d'Enginyeria Química i Química Analítica, UB.

Sessió 2. Dimarts 25 de gener, a les 16.00 hores.

Moderadors: Jordi Cuadros (IQS), Joan Grimalt (IDAEA-CSIC) i Rosa Maria Marcé (URV)

- 7.8 **Elucidant els mecanismes que governen la interacció de lantànids en sòls, argiles i materials rics en carboni.**
Joan Serra Ventura, Departament d'Enginyeria Química i Química Analítica, UB.
- 7.9 **Modelització del coeficient de distribució sòlid-líquid (K_d) de contaminants orgànics en matrius ambientals.**
Joel Fabregat Palau, Departament d'Enginyeria Química i Química Analítica, UB.
- 7.10 **Caracterització de contaminants orgànics persistents en *Larus audouinii* del Delta de l'Ebre mitjançant GC-Orbitrap-HRMS.**
Bernat Oró-Nolla, Departament de Química Ambiental (IDAEA-CSIC).

