

Tercera Trobada de Joves Investigadors dels Països Catalans



Tarragona, 26 i 27 de gener de 2004

Cronograma

Dilluns, 26 de gener de 2004	
8.30	Lliurament documentació
9.30	Inauguració
10.00	Conferència Plenària 1
11.00	Pausa cafè
11.30	Simposi 3.1 (Aula Magna) Simposi 4.1 (Aula 202)
13.10	Dinar
15.00	Conferència Plenària 2
16.00	Simposi 3.2 (Aula Magna) Simposi 4.2 (Sala de Graus)
17.20	Pausa cafè
17.50	Simposi 5.1 (Aula Magna) Simposi 7.1 (Sala de Graus)
19.10	Descans
19.25	Simposi 5.2 (Aula Magna) Simposi 7.2 (Sala de Graus)
22.00	Sopar

Dimarts, 27 de gener de 2004	
9.00	Conferència Plenària 3
10.00	Simposi 1.1 (Aula Magna) Simposi 2.1 (Aula 202)
11.20	Pausa cafè
11.50	Simposi 1.2 (Aula Magna) Simposi 2.2 (Aula 202)
13.10	Dinar
15.00	Simposi 1.3 + Simposi 6.1 (Aula Magna) Simposi 8.1 (Sala de Graus)
16.20	Pausa cafè
16.50	Simposi 6.2 (Aula Magna) Simposi 8.2 (Sala de Graus)
17.50	Pausa
18.00	Taula Rodona i Lliurament de premis
19.30	Cloenda

Simposi 1: Teoria i modelatge.

Simposi 2: Metodologia sintètica.

Simposi 3: Compostos organometàl·lics.

Simposi 4: Materials i química de l'estat sòlid.

Simposi 5: Biomolècules, metal·lobiomolècules i biomimetisme.

Simposi 6: Catàlisi.

Simposi 7: Medi ambient i qualitat de vida.

Simposi 8: Instrumentació, tecnologia de la mesura i control de processos.

La seu de la Trobada és la Facultat de Ciències Jurídiques de la URV.

La inauguració, les conferències plenàries, la taula rodona, la cloenda i els simposis 1, 3, 5 i 6 se celebraran a l'Aula Magna. Els simposis 2 i 4.1 se celebraran a l'Aula 202. Els simposis 4.2, 7 i 8 se celebraran a la sala de Graus.

Conferència plenària 1

Metal·lotioneïnes: una família excepcional de metal·loproteïnes.
Prof. Pilar González.
Departament de Química.
Universitat Autònoma de Barcelona

Dilluns, 26 de gener a les 10 hores.
Aula Magna de la Facultat de Ciències Jurídiques.

Conferència plenària 2

L'espectroscòpia analítica: una eina per a resoldre problemes.
Prof. Miguel de la Guardia.
Departament de Química Analítica.
Universitat de València

Dilluns, 26 de gener a les 15 hores.
Aula Magna de la Facultat de Ciències Jurídiques.

Conferència plenària 3

Músculs artificials, sensors físics, químics i amb sentit del tacte. Altres dispositius biomimètics
Prof. Toribio Fernández.
Centre d'Electroquímica i Materials Intel·ligents.
ETSII, Universitat Politècnica de Cartagena

Dimarts, 27 de gener a les 9 hores.
Aula Magna de la Facultat de Ciències Jurídiques.

Teoria i Modelatge

Sessió 1: Dimarts, 27 de gener. De 10 a 11.20 h. Aula Magna

Moderador: Dr. Miguel González Pérez (Dept. de Química Física, UB)

1.1.1 (10-10.20)

Estudi mitjançant la teoria del funcional de la densitat de diferents formes polimòrfiques de la sílice

Carina Arasa. Dept. de Química Física i CeRQT, UB.

1.1.2 (10.20-10.40)

Efecte del contraïns en la ruptura heterolítica de l'enllaç H-H

Maria Besora. Dep. de Química, UAB.

1.1.3 (10.40-11)

Mesures contínues de forma i camins de mínima distorsió.

Jordi Cirera. Dept. de Química Inorgànica i CeRQT, UB.

1.1.4 (11-11.20)

Estudis teòrics de mecanismes moleculars de reaccions catalitzades per enzims mitjançant una metodologia QM/MM. Aplicació a la LDH i la DHFR.

