



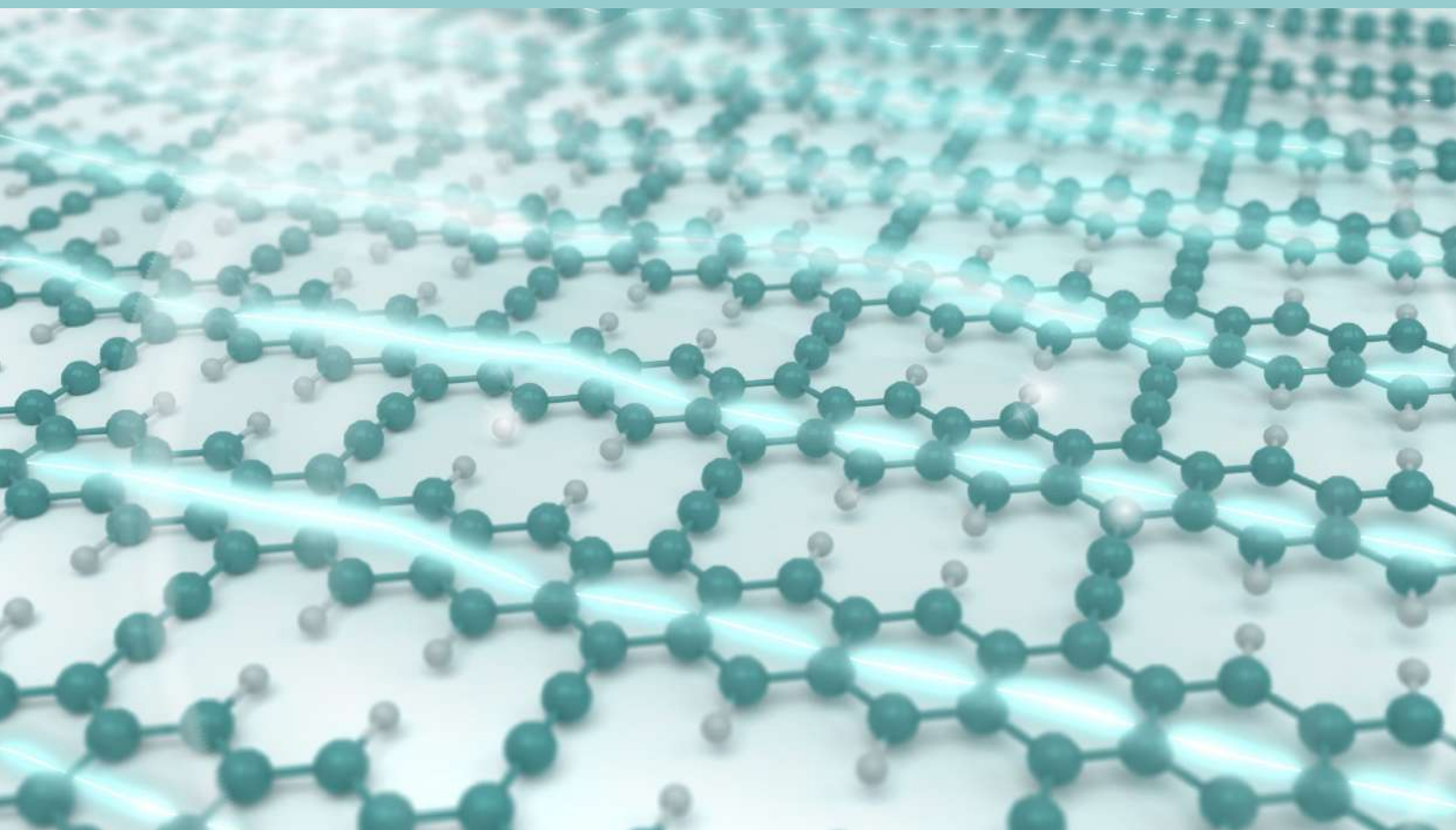
Institut de Química Teòrica  
i Computacional



UNIVERSITAT DE  
BARCELONA



# Institut de Química Teòrica i Computacional de la Universitat de Barcelona (IQTCUB)



Crazynes: Carbon-Based Two-Dimensional Composites with Anisotropic Properties  
*The Journal of Physical Chemistry C*

## Memòria d'activitats 2019



La creació de l'Institut de Química Teòrica i Computacional de la Universitat de Barcelona (IQTCUB) va ser aprovada al Consell de Govern en sessió ordinària el 21 de novembre de 2007. Des de l'abril de 2018 tinc l'honor de ser-ne el Director i vull aprofitar aquesta oportunitat d'encapçalar la memòria anual de l'IQTCUB per agrair explícitament al Dr. Jordi Poater per haver participat a l'anterior equip de direcció de l'IQTCUB i també al Dr. Carles Curutchet per incorporar-se a l'equip de direcció de l'Institut. Així mateix, des del punt de vista de reconeixement extern la concessió de l'ajut de María de Maeztu ha permès la

incorporació de nous becaris i postdocs a l'Institut que aportin tant un augment de la qualitat i quantitat de la nostra investigació. Un altre punt important ha estat la incorporació d'investigadors més sèniors a través de programes com el Beatriu de Pinós, Juan de la Cierva, Ramón y Cajal i ICREA.

L'objectiu comú dels projectes de recerca duts a terme a l'Institut és l'ús de mètodes arrelats a la química quàntica encara que recentment, amb la incorporació de grups experimentals dels nostres departaments s'han pogut iniciar col·laboracions que van més enllà de la Química Computacional, fomentant i augmentant el caràcter multidisciplinari de la nostra recerca. Tradicionalment, la recerca de l'IQTCUB es distingeix del que hom espera d'un químic tradicional, ja que els instruments emprats pels nostres investigadors no es troben en un laboratori típic sinó que es troben en un "laboratori" de càlcul que sovint és el punt d'entrada als nostres recursos computacionals o en centres de supercomputació amb capacitat de càlcul encara més gran.

L'objectiu principal de la Química Teòrica i Computacional és aconseguir una comprensió detallada dels processos químics i físics per ajudar a interpretar els resultats experimentals i fer prediccions que condueixin a nous experiments. En fer-ho, aquesta disciplina pot aportar nous conceptes que permetin avançar en diferents aspectes com ara en el disseny racional de nous materials amb propietats físiques específiques i en la seva aplicació en dispositius electrònics i magnètics; en el descobriment de nous fàrmacs i a comprendre els processos bioquímics al darrere; en noves reaccions que proporcionen una millora dels processos químics per fer-los més eficaços i més respectuosos amb el medi ambient; i en proposar noves fonts d'energia sostenibles per afrontar els reptes que actualment té la nostra societat. A més, hem d'integrar en la nostra recerca noves eines com l'aprenentatge automàtic (intel·ligència artificial), la realitat virtual i nous recursos informàtics (computació "exascale" i quàntica).

A handwritten signature in black ink, consisting of a stylized 'E' followed by a long horizontal stroke that tapers to a point.

Eliseo Ruiz  
Director de l'IQTCUB

# CONTINGUTS DE LA MEMÒRIA

---

I. DESCRIPCIÓ DE L'IQTCUB.....	3
I.1 Equip directiu	3
I.2 Línies de recerca de l'IQTCUB	4
I.3 Membres de l'IQTCUB	5
I.4 Equip tècnic	10
I.5 Equipaments	10
II. ACTIVITATS DE L'IQTCUB.....	23
II.1 Activitats de tipus general (cursos, beques i divulgació)	23
II.2 Seminaris i conferències de l'IQTCUB	31
II.3 Investigadors convidats per l'IQTCUB	34
III. ACTIVITAT CIENTÍFICA DELS MEMBRES DE L'IQTCUB .....	37
III.1 Resultats més rellevants	37
III.2 Llista de publicacions	55
Articles publicats	55
Capítols de llibres i proceedings	69
III.3 Altres activitats	70
Tesis doctorals	70
Treballs Final de Màster	72
Participació a congressos	76
Estades en centres externs	96
Participació en projectes d'investigació	97

## I. DESCRIPCIÓ DE L'IQTCUB

L'Institut de Química Teòrica i Computacional de la Universitat de Barcelona (IQTCUB), va ser aprovat pel Consell de Govern del 27 de novembre del 2007, i té com a objectius principals potenciar la recerca en els àmbits de la Química Teòrica i Computacional al sí de la UB mitjançant la vertebració de l'activitat científica en quatre grans línies de recerca, tot afavorint, així mateix, les activitats interdisciplinàries que permetin abordar nous reptes en aquesta disciplina.