Silvia Ferrer. Dept. de Química Física, UV.

Sessió 2: Dimarts, 27 de gener. De 11.50 a 13.10 h. Aula Magna

Moderadora: Dra. Margarita Albertí (Dept. de Química Física, UB)

1.2.1 (11.50-12.10)

Estudi teòric de la naturalesa física de les interaccions anió- π .

Carolina Garau. Dept. de Química, UIB.

1.2.2 (12.10-12.30)

Estudi teòric del mecanisme de la reacció entre H_2COO i NO .

Alex Mansergas. Inst. d'Investigacions Químiques i Ambientals de Barcelona, CSIC.

1.2.3 (12.30-12.50)

Estudi dinàmic mecano-quàntic depenent del temps de la reacció de transferència de protó $\text{Ne} + \text{H}_2^+ \rightarrow \text{NeH}^+ + \text{H}$.

Jordi Mayneris. Dept. de Química Física i CeRQT, UB.

1.2.4 (12.50-13.10)

Simulacions de DM de sistemes ciclodextrínics.

Itziar Maestre. Dept. de Química, UAB.

Sessió 3: Dimarts, 27 de gener. De 15 a 15.40 h. Aula Magna

Moderador: Dr. Pere Deyà (Dept. de Química, UIB)

1.3.1 (15-15.20)

Técnica de feixos moleculars creuats per a l'estudi de col·lisions ió-àtom. Experiment i teoria.

Joan Sogas. Dept. de Química Física i CeRQT, UB.

1.3.2 (15.20-15.40)

Estudi comparatiu de l'adsorció d'1,3-butadiè, 1-butè i 2-*cis/trans*-butens en les superfícies de Pt(111) i Pd(111) mitjançant mètodes DFT.

Ana Valcárcel. Dept. de Química Física i Inorgànica, URV.

Metodologia sintètica

Sessió 1: Dimarts, 27 de gener. De 10 a 11.20 h. Aula 202

Moderador: Dr. Jaume Vilarrassa (Dept. de Química Orgànica, UB)

2.1.1 (10-10.20)

Dihidroxilació asimètrica d'1-ferrocenilalquens.
Agustí Bueno. Dept. de Química Orgànica, UB.

2.1.2 (10.20-10.40)

Síntesi enantioselectiva de productes naturals a partir d'epoxialcohols insaturats.
Xavier Ginesta. Dept. de Química Orgànica, UB.

2.1.3 (10.40-11)

Síntesi i estudi estructural de β -aminoàcids i β -pèptids ciclobutànics
Sandra Izquierdo. Dept. de Química, UAB.

2.1.4 (11-11.20)

Reaccions de ciclocondensació d'aminoalcohols quirals i derivats de δ -oxoàcids racèmics o proquirals.
Oriol Bassas. Lab. de Química Orgànica, Fac. de Farmàcia, UB.

Sessió 2: Dimarts, 27 de gener. De 11.50 a 13.10 h. Aula 202

Moderadora: Dra. Rosa M. Ortuño (Dept. de Química, UAB)

2.2.1 (11.50-12.10)

Síntesi de nous inhibidors de IPLA₂.
Xavier Matabosch. Dept. de Química Orgànica Biològica, IIQAB-CSIC.

2.2.2 (12.10-12.30)

Síntesi de 4-cloro-5,6-dihidropirido[2,3-*d*]pirimidin-7(8*H*)-ones assistida per microones.
Núria Mont. GEM, Inst. Químic de Sarrià, URL.

2.2.3 (12.30-12.50)

Síntesi estereoselectiva d'anàlegs ciclobutànics de nucleòsids.
Albert Rustullet. Dept. de Química, UAB.

2.2.4 (12.50-13.10)

Aplicació de la (*R*)- i (*S*)-*N*-fenilpantolactama en la preparació d'àcids α -aril- γ -aminobutírics enantiopurs.
Laura Sánchez. Lab. de Química Farmacèutica, Fac. de Farmàcia, UB.

Compostos organometàl·lics

Sessió 1: Dilluns, 26 de gener. De 11.30 a 13.10 h. Aula Magna.
Moderador: Dr. Miquel Seco (Dept. de Química Inorgànica, UB)

3.1.1 (11.30-11.50)

Catalitzadors macrocíclics triolefínics de Pd(0) recuperables: formació de materials híbrids orgànic-inorgànics.