### I.1 EQUIP DIRECTIU

Durant aquest 2019 la direcció de l'IQTCUB ha estat,

<b>Prof. Eliseo Ruiz Sabin</b>	<i>Director</i>
<b>Prof. Carles Curutchet Barat</b>	<i>Secretari (Set.-Des.)</i>
<b>Prof. Jordi Poater Teixidor</b>	<i>Secretari (Gen.-Set.)</i>
<b>Prof. Francesc Illas Riera</b>	<i>Vocal</i>

## I.2 LÍNIES DE RECERCA DEL IQTCUB

La recerca que es desenvolupa en l'actualitat al IQTCUB s'encabeix dins de tres grans línies de recerca, que es detallen a continuació.

### 1. Energia sostenible i neta

Quins són els mecanismes darrera dels processos químics vinculats a la conversió energètica? La modelització mitjançant la química computacional pot ajudar en el disseny de nous materials catalítics que afavoreixin la producció d'electricitat en sistemes de cel·la de combustible, així com també en la millora dels catalitzadors involucrats en l'activació del CO<sub>2</sub> i la conversió química o electroquímica d'aquest en molècules profitoses com ara el metà, l'etilè o l'etanol. A més a més, les aproximacions teòriques poden proveir una percepció valuosa en els mecanismes darrera de les interaccions petroli-aigua-roca tan importants en la millora de l'extracció de petroli.

### 2. Nanomaterials i nanoelectrònica

Quin component químic presenta les millor propietats magnètiques o electròniques? L'anàlisi mitjançant mètodes d'estructura electrònica un coneixement acurat de les bases físiques d'aquestes propietats. Els materials moleculars més prometedors poden incloure radicals orgànics, compostos de coordinació i materials 2D o 3D, que són interessants des del punt de vista tecnològic per la seva transferència d'energia, propietats magnètiques i elèctriques en l'intent de trobar materials multifuncionals. Per últim, els estudis computacionals són també extremadament útils per a proposar experiments que portin a la síntesi d'aquests tipus de materials.

### 3. Biomedicina i matèria tova

Quins són els mecanismes moleculars clau en els sistemes biològics? Les simulacions computacionals amb milers d'àtoms poden aplicar-se a la modelització de biomaterials i mecanismes moleculars en molècules biològicament rellevants. La implementació teòrica de la química quàntica en aquests sistemes és molt útil per a investigar l'estructura i la reactivitat de proteïnes i enzims, el disseny de fàrmacs, els processos en membranes cel·lulars, les reaccions enzimàtiques en medi congestionat i les nanopartícules *soft* en solució.

### I.3 MEMBRES DE L'IQTCUB

L'IQTCUB està constituït per un total de 101 docents/investigadors. A continuació es mostra la llista completa de membres indicant la seva categoria acadèmica i el departament i secció de la UB al qual pertanyen.

Cognoms	Nom	Gènere	Depart./Unitat (Secció)
<b>Catedràtics</b>			
Aguilar Navarro	Antonio	M	Ciència de Materials i <u>Química Física</u>
Alemanys i Cahner	Pere	M	Ciència de Materials i <u>Química Física</u>
Alvarez Reverter	Santiago	M	<u>Química Inorgànica</u> i Química Orgànica
Aullón López	Gabriel	M	<u>Química Inorgànica</u> i Química Orgànica
Bofill Villà	Josep Maria	M	Química Inorgànica i <u>Química Orgànica</u>
González Pérez	Miguel	M	Ciència de Materials i <u>Química Física</u>
Illas Riera	Francesc	M	Ciència de Materials i <u>Química Física</u>
Luque Garriga	Francisco J.	M	Nutrició, <u>Ciències Alimentació</u> i Gastronóm.
Mas Pujadas	Francesc	M	Ciència de Materials i <u>Química Física</u>
Novoa Vide	Juan José	M	Ciència de Materials i <u>Química Física</u>
Rubio Martínez	Jaime	M	Ciència de Materials i <u>Química Física</u>
Ruiz Sabin	Eliseo	M	<u>Química Inorgànica</u> i Química Orgànica
Sayós Ortega	Ramón	M	Ciència de Materials i <u>Química Física</u>

#### Professors Titulars

Costa Sala	Ramón	M	<u>Química Inorgànica</u> i Química Orgànica
D. P. Ribeiro Moreira	Iberio	M	Ciència de Materials i <u>Química Física</u>
Giménez Font	Xavier	M	Ciència de Materials i <u>Química Física</u>
Huarte Larrañaga	Fermín	M	Ciència de Materials i <u>Química Física</u>
Lucas Alcorta	Josep Maria	M	Ciència de Materials i <u>Química Física</u>
Llunell Marí	Miquel	M	Ciència de Materials i <u>Química Física</u>
Mota Valeri	Fernando	M	Ciència de Materials i <u>Química Física</u>
Paniagua Valle	Juan Carlos	M	Ciència de Materials i <u>Química Física</u>
Solé Sabaté	Albert	M	Ciència de Materials i <u>Química Física</u>
Sousa Romero	Carne	F	Ciència de Materials i <u>Química Física</u>
Vilaseca Font	Eudald	M	Ciència de Materials i <u>Química Física</u>

**Professors Agregats**

Bonet Ruiz	Jordi	M	<u>Enginyeria Química</u> i <u>Química Analítica</u>
Curutchet Barat	Carles E.	M	Farmàcia i Tec. Farma. i <u>Físicoquímica</u>
Deumal Solé	Mercè	F	Ciència de Materials i <u>Química Física</u>
Gamallo Belmonte	Pablo	M	Ciència de Materials i <u>Química Física</u>
Madurga Díez	Sergio	M	Ciència de Materials i <u>Química Física</u>
Ribas Ariño	Jordi	M	Ciència de Materials i <u>Química Física</u>
Reigada Sanz	Ramón	M	Ciència de Materials i <u>Química Física</u>
Viñes Solana	Francesc	M	Ciència de Materials i <u>Química Física</u>

**Professors d'Investigació ICREA**

Bromley	Stefan T.	M	Ciència de Materials i <u>Química Física</u>
Neyman	Konstantin M.	M	Ciència de Materials i <u>Química Física</u>
Poater Teixidor	Jordi	M	Química Inorgànica i <u>Química Orgànica</u>
Rovira Virgili	Carme	F	Química Inorgànica i <u>Química Orgànica</u>

**Professors Lectors**

Bidon-Chanal Badia	Axel	M	Nutrició, <u>Ciències Alimentació</u> i Gastronom.
Cirera Fernández	Jordi	M	<u>Química Inorgànica</u> i Química Orgànica
Jover Modrego	Jesús	M	<u>Química Inorgànica</u> i Química Orgànica
Plesu Popescu	Alexandra Elena	F	<u>Enginyeria Química</u> i Química Analítica

**Professors Associats**

Corbella Morató	Marina	F	Farmàcia i Tec. Farma. i <u>Físicoquímica</u>
Cremades Martí	Eduard	M	<u>Química Inorgànica</u> i Química Orgànica
Figueras Valls	Marc	M	Ciència de Materials i <u>Química Física</u>
Ginex	Tiziana	F	Nutrició, <u>Ciències Alimentació</u> i Gastronom.
Jurado Mañas	Anabel	F	Ciència de Materials i <u>Química Física</u>
López Marne	Estefanía	F	Ciència de Materials i <u>Química Física</u>
Piqué Caufapé	Oriol	M	Ciència de Materials i <u>Química Física</u>
Tercero Mohedano	Javier	M	<u>Química Inorgànica</u> i Química Orgànica
Valero Montero	Rosendo	M	Ciència de Materials i <u>Química Física</u>
Viayna	Antonio	M	Nutrició, <u>Ciències Alimentació</u> i Gastronom.