Belén Blanco. Dept. de Química, UAB.

3.1.2 (11.50-12.10)

Hidrurs clúster heterobimetàl·lics amb unitats [W₃Cu] i [W₃Pd] coordinats a difosfines.

Marta Feliz. Dept. de Ciències Experimentals, UJI.

3.1.3 (12.10-12.30)

Lligands polimacrocíclics i els seus complexos homo i heterometàl·lics.

Judit Masllorens. Dept. de Química, UdG.

3.1.4 (12.30-12.50)

Macrocicles funcionalitzats amb conjunts d'àtoms donadors de caràcter tou: propietats electroquímiques i luminescents.

Manuel de Miguel. Dept. de Química, UAB.

3.1.5 (12.50-13.10)

Un nou mètode per activar l'enllaç C-F: l'atac nucleòfil de l'anell {Pt(μ-S)₂Pt}.

Ainara Nova. Dept. de Química, UAB.

Sessió 2: Dilluns, 26 de gener. De 16.00 a 17.20 h. Aula Magna
Moderadora: Dra. Anna M. Masdeu (Dept. de Química Física i Inorgànica, URV)

3.2.1 (16.00-16.20)

Nous complexos amb lligands carbens en coordinació tripoidal.

Elena Mas. Dept. de Química Inorgànica i Orgànica, UJI.

3.2.2 (16.20-16.40)

Estudi de processos d'autoensamblatge per a la formació de polígons moleculars quadrats i triangulars de pal·ladi i platí.

Laura Rodríguez. Dept. de Química Inorgànica, UB.

3.2.3 (16.40-17)

Síntesi i estudis magnètics de complexos polinuclears de la 1^a sèrie de transició i lligands dicarboxilats.

Raúl Baldomá. Dept. de Química Inorgànica, UB

3.2.4 (17-17.20)

Síntesi de compostos de platí (II) amb grups ferrocenil òpticament purs.

Sonia Pérez. Dept. de Química Inorgànica, UB

Materials i química de l'estat sòlid

Sessió 1: Dilluns, 26 de gener. De 11.30 a 13.10 h. Aula 202

Moderadora: Dra. Concepció Rovira (Inst. de Ciència de Materials de Barcelona, CSIC)

4.1.1 (11.30-11.50)

Reacció del caolí amb hidrogensulfat de sodi a temperatura elevada.

Ivan Caballero. Dept. d'Enginyeria Química i Metal·lúrgia, UB.

4.1.2 (11.50-12.10)

Recobriments metàl·lics i ceràmics per FBR-CVD.

Jordi Pérez. Lab. de Ciència de Materials, Inst. Químic de Sarrià, URL .

4.1.3 (12.10-12.30)

Organització i propietats electròniques de derivats tetratiafulvalè en una interfase sòlid-líquid.

Elba Gomar. Inst. de Ciència de Materials de Barcelona, CSIC.

4.1.4 (12.30-12.50)

Modificació de silicats laminars per a la seva utilització en la síntesis de nanocomposites

Montse Cendra. Lab. de Ciència de Materials, Inst. Químic de Sarrià, URL.

4.1.5 (12.50-13.10)

Desenvolupament de nous biomaterials per enginyeria de teixits.

Laia Francesch. Lab. de Ciència de Materials, Inst. Químic de Sarrià, URL

Sessió 2: Dilluns, 26 de gener. De 16.00 a 17.20 h. Sala de Graus

Moderador: Dr. Salvador Borrós (Lab. de Ciència de Materials, IQS, URL)

4.2.1 (16.00-16.20)

Mètodes de química suau: aproximació versàtil per a l'obtenció de materials sensibles amb propietats inusuals.

David Muñoz. Inst. de Ciència de Materials de Barcelona, CSIC.

4.2.2 (16.20-16.40)

Construcció esglaonada de nous complexos oligomèrics de Pt^{IV} amb lligands 1,2-diselenolens

Xavi Ribas. Inst. de Ciència de Materials de Barcelona, CSIC.

4.2.3 (16.40-17.00)

El mètode DELOS[®]: producció eco-eficient de materials finament dividits.