**Investigadors Postdoctorals***Beatriu de Pinós-Juan de la Cierva*

Gómez Coca	Silvia	F	<u>Química Inorgànica</u> i <u>Química Orgànica</u>
Morales García	Ángel	M	Ciència de Materials i <u>Química Física</u>

*Ramón y Cajal*

Calle Vallejo	Federico	M	Ciència de Materials i <u>Química Física</u>
Echeverría López	Jorge	M	<u>Química Inorgànica</u> i <u>Química Orgànica</u>

*Contracte Projecte de Recerca*

De Souza Pinheiro	Silvana	F	Farmàcia i Tec. Farma. i <u>Físicoquímica</u>
Escartín Esteban	José María	M	<u>Química Inorgànica</u> i <u>Química Orgànica</u>
Prats García	Hèctor	M	Ciència de Materials i <u>Química Física</u>
Valero Montero	Rosendo	M	Ciència de Materials i <u>Química Física</u>

*Altres*

Abraham B. de Morais	Mariana	F	<u>Química Inorgànica</u> i <u>Química Orgànica</u>
Albareda Piquer	Guillem	M	<u>Química Inorgànica</u> i <u>Química Orgànica</u>
Vilà Casanova	Arnau	M	Ciència de Materials i <u>Química Física</u>

**Investigadors Predoctorals***Beca Programa María de Maeztu*

Colomer Llombart	Eduard	M	Ciència de Materials i <u>Química Física</u>
Gonzalo Palao	Daniel	M	Farmàcia i Tec. Farma. i <u>Físicoquímica</u>
Lleopart Motis	Genis	M	Ciència de Materials i <u>Química Física</u>
Morales Salvador	Raúl	M	Ciència de Materials i <u>Química Física</u>
Privat Contreras	Cristian	M	Ciència de Materials i <u>Química Física</u>
Vidal Ramon	Daniel	M	<u>Química Inorgànica</u> i <u>Química Orgànica</u>
Vílchez	David	M	Nutrició, <u>Ciències Alimentació</u> i Gastronom.



*Beca FI*

Aledavood	Elnaz	F	Nutrició, <u>Ciències Alimentació</u> i <u>Gastronom.</u>
Balcells Nadal	Cristina	F	Ciència de Materials i <u>Química Física</u>
Blanco Andrés	Pablo Miguel	M	Ciència de Materials i <u>Química Física</u>
Lozano Reis	Pablo	M	Ciència de Materials i <u>Química Física</u>
Macià Escatllar	Antoni	M	Ciència de Materials i <u>Química Física</u>
Nin Hill	Alba	F	Química Inorgànica i <u>Química Orgànica</u>

*Beca FPI*

Almacellas Salillas	David	M	Química Inorgànica i <u>Química Orgànica</u>
Bernuz Fitó	Efrem	M	Ciència de Materials i <u>Química Física</u>
Coinés López-Nieto	Joan	M	Química Inorgànica i <u>Química Orgànica</u>
Esquivias Baut. Lisb.	Oriol	M	Química Inorgànica i <u>Química Orgànica</u>
Martín Rodríguez	Alejandro	M	<u>Química Inorgànica</u> i <u>Química Orgànica</u>
Piñero Vargas	Juan José	M	Ciència de Materials i <u>Química Física</u>
Santiago Piera	Raúl	M	Ciència de Materials i <u>Química Física</u>

*Beca FPU*

Amoza Dávila	Martín	M	<u>Química Inorgànica</u> i <u>Química Orgànica</u>
Vilaplana Saiz	Marta	F	Ciència de Materials i <u>Química Física</u>

*Beca ITN UE*

Francese	Tommaso	M	Ciència de Materials i <u>Química Física</u>
Mnevets	Daniil	M	Química Inorgànica i <u>Química Orgànica</u>

*Beca UB / ADR / APIF*

Blancafort Jorquera	Miquel	M	Ciència de Materials i <u>Química Física</u>
López Berbel	Martí	M	Ciència de Materials i <u>Química Física</u>
Roncero Barrero	Cristina	F	Ciència de Materials i <u>Química Física</u>
Svobodova	Adela	F	Ciència de Materials i <u>Química Física</u>
Velásquez Benites	Juan Diego	M	<u>Química Inorgànica</u> i <u>Química Orgànica</u>

*Beca CONICYT*

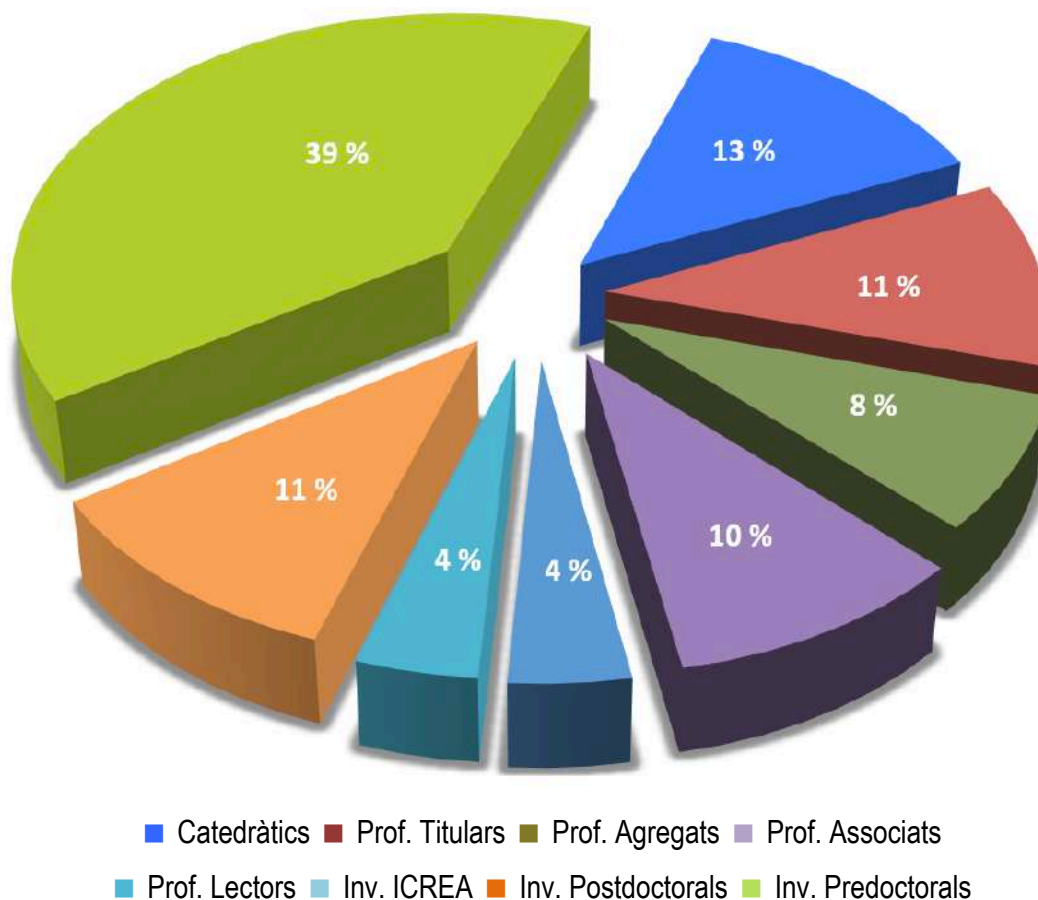
Zamora	William J.	M	Nutrició, <u>Ciències Alimentació</u> i <u>Gastronom.</u>
--------	------------	---	---

*Beca Doctorat Industrial*

Espel Grekopoulos	Joan	M	Farmàcia i Tec. Farma. i <u>Físicoquímica</u>
Vázquez López	Javier	M	Nutrició, <u>Ciències Alimentació</u> i Gastronom.