Santi Sala. Inst. de Ciència de Materials de Barcelona, CSIC.

4.2.4 (17.00-17.20)

Preparació i cristal·loquímica de nous oxinitrurs de tungstè amb propietats elèctriques.

Jordi Fernández. Dept. de Química Inorgànica, UB.

Biomolècules, metal·lobiomolècules i biomimetisme

Sessió 1: Dilluns, 26 de gener. De 17.50 a 19.10 h. Aula Magna

Moderador: Dr. Jordi Bujons (Inst. d'Invest. Quím. i Amb. de Barcelona, CSIC)

5.1.1 (17.50-18.10)

Materials d'alliberació controlada per aplicacions mèdiques.

Marc Campillo. Dept. de Química, UAB.

5.1.2 (18.10-18.30)

Aplicació del *N*-nitronucleòsids a la síntesi d'oligonucleòtids modificats.

Olga Gorchs. Dept. de Química Orgànica, UB.

5.1.3 (18.30-18.50)

Síntesi i estudis de nous lligands d'avidina i estreptavidina.

Pedro Hidalgo. Dept. de Química Orgànica, UB.

5.1.4 (18.50-19.10)

Disseny dels primers anàlegs del KM-01, mimètics de la brassinolida, amb possible activitat brassinoesteroide.

Iban Jové. Lab. d'Esteroids, Inst. Químic de Sarrià, URL.

Sessió 2: Dilluns, 26 de gener. De 19.25 a 20.45 h. Aula Magna

Moderador: Dr. Gregori València (Inst. d'Invest. Quím. i Amb. de Barcelona, CSIC).

5.2.1 (19.25-19.45)

Citrocrom C: noves aplicacions en biotecnologia i salut.

Noemí Marina. Inst. d'Investigacions Químiques i Ambientals de Barcelona, CSIC.

5.2.2 (19.45-20.05)

Nous inhibidors de l'amiloidosi relacionada amb la transtiretina.

Teresa Mairal. Inst. d'Investigacions Químiques i Ambientals de Barcelona, CSIC.

5.2.3 (20.05-20.25)

Glicosiltransferases: biosíntesi de xenoantígens i mecanismes de reacció.

Ana Monegal. Lab. de Bioquímica, Inst. Químic de Sarrià, URL.

5.2.4 (20.25-20.45)

Síntesi i activitat atraient de la feromona sexual de la plaga del moniato *Cylas formicarius elegantulus*.

Tania Sureda. Inst. d'Investigacions Químiques i Ambientals de Barcelona, CSIC.

Catàlisi

Sessió 1: Dimarts, 27 de gener. De 15.40 a 16.20 h. Aula Magna

Moderador: Dr. Oriol Rossell (Dept. de Química Inorgànica, UB)

6.1.1 (15.40-16.00)

Primera reacció d'hidroboració catalítica asimètrica de perfluoroalquens.

Anna M. Segarra. Dept. de Química Física i Inorgànica, URV.

6.1.2 (16.00-16.20)

Catalitzadors de Ni/MgO per una producció neta del 2-feniletanol.

Olga Bergadà. Dept. de Química Física i Inorgànica, URV.

Sessió 2: Dimarts, 27 de gener. De 16.50 a 17.50 h. Aula Magna

Moderadora: Dra. Montserrat Gómez (Dept. Química Inorgànica, UB)

6.2.1 (16.50-17.10)

Carbonilació catalítica d'heterocicles aromàtics.

Verònica Cáliz. Dept. de Química, UdG.

6.2.2 (17.10-17.30)

Nanopartícules metàl·liques: síntesi, caracterització i aplicacions catalítiques.

David Picurelli. Dept. de Química Inorgànica, UB.

6.2.3 (17.30-17.50)

Preparació i estudi de nous materials basats en MoO₃-ZrO₂.

Bàrbara Samaranch. Dept. de Química Inorgànica, UB.

Medi ambient i qualitat de vida

Sessió 1: Dilluns, 26 de gener. De 17.50 a 19.10 h. Sala de Graus

Moderadora: Dra. Cristina Palet (Dept. de Química, UAB)

7.1.1 (17.50-18.10)

Aplicacions dels processos de membrana per a la recuperació i purificació d'oligosacàrids d'interès a partir de residus de biomassa vegetal.