*Altres*

Alonso Benito	Gerard	M	Ciència de Materials i <u>Química Física</u>
Barazorda-Ccahuana	Haruna	F	Ciència de Materials i <u>Química Física</u>
Cánovas Montes	Manuel Anto.	M	Ciència de Materials i <u>Química Física</u>
Kamalinahad	Saedeh	F	Ciència de Materials i <u>Química Física</u>
Ozaydin	Gül Beste	F	Farmàcia i Tec. Farma. i <u>Físicoquímica</u>
Saranjam	Leila	F	Ciència de Materials i <u>Química Física</u>
Vega Domínguez	Lorena	F	Ciència de Materials i <u>Química Física</u>
Vila Julià	Guillem	M	Ciència de Materials i <u>Química Física</u>



Distribució de membres docents/investigadors de l'IQTCUB segons la categoria acadèmica.

## I.4 EQUIP TÈCNIC

A part del personal acadèmic involucrat en la recerca desenvolupada a l'IQTCUB, el manteniment de la infraestructura de càlcul de l'Institut precisa d'un equip tècnic format actualment per les dues persones següents:

<b>Jordi Inglés Camats</b>	<i>Responsable de sistemes</i>
<b>Teresa Arenal Porcel</b>	<i>Tècnic informàtic</i>

## I.5 EQUIPAMENTS

Actualment, el gruix principal dels equipaments computacionals dels que disposa l'IQTCUB està format per nou clústers de càlcul disposats en dos sales condicionades dins la facultat de Física i Química. L'espai destinat a tots els clúster de càlcul es troba refrigerat per dues màquines d'aire condicionat de 44,000 i 66,000 frigories, respectivament. En el cas de l'iqtc06 i iqtc07 es troben a un altre espai refrigerat per una màquina d'aire condicionat de 30,000 frigories i dos de 9,000 frigories.

## CLÚSTERS DE CÀLCUL ---

**cerqt2** (valor invertit 400.000 €)

<i>Tipus de màquina</i>	Clúster SUN (4 armaris)
<i>Sistema Operatiu</i>	SLES10
<i>Serveis</i>	Clúster de càlcul i servidor de discos (raid amb màster fent un total de 2.5TB). Servidor DHCP intern
<i>Estructura</i>	Màster + 111 nodes en clúster
<i>Comentaris</i>	Accessible des de l'exterior. Conté tant processadors Xeon (32 bits) com Opterons (64 bits), això implica instal·lar aplicacions per 32 i 64 bits. Cada grup és propietari d'alguns nodes en concret. Conté una pantalla+teclat integrada a l'armari per gestionar totes les màquines.

*Especificacions:*

**Màster**

CPU: Opteron Dual a 1,80 GHz (64bits)

RAM: 8 GB

HD: 1 disc de 146 GB + cabina discos amb 2,5 TB

Xarxa: 2 targetes de xarxa. Una 10/100 que comunica amb l'exterior i una 100/1000 que permet interconnectar màster i nodes (xarxa interna)

**7 nodes 32 bits a 3,06 GHz Sun Fire V60X**

CPU: Xeon Dual a 3,06 GHz (32 bits)

RAM: 3 GB

HD: 2 discos de 36 GB

Xarxa: 2 targetes 100/1000 (xarxa interna) + 2 targetes lom 100 (administració interna entre nodes)

**92 nodes 32 bits a 2,80 GHz Sun Fire V60X**

CPU: Xeon Dual a 2,80 GHz (32 bits)

RAM: 6 nodes a 4 GB, 86 nodes a 3 GB

HD: 2 discos de 36 GB

Xarxa: 2 targetes 100/1000 (xarxa interna) + 2 targetes lom 100 (administració interna entre nodes)

**11 nodes 64 bits a 1,80 GHz Sun Fire V20Z**

CPU: Opteron Dual a 1,80 GHz (64 bits)

RAM: 10 nodes a 8 GB, 2 nodes a 16 GB

HD: 10 nodes de 2 discos de 73 GB, 2 nodes de 2 discos de 73 GB i 300 GB, respectivament

Xarxa: 2 targetes 100/1000 (xarxa interna) + 2 targetes lom 100 (administració interna entre nodes)

**1 node 64 bits a 2,20 GHz Sun Fire V20Z**

CPU: Opteron Dual a 2,20 GHz (64 bits)

RAM: 16 GB

HD: 2 discos de 146 GB

Xarxa: 2 targetes 100/1000 (xarxa interna) + 2 targetes lom 100 (administració interna entre nodes)

**iqtc01** (valor invertit 250.000 €)

<i>Tipus de màquina</i>	Clúster HP
<i>Sistema Operatiu</i>	Debian Stable
<i>Serveis</i>	Clúster de càlcul
<i>Estructura</i>	80 nodes en clúster
<i>Comentaris</i>	Tots els processadors són de 64 bits

*Especificacions:*

**80 nodes AMD HP ProLiant DL145 G2**

CPU: 2 AMD Opteron 275 Dualcore a 2,2 GHz

RAM: 8 GB

HD: 2 discos de 80 GB

Xarxa: 2 targetes 100/1000 (xarxa interna)

Xarxa d'administració ILO

**iqtc02** (valor invertit 78.000 €)

<i>Tipus de màquina</i>	Clúster HP
<i>Sistema Operatiu</i>	SLES10
<i>Serveis</i>	Clúster de càlcul
<i>Estructura</i>	26 nodes en clúster
<i>Comentaris</i>	Tots els processadors són de 64 bits

*Especificacions:*

**17 nodes INTEL HP ProLiant DL160 G5**

CPU: 2 Xeon QuadCore 2,66 GHz

RAM: 16 GB

HD: 2 discos de 250 GB

Xarxa: 2 targetes 100/1000 (xarxa interna)

Xarxa d'administració ILO

**5 nodes INTEL HP ProLiant DL160 G5**

CPU: 2 Xeon QuadCore 2,66 GHz

RAM: 16 GB

HD: 4 discos de 250 GB

Xarxa: 2 targetes 100/1000 (xarxa interna)

Xarxa d'administració ILO

**1 node INTEL HP ProLiant DL160 G5**

CPU: 2 Xeon QuadCore 2,66 GHz

RAM: 16 GB

HD: 2 discos de 500 GB

Xarxa: 2 targetes 100/1000 (xarxa interna)

Xarxa d'administració ILO

**3 INTEL HP ProLiant DL160 G5 nodes**

CPU: 2 Xeon QuadCore 2,66 GHz

RAM: 32 GB

HD: 2 discos de 250 GB

Xarxa: 2 targetes 100/1000 (xarxa interna)

Xarxa d'administració ILO

**iqtc03** (valor invertit 33.000 €)

*Tipus de màquina* Clúster HP

*Sistema Operatiu* SLES10

*Serveis* Clúster de càlcul

*Estructura* 11 nodes en clúster

*Comentaris* Tots els processadors són de 64 bits. Forma part del clúster iqtc02

*Especificacions:*

**11 nodes INTEL HP ProLiant DL140 G3**

CPU:2 Xeon QuadCore 2,33 GHz

RAM:16-32 GB

HD: 2 discos de 80 GB

Xarxa: 2 targetes 100/1000 (xarxa interna)

Xarxa d'administració ILO

**iqtc04** (valor invertit 460.000 €)

*Tipus de màquina* Clúster HP

*Sistema Operatiu* SLES11

*Serveis* Clúster de càlcul

*Estructura* 101 nodes en clúster

*Comentaris* Tots els processadors són de 64 bits. Xarxa Infiniband

*Especificacions:***95 INTEL HP ProLiant DL160 G6 nodes**

CPU: 2 Xeon SixCore 2,66 GHz

RAM: 48 GB

HD: 1 disc de 1 TB

Xarxa: 2 targetes 100/1000 (xarxa interna)

Xarxa: 2 targetes Infiniband (xarxa càlcul)

Xarxa d'administració ILO

**4 INTEL HP ProLiant DL160 G6 nodes**

CPU: 2 Xeon SixCore 2,66 GHz

RAM: 48 GB

HD: 4 discos de 500 GB

Xarxa: 2 targetes 100/1000 (xarxa interna)

Xarxa: 2 targetes Infiniband (xarxa càlcul)

Xarxa d'administració ILO

**2 INTEL HP ProLiant DL160 G6 nodes**

CPU: 2 Xeon SixCore 2,66 GHz

RAM: 48 GB

HD: 1 disc de 500 GB

Xarxa: 2 targetes 100/1000 (xarxa interna)

Xarxa: 2 targetes Infiniband (xarxa càlcul)

Xarxa d'administració ILO

**iqtc05** (valor invertit 32.000 €)*Tipus de màquina* Clúster SGI*Sistema Operatiu* SLES11*Serveis* Clúster de càlcul*Estructura* 4 nodes en clúster*Comentaris* Tots els processadors són de 64 bits*Especificacions:***4 nodes AMD SGI H2106-G7**

CPU: 4 Opteron 6276 16-core 2,3 GHz

RAM: 256 GB

HD: 2 discos de 1 TB

Xarxa: 2 targetes 100/1000 (xarxa interna)

Xarxa d'administració IPMI

**iqtc06** (valor invertit 420.000 €)

<i>Tipus de màquina</i>	Clúster heterogeni
<i>Sistema Operatiu</i>	SLES11.
<i>Serveis</i>	Clúster de càlcul
<i>Estructura</i>	32 nodes en clúster
<i>Comentaris</i>	Tots els processadors són de 64 bits

*Especificacions:*

**25 nodes INTEL HP ProLiant DL560 Gen8**

CPU: 4 x 2,2 GHz Xeon OctoCore

RAM: 512 GB

HD: 2 discos de 300 GB

Xarxa: 4 targetes 100/1000 (xarxa interna)

Xarxa: 2 targetes 10GB (xarxa càlcul)

Xarxa d'administració ILO

**7 nodes INTEL Supermicro SuperServer 8017R-TF+**

CPU: 4 x 2,3 GHz Xeon OctoCore

RAM: 512 GB

HD: 3 discos de 1 TB

Xarxa: 2 targetes 100/1000 (xarxa interna)

Xarxa: 2 targetes 10GB (xarxa càlcul)

Xarxa d'administració IPMI

**iqtc07** (valor invertit 40.000 €)

<i>Tipus de màquina</i>	Clúster Supermicro
<i>Sistema Operatiu</i>	SLES12
<i>Serveis</i>	Clúster de càlcul
<i>Estructura</i>	2 nodes en clúster
<i>Comentaris</i>	Tots els processadors són de 64 bits

*Especificacions:*

**2 nodes Supermicro 2048U RT4**

CPU: 4 x 2,6 GHz Intel Broadwell 10Core

RAM: 512 GB or 1 TB

HD: 1 x 1 TB

Xarxa: 4 targetes 100/1000 (xarxa interna)

Xarxa: 2 targetes 10GB (xarxa càlcul)

Xarxa d'administració ILO



**iqtc08** (valor invertit 175.000 €)

Tipus de màquina	Clúster HP
Sistema Operatiu	Centos 7.2
Serveis	Clúster de càlcul
Estructura	22 nodes en clúster
Comentaris	Tots els processadors són de 64 bits

*Especificacions:*

**22 HP Proliant DL360 Gen9**

CPU: 2 x 2,6 GHz Intel Xeon E5-2690 v4 14-core

RAM: 768 GB

HD: 1 x 1 TB

Xarxa: 4 targetes 100/1000 (xarxa interna)

Xarxa: 2 targetes 10GB (xarxa càlcul)

Xarxa d'administració ILO

**Clúster GPU** (valor invertit 75.000 €)

Tipus de màquina	Clúster heterogeni
Sistema Operatiu	SLES11, Centos 7
Serveis	Clúster de càlcul amb GPU
Estructura	5 nodes en clúster
Comentaris	Tots els processadors són de 64 bits

*Especificacions:*

**Node**

CPU: 1 Intel Core i7 950 3,06 GHz

RAM: 16 GB

HD: 1 disc de 1TB (Sistema operatiu)

Xarxa: 1 targeta 100/1000 xarxa interna

GPU: 1 NVIDIA GTX580, 1 NVIDIA GTX480

**Node INTEL Tyan FT72B7015**

CPU: 2 Xeon SixCore 2,66 GHz

RAM: 48 GB

HD: 1 disc dur de 500 GB

Xarxa: 4 targetes 100/1000 (xarxa interna)

Xarxa d'administració IPMI

GPU: 8 NVIDIA GTX580

**Node**

CPU: 1 AMD FX-4100 QuadCore 3,30 GHz  
RAM: 16 GB  
HD: 1 disc dur de 1 TB  
Xarxa: 1 targeta 100/1000 (xarxa interna)  
GPU: 1 NVIDIA GTX770

**Node INTEL ASUS ESC4000 G2**

CPU: 2 x 2 GHz Xeon SixCore  
RAM: 32 GB  
HD: 1 disc dur de 2 TB  
Xarxa: 2 targetes 100/1000 (xarxa interna)  
Xarxa d'administració IPMI  
GPU: 4 NVIDIA GTX TITAN

**Node INTEL ASUS ESC4000 G2**

CPU: 2 x 2,4 GHz Xeon SixCore  
RAM: 32 GB  
HD: 1 disc dur de 1 TB  
Xarxa: 2 targetes 100/1000 (xarxa interna)  
Xarxa d'administració IPMI  
GPU: 4 NVIDIA GTX TITAN BLACK

**Node AZServer 4G3S**

CPU: 2 x 2,4 GHz Xeon E5-2620v3  
RAM: 32 GB  
HD: 1 disc dur de 1 TB  
Xarxa: 2 targetes 100/1000 (xarxa interna)  
Xarxa d'administració IPMI  
GPU: 4 NVIDIA GTX 980

**Node SIE LADON BROADWELL**

CPU: 2 x 2,4 GHz Xeon E5-2640v4  
RAM: 128 GB  
HD: 1 disc dur de 1 TB  
Xarxa: 2 targetes 100/1000 (xarxa interna)  
Xarxa d'administració IPMI  
GPU: 4 NVIDIA TESLA K40

**Node SIE LADON BROADWELL 2**

CPU: 2 x 2,4 GHz Xeon E5-2640v4  
RAM: 128 GB  
HD: 1 disc dur de 1 TB  
Xarxa: 2 targetes 100/1000 (xarxa interna)  
Xarxa d'administració IPMI  
GPU: 2 NVIDIA TESLA P100

### 2 Nodes AZServer 4G3S

CPU: 2 x 2,2 GHz Dual Xeon E5-2600v4 (10 cores)  
RAM: 128 GB  
HD: 2 disc dur de 2 TB  
Xarxa: 4 targetes 100/1000 (xarxa interna)  
Xarxa d'administració IPMI  
GPU: 4 NVIDIA GEFORCE GTX 1070Ti

## SERVIDORS

---

### Servidors de discos glusterfs (valor invertit 54.000 €)

<i>Tipus de màquina</i>	Clúster DELL
<i>Sistema Operatiu</i>	SLES 11
<i>Serveis</i>	Clúster de discos formant 8TB de disc per exportar mitjançant GlusterFS les aplicacions i el directori de treball en xarxa a tots els clústers
<i>Estructura</i>	2 nodes en clúster
<i>Comentaris</i>	Servei crític amb un SAI dedicat i fonts redundants

#### *Especificacions:*

#### **Node INTEL DELL PowerEdge 2950 III**

CPU: 2 x 2,50 GHz Xeon QuadCore E5420  
RAM: 8 GB  
HD: 1 disc 80 GB (Sistema operatiu) + 4 discs 1 TB (raid 5)  
Xarxa: 2 targetes 100/1000 xarxa interna

<i>Tipus de màquina</i>	Clúster HP
<i>Sistema Operatiu</i>	SLES 11
<i>Serveis</i>	Clúster de discos formant 32TB de disc per exportar mitjançant GlusterFS les dades d'usuari a tots els clústers
<i>Estructura</i>	2 nodes
<i>Comentaris</i>	Servei crític amb un SAI dedicat i fonts redundants

#### *Especificacions:*

#### **Node INTEL HP ProLiant DL180 G6**

CPU: 2 x 2,27 GHz Xeon QuadCore E5520  
RAM: 56 GB  
HD: 12 discs 2 TB (raid 5)  
Xarxa: 4 targetes 100/1000 xarxa interna  
Xarxa d'administració ILO