Àngels Cano. Dept. de Química, UAB.

7.1.2 (18.10-18.30)

Síntesi de polímers amb empremta molecular i aplicació a l'extracció en fase sòlida de mostres ambientals i biològiques.

Ester Caro. Dept. de Química Analítica i Química Orgànica, URV.

7.1.3 (18.30-18.50)

Distribució de contaminants orgànics al Delta de l'Ebre i estimació de llur emissió a la mediterrània occidental.

Anna I. Gómez. Inst. d'Investigacions Químiques i Ambientals de Barcelona, CSIC.

7.1.4 (18.50-19.10)

Anàlisi de contaminants orgànics en aigües residuals d'indústries papereres.

Anna Latorre. Inst. d'Investigacions Químiques i Ambientals de Barcelona, CSIC.

Sessió 2: Dilluns, 26 de gener. De 19.25 a 20.45 h. Sala de Graus

Moderadora: Dra. Manuela Hidalgo (Dept. de Química, UdG).

7.2.1 (19.25-19.45)

Caracterització de l'acidesa residual de fases estacionàries de cromatografia de líquids en fase inversa.

Alberto Méndez. Dept. de Química Analítica, UB.

7.2.2 (19.45-20.05)

Metodologies analítiques basades en l'espectrometria de masses per a l'anàlisi d'herbicides en mostres ambientals

Oscar Núñez. Dept. de Química Analítica, UB.

7.2.3 (20.05-20.25)

Desenvolupament d'un sensor molecular per a la determinació de sulfats en mostres naturals.

M^a Nieves Piña. Dept. de Química, UIB.

7.2.4 (20.25-20.45)

Desenvolupament de mètodes de preconcentració per a l'herbicida glifosat i el seu metabolit AMPA.

Carolina Rios. Dept. de Química, UdG.

Instrumentació, tecnologia de la mesura i control de processos

Sessió 1: Dimarts, 27 de gener. De 15.00 a 16.00 h. Sala de Graus

Moderador: Dr. Martí Rosés (Dept. de Química Analítica, UB).

8.1.1 (15.00-15.20)

Quimiometria de segon ordre en dades cromatogràfiques. Aplicació a pics amb molta deriva de línia base.

Enric Comas. Dept. de Química Analítica i Química Orgànica, URV.

8.1.2 (15.20-15.40)

Derivats de polisacàrids com a selectors quirals en la separació d'enantiòmers per cromatografia de repartiment centrífug (CPC).

Eva Pérez. Lab. de Química Farmacèutica, Fac. de Farmàcia, UB.

8.1.3 (15.40-16.00)

La cromatografia de gasos amb detecció olfactivomètrica (GCO): una eina imprescindible en l'anàlisi química de les aromes dels aliments.

M. Pilar Martí. Dept. de Química Analítica i Química Orgànica, URV.

8.1.4 (16.00-16.20)

Síntesi i estudi de dos nous agents de solvatació quiral de la família dels arilcarbinols.

Pau Nolis. Dept. de Química, UAB.

Sessió 2: Dimarts, 27 de gener. De 16.50 a 17.30 h. Sala de Graus

Moderadora: Dra. Teresa Galceran (Dept. de Química Analítica, UB).

8.2.1 (16.50-17.10)

Aplicació de la quimiometria als processos de plegament de proteïnes mitjançant tècniques espectroscòpiques.

Susana Navea. Dept. de Química Analítica, UB.

8.2.2 (17.10-17.30)

Mesura de fricció amb microscopia de força lateral (LFM).

Gerard Oncins. Dept. de Química Física i CBN, UB.

Taula rodona

Dimarts, 27 de gener a les 18.00 hores. Aula Magna, Facultat de Ciències Jurídiques.

Títol: Hi ha innovació a la indústria química del nostre país?

Participants: **Dra. Carmen Claver**
Dept. de Química Física i Inorgànica, URV.

Dra. Berta Ponsati
Lipotec, S.A.

Dr. Ferran Pujol
Laboratoris Almirall Prodesfarma

Representant
Associació Empresarial Química de Tarragona

Moderador: **Dr. Miquel Àngel Pericàs**
Dept. de Química Orgànica, UB.
Institut Català d'Investigació Química