**Node INTEL HP ProLiant DL380e Gen8**

CPU: 2 x 2,20 GHz Xeon QuadCore E5-2407

RAM: 48 GB

HD: 12 discs 2 TB (raid 5)

Xarxa: 4 targetes 100/1000 xarxa interna

Xarxa d'administració ILO

*Tipus de màquina* Supermicro

*Sistema Operatiu* Centos 7.6

*Serveis* Clúster de discos formant 64TB de disc per exportar mitjançant NFS les aplicacions i el directori de treball en xarxa a tots els clústers

*Estructura* 1 node

*Comentaris* Servei crític amb fonts redundants

*Especificacions:*

**Node Supermicro 2U**

CPU: 2 x 2,20 GHz Xeon 4210

RAM: 64 GB

HD: 8 discs 8 TB (raid 5)

Xarxa: 4 targetes 100/1000

Xarxa: 2 targetes 10GB

*Tipus de màquina* DELL

*Sistema Operatiu* Centos 7.6

*Serveis* Clúster de discos formant 100TB de disc per exportar mitjançant Glusterfs les aplicacions i el directori de treball en xarxa a tots els clústers

*Estructura* 1 node

*Comentaris* Servei crític amb fonts redundants

*Especificacions:*

**Node PowerEdge R740XD**

CPU: 2 x 2,20 GHz Xeon 4110

RAM: 64 GB

HD: 10 discs 10 TB (raid 5)

Xarxa: 4 targetes 100/1000

Xarxa: 2 targetes 10GB

**Servidors d'entrada portals (valor invertit 2.300 €)**

*Tipus de màquina* 2 màquines redundants HP ProLiant DL120 G5

*Sistema Operatiu* Debian stable

*Serveis* SGE Execution Host, Heartbeat, ssh server

*Estructura* 2 nodes redundants

*Comentaris* Portals d'entrada dels usuaris per enviar càlculs i accedir a les dades

*Especificacions:*

**Node HP ProLiant DL120 G5**

CPU: 1 Xeon Dual Core 2,33 GHz

RAM: 8 GB

HD: 1 disc de 160 GB (Sistema operatiu)

Xarxa: 2 targetes 100/1000 xarxa interna

Xarxa d'administració ILO

**Servidors de virtualització** (*valor invertit 28.300 €*)

*Tipus de màquina* 4 màquines redundants

*Sistema Operatiu* Debian stable

*Serveis* Xenha i tots els serveis virtuals ofertats a l'IQTCUB

*Estructura* 4 nodes redundants

*Comentaris* Màquina que encabeix les màquines virtuals del IQTCUB (SGE, dhcp, servidor llicències etc.). Suportada per un SAI conjuntament amb portals

*Especificacions:*

**2 Nodes INTEL DELL PowerEdge 2950 III**

CPU: 2 x 2,50 GHz Xeon QuadCore E5420

RAM: 8 GB

HD: 1 disc 80 GB (Sistema operatiu) + 4 discs 1 TB (raid 5)

Xarxa: 2 targetes 100/1000 xarxa interna

Xarxa d'administració ILO

**2 Nodes HP ProLiant DL120 G5**

CPU: 1 Xeon Dual Core 2,33 GHz

RAM: 8 GB

HD: 2 discos de 160 GB (Sistema operatiu)

Xarxa: 2 targetes 100/1000 xarxa interna

*Tipus de màquina* 1 màquina

*Sistema Operatiu* Centos 7.3

*Serveis* Entorn de proves

*Estructura* 1 nodes

*Comentaris* Màquina de reproducció dels serveis

*Especificacions:*

**1 Node DELL PowerEdge R640**

CPU: 2 x 2 GHz Xeon Gold 6138

RAM: 128 GB

HD: 2 discos de 2 TB (raid 1)

Xarxa: 2 targetes 100/1000 xarxa interna

Xarxa d'administració iDrac

**Servidor de visualització** (valor invertit 3.000 €)

*Tipus de màquina* 1 màquina HP ProLiant DL385

*Sistema Operatiu* SLES10

*Serveis* Màquina per utilització d'aplicacions gràfiques

*Estructura* 1 màquina

*Comentaris* Suportada per un SAI

*Especificacions*

**Màster HP ProLiant DL385**

CPU : 2 AMD Opteron 275 Dualcore a 2,2 GHz

RAM: 4 GB

HD: 6 discos formant un raid de 734 GB

Xarxa: 2 targetes de xarxa. Una 10/100 que comunica amb l'exterior i una 100/1000 que permet interconnectar màster i nodes (xarxa interna)

**ALTRES**

---

A part dels serveis anteriors tenim altres màquines (pc's a mode de servidors temporals) i maquinari de computació per donar servei de xarxa a tot el conjunt dels serveis de l'IQTCUB.

1. Màquina Backup DELL R515 (màquina de backup amb 4 TB de disc i un SAI de suport).
2. Màquina cintes HP MSL4048 (màquina de cintes amb 48 cintes amb capacitat aproximada de 1TB/cinta).
3. Màquina d'administració (pc amb 3 targetes de xarxa per suport a incidències crítiques).
4. Màquina proxy (servidor que dona sortida a la xarxa publica des de la xarxa de l'iqt cub).
5. Switch Layer 3 HP Procurve de 24 ports (dona cobertura a tota la infraestructura dels CPD del IQTCUB).
6. 8 Switchs Layer 2 Dlink de 48 ports (xarxa interna clústers cerqt2, iqt c01, iqt c02, iqt c03).
7. 4 Switchs Layer 2 HP de 48 ports (xarxa interna clúster iqt c04, iqt c05 i iqt c06).

8. 3 Switchs Infiniband Voltaire de 36 ports (xarxa càlcul iqt04).
9. Switch modulable HP (8 mòduls per xarxa interna clúster iqt01,iqt02,iqt03).
10. 2 Switchs modulables HP 10 GB (xarxa interna clúster iqt06 i servidors de fitxers).
11. 2 Switchs Netgear XS728T 10 GB (xarxa interna i dades clúster iqt08).
12. 1 Swtich HPE 1810-24 (xarxa interna clúster iqt08).
13. 1 portàtil MSI amb ulleres VR Oculus Rift-S (investigació amb realitat virtual)

El valor invertit de l'equipament/maquinari addicional del que disposa l'IQTCUB és d'aproximadament 53.000 €.

## RESUM DEL POTENCIAL DE CÀLCUL \_\_\_\_\_

Cores.....4,062 c

Memòria..... 38,886 GB RAM

Discs de Càlcul.....266 TB

Discs d'Usuari..... 132 TB

El valor invertit aproximat total, tenint en compte també el material consumible com cablejat de xarxa i d'altres és de **2.100.000 €\***

\*Aquesta xifra no contempla els costos d'aire condicionat ni els corresponents als quadres elèctrics de les sales.

## II. ACTIVITATS DE L'IQTCUB

### II.1 ACTIVITATS DE TIPUS GENERAL

A continuació es detallen les accions i activitats de tipus general dutes a terme per l'IQTCUB al llarg de l'any 2019.

- a. **Promoció i incentivació a la recerca.** Enguany l'IQTCUB ha concedit un *Ajut d'iniciació a la recerca* consistent en un contracte personal per un valor de 2.680 €. Aquest tipus d'ajuts estan destinats a estudiants que estiguin acabant o que hagin finalitzat els seus estudis de grau o llicenciatura i té una durada de 6 mesos, amb l'objectiu de facilitar la realització d'un màster oficial de la UB i la col·laboració en les tasques de recerca dels grups de l'IQTCUB. L'ajut han estat concedit a l'estudiant Silvia Sodric per iniciar el màster sota la direcció del Dr. Jordi Poater.

*Despesa associada: 2.680 €*



Anunci dels ajuts d'iniciació a la recerca de l'IQTCUB d'enguany.



- b. **10<sup>a</sup> Jornada de l'IQTCUB.** El dia 31 de Maig de 2019 tingué lloc la desena edició d'aquesta Jornada de divulgació científica organitzada pel Dr. Jordi Cirera. En aquesta jornada membres de l'IQTCUB i d'altres conferencians de reconegut prestigi internacional exposaren els seus treballs més recents. En l'edició d'enguany destacà la participació del Prof. Dr. Martin Kaupp de la Universitat Tècnica de Berlin amb la conferència titulada *New Quantum Methods and New Applications: NMR/EPR Parameters, Local Hybrid Functionals, and more*, i del Prof. Dr. John E. McGrady de la Universitat d'Oxford amb la conferència titulada *Pushing molecules around: a theoretical perspective on the chemical bond, and how to modify it*. A més a més, van participar el Dr. Axel Bidon-Chanal (*Computational biology and gastronomy research in the food and nutrition Torribera campus*), en Joan Coines (*Mechanistic insights into substrate- assisted glycoside hydrolases*) i en Antoni Macià (*A computational view on astronomical silicate nanoclusters*) tots tres de la Universitat de Barcelona i de l'IQTCUB. A més a més es presentaren 17 contribucions en format pòster (<https://www.iqtc.ub.edu/news/posters-at-the-iqtcub-symposium-2019/>). Les despeses totals de la Jornada es corresponen al cost del transport i l'estada dels professor convidats i del servei de càtering ofert a tots assistents.

*Despesa pressupostada: 1.491 € + 2.000 € ajuda de la Facultat de Química*

 Institut de Química Teòrica i Computacional  
 UNIVERSITAT DE BARCELONA

 EXCELENCIA MARIA DE MAEZTU

**10th IQTC-UB Symposium**  
 31 May 2019  
 Barcelona, Spain  
 Auditori Enric Casassas 9:30–15:30 h

Keynote Speakers:

 **Prof. Dr. Martin Kaupp**  
 Technische Universität Berlin, Germany

 **Prof. John McGrady**  
 University of Oxford, UK

Invited Speakers:  
 Dr. Axel Bidon-Chanal Badia  
 Antoni Macià  
 Joan Coines

Anunci de la 10<sup>a</sup> jornada de l'IQTCUB.

- c. **Reunió del Consell Assessor Científic de l'IQTCUB.** El dia 29 de Novembre de 2019 tingué lloc la primera reunió del consell assessor científic de l'IQTCUB. En aquesta jornada van participar els Profs. Agustí Lledós (Universitat Autònoma de Barcelona), John McGrady (University of Oxford), Sofia Calero (Universidad Pablo de Olavide), Federico Gago (Universidad de Alcalá), Carmen Domene (University of Bath) i Roser Valentí (Goethe-Universität Frankfurt).

*Despesa pressupostada: 3.650 €*

AVVVVVVV  
121070110  
**iqtc**  
01071101  
VVVVVVVV

Institut de Química Teòrica  
i Computacional  
UNIVERSITAT DE BARCELONA

EXCELENCIA  
MÀRIA  
DE MAEZTU

**Scientific Advisory Board  
Meeting**  
29 Nov 2019  
Barcelona, Spain

Auditori Enric Casassas 9:30 - 15:00

Speakers:  
Dr. Stefan Bromley  
Dr. Jordi Cirera  
Dr. Jordi Poater  
Dr. Jordi Ribas  
Dr. Carme Rovira  
Dr. Eliseo Ruiz  
Dr. Rosendo Valero  
Sr. David Vilchez

UNIVERSITAT DE  
BARCELONA

Anunci de la jornada.

d. **Activitats de divulgació científica.** El Prof. Xavier Giménez Font ha realitzat la següent sèrie de xerrades de divulgació científica durant aquest any 2019:

1. "UB s'Apropa 19". INS Domènec Perramon, Arenys de Munt, 9 Gener 2019.
2. "UB s'Apropa 19". INS Manuel Blancafort, La Garriga, 11 Gener 2019.
3. "UB s'Apropa 19". INS Miramar, Viladecans, 11 Gener 2019.
4. "Les Microones i les Ones de Ràdio. Què són i com ens afecten?", Toc-Toc UB Science Dissemination Program, INS Miquel Bosch i Jover, Artés. 15 Gener 2019.
5. "Apropa't a la UB!". Visit of INS JM Quadrado, La Ciutadella (Menorca). Universitat de Barcelona, 16 Gener 2019.
6. "UB s'Apropa 19". INS Vil·la Romana, La Garriga, 16 Gener 2019.
7. "UB s'Apropa 19". INS Gallecs, Mollet del Vallès, 18 Gener 2019.
8. "UB s'Apropa 19". EDUCEM II, Granollers, 23 Gener 2019.
9. "UB s'Apropa 19". INS Sentmenat, Sentmenat, 23 Gener 2019.
10. "UB s'Apropa 19". INS La Roca, La Roca del Vallès, 24 Gener 2019.
11. "UB s'Apropa 19". INS Escola del Treball, Granollers, 29 Gener 2019.
12. "UB s'Apropa 19". Escola Sant Gabriel, Sant Adrià del Besòs, 29 Gener 2019.
13. "UB s'Apropa 19". INS Lluís Domènech i Montaner, Canet de Mar, 30 Gener 2019.
14. "UB s'Apropa 19". INS Pau Vila, Sabadell, 30 Gener 2019.
15. "UB s'Apropa 19". INS Lauro, Les Franqueses del Vallès, 31 Gener 2019.
16. "UB s'Apropa 19". INS Vilamajor, Sant Pere de Vilamajor, 1 Febrer 2019.
17. "UB s'Apropa 19". INS Gallecs, Mollet del Vallès, 1 Febrer 2019.
18. "UB s'Apropa 19". INS Vall del Tenes, Santa Eulàlia de Ronçana, 4 Febrer 2019.
19. "UB s'Apropa 19". INS Alba del Vallès, Group A, Sant Fost de Campsentelles, 5 Febrer 2019.
20. "UB s'Apropa 19". INS Alba del Vallès, Group B, Sant Fost de Campsentelles, 5 Febrer 2019.
21. "UB s'Apropa 19". Escola Jesuïtes Sant Gervasi – Infant Jesús, Barcelona, 6 Febrer 2019.
22. "UB s'Apropa 19". INS Miramar, Viladecans, 8 Febrer 2019.
23. "UB s'Apropa 19". INS Torre de Malla, Parets del Vallès, 20 Febrer 2019.

24. "UB s'Apropa 19". INS Polinyà, Polinyà, 22 Febrer 2019.
25. "UB s'Apropa 19". INS Lauro, Les Franqueses del Vallès, 28 Febrer 2019.
26. "UB s'Apropa 19". INS Lliçà, Social & Human Sci. students, Lliçà d'Amunt, 1 Març 2019.
27. "UB s'Apropa 19". INS Lliçà, Technology & Science students, Lliçà d'Amunt, 1 Març 2019.
28. "UB s'Apropa 19". Escola Pia, Caldes de Montbui, 13 Març 2019.
29. "La màgia de l'aigua", Toc-Toc UB Science Dissemination Program, Centre Cívic El Sortidor, Barcelona. 13 Març 2019.
30. "La màgia de l'aigua", VIII Diada de la Ciència, 2019, Escola Pia, Caldes de Montbui. 14 Març 2019.
31. "Les Microones i les Ones de Ràdio. Què són i com ens afecten?", Toc-Toc UB Science Dissemination Program, Escola Sant Gabriel, Sant Adrià del Besòs, 18 Març 2019.
32. "UB s'Apropa 19". INS Celestí Bellera, Granollers, 19 Març 2019.
33. "UB s'Apropa 19". INS Mollet, Mollet del Vallès, 20 Març 2019.
34. "UB s'Apropa 19". INS Torres i Bages, Hospitalet de Llobregat, 20 Març 2019.
35. "Apropa't a la UB!". Visit of Escola Lleó XIII. Universitat de Barcelona, 22 Març 2019.
36. "Com es creen els elements químics? Quins formen el nostre cos?", Visions de Ciència Series, Biblioteca Sagrada Família, Barcelona. 25 Març 2019.
37. "La Màgia de l'Aigua". Toc-Toc UB Science Dissemination Program, INS Salvador Dalí, El Prat de Llobregat, 26 Març 2019.
38. "UB s'Apropa 19". INS Torres i Bages, Hospitalet de Llobregat, 27 Març 2019.
39. "La Màgia de l'Aigua". Pessics de Ciència Program, Centre Cultural Sant Josep, Hospitalet de Llobregat, 27 Març 2019.
40. "UB s'Apropa 19". INS Vinyet, Sitges, 28 Març 2019.
41. "UB s'Apropa 19". INS Manolo Hugué, Caldes de Montbui, 12 Abril 2019.
42. "UB s'Apropa 19". INS Eugeni Xammar, L'Ametlla del Vallès, 26 Abril 2019.
43. "UB s'Apropa 19". Escola Lleó XIII, Barcelona, 3 Maig 2019.
44. "Mechanochemistry – Macroscopic versus Microscopic Mechanics and Dynamics". Key-note talk at "Symposium on Movement Technologies", University of Applied Sciences and Arts – Dortmund, Dortmund, Germany, 23 Maig 2019.

45. "Les Microones i les Ones de Ràdio. Què són i com ens afecten?", Toc–Toc UB Science Dissemination Program, Biblioteca Sagrada Família, Barcelona. 5 Juny 2019.
46. "La Màgia de l'Aigua". Toc–Toc UB Science Dissemination Program, Institut Castellbisbal, Castellbisbal, 1st Group, 4 Octubre 2019.
47. "La Màgia de l'Aigua". Toc–Toc UB Science Dissemination Program, Institut Castellbisbal, Castellbisbal, 2nd Group, 4 Octubre 2019.
48. "La Màgia de l'Aigua". Toc–Toc UB Science Dissemination Program, Institut Castellbisbal, Castellbisbal, 3rd Group, 4 Octubre 2019.
49. "Llibres de Divulgació Científica", Màster de Comunicació Científica, Univ. Barcelona, 28 Octubre 2019.
50. "L'origen dels elements químics", 8es Jornades Ensenyament de la Química a Catalunya, Facultat de Química, Universitat de Barcelona, Barcelona, 6 Novembre 2019.
51. "L'origen dels elements químics", La Setmana de la Ciència 2019, CRP Garraf, Universitat Politècnica de Catalunya, Vilanova i la Geltrú, 11 Novembre 2019.
52. "La màgia de l'aigua", La Setmana de la Ciència 2019, La Salle Bonanova, Barcelona. 12 Novembre 2019.
53. "La màgia de l'aigua", La Setmana de la Ciència 2019 i Toc–Toc UB Science Dissemination Program, Institut Jaume Salvador, Sant Joan Despí. 20 Novembre 2019.
54. "L'Aire que Respirarem", Toc–Toc UB Science Dissemination Program, Escola Immaculada Concepció, Barcelona. 21 Novembre 2019.
55. "L'Aire que Respirarem", Toc–Toc UB Science Dissemination Program, Institut Montserrat Roig, Barcelona. 27 Novembre 2019.
56. "La Màgia de l'Aigua". Toc–Toc UB Science Dissemination Program, Escola Patronat Domènech, Barcelona, 20 Desembre 2019.

A més a més, el Prof. Giménez ha realitzat entrevistes a mitjans de comunicació. Tot seguit recollim tot aquest material i d'altre que es pot accedir via web:

1. "A la caza del CO<sub>2</sub>", entrevistat per Andrea Nogueira.  
Diari el País, 6 Gener 2019.  
[https://elpais.com/cultura/2019/01/04/actualidad/1546601992\\_837620.html](https://elpais.com/cultura/2019/01/04/actualidad/1546601992_837620.html)
2. "La Màgia de l'Aigua", sèrie de conferències "Pessics de Ciència", Centre Cultural Sant Josep.  
L'Hospitalet de Llobregat, 27 de Març 2019.  
<https://www.youtube.com/watch?v=3oRjF6LEvug&feature=youtu.be>
3. "SABER: Let's make high students performance possible, even in STEM courses", METID & Faculty seminar.  
Istituto Politecnico di Milano, 16 Maig 2019.  
<https://www.youtube.com/watch?v=gljsJ1uYPm0&feature=youtu.be>
4. "El mejor truco para enfriar bebidas a toda velocidad sin congelador", entrevistat per Anna Macià.  
Diari La Vanguardia, 3 Juliol 2019.  
<https://www.lavanguardia.com/comer/tendencias/20190627/463134511552/enfriar-bebidas-ola-de-calor-refrescos-velocidad-rapido.html?fbclid=IwAR26NWDDnwlIDxdyTpgPdyx7lablYNCdTafJqy5CgKBI5u87TCJwdcweh0l>
5. "Fem possible un ensenyament universtari de qualitat", entrevistat per Antoni Portell, Director of CIFE, Centre d'Innovació i Formació en Educació.  
Universitat de Vic, 16 Juliol 2019.  
<https://mon.uvic.cat/cife/xavier-gimenez-ensenyar-de-forma-entenedora-eficient-i-engrescadora-es-mes-possible-que-mai-i-es-a-labast-de-tots/>

6. “N’hi ha prou amb prohibir els cotxes vells? Deu coses que pot fer Barcelona contra la crisi climàtica”, entrevistat per Andreu Merino.  
Revista Nació Digital, 3 Octubre 2019.  
<https://www.naciodigital.cat/noticia/188363/prou/amb/prohibir/cotxes/vells/deu/coses/pot/fer/barcelona/contra/crisi/climatica>
  
7. “Què són les bateries d’ió–liti, el motiu del Premi Nobel de Química d’enguany”, entrevistat per Sandra Mestres.  
Programa Notícies vespre, BetevéTelevisió, 11 Octubre 2019.  
<https://beteve.cat/btv-noticies-vespre/btv-noticies-vespre-1388/>
  
8. “Els filtres de partícules als motors diésel”, entrevistat per Xavier Muixí.  
Programa Notícies vespre, BetevéTelevisió, 27 Novembre 2019.  
<https://beteve.cat/btv-noticies-vespre/btv-noticies-vespre-1427/>

Per altra banda, a continuació fem un recull d’altres activitats de divulgació realitzades per altres membres de l’IQTC en aquest any 2019:

1. “*Fem Química al Laboratori*”  
Antonio Aguilar, Carme Sousa i Pablo Gamallo, gener-febrer 2019.
  
2. “*V Festa de la Ciència de la UB*”  
Hèctor Prats, Pablo Gamallo, Universitat de Barcelona, 17 maig 2019.  
<http://www.ub.edu/laubdivulga/festacienciaub/festacienciaV/index.html>

## II.2 SEMINARIS I CONFERÈNCIES DE L'IQTCUB

El Dr. Jordi Poater ha continuat organitzant els seminaris i conferències de l'IQTCUB d'enguany. Un total de catorze seminaris i/o conferències que es detallen a continuació:

1. **Dr. Maytal Caspary** (Israel Institute of Technology), Haifa, Israel.  
*Recent advances in modeling  $Fe_2O_3$  for water splitting catalysis*  
23 Gener 2019.
2. **Dr. Umberto Terranova** (University of Cardiff) Cardiff, Regne Unit.  
*Iron sulphide minerals: phase stability and oxidation behavior*  
8 Febrer 2019.
3. **Dr. Alejandro Rodríguez** (Int. Center of Theoretical Physics), Trieste, Itàlia.  
*The fuzzy border between Molecular Simulations and data science*  
5 Març 2019.
4. **Dr. Mercedes Alfonso** (IAS-5, INM-9), Jülich, Alemanya.  
*Understanding ligand selectivity in bitter taste receptors using multiscale molecular dynamics simulations*  
22 Març 2019.
5. **Prof. Aliaksandr Bandarenka** (Technische Universität München), Munic, Alemanya.  
*Why electrolytes control the catalytic activity*  
8 Abril 2019.
6. **Dr. Taehum Lee** (Yonsei University), Seul, Corea del Sud.  
*Characterization of ultrathin oxidic metal layers on another surrogate metal support: A theoretical surface science approach*  
9 Abril 2019.



7. **Dr. Julian Gebhardt** (Max Planck Institute), Hamburg, Alemanya.  
*New Materials from Simulations*  
26 April 2019.
  
8. **Prof. Anela Ivanova** (Sofia University), Sofia, Bulgària.  
*Molecular design of new organic TADF emitters*  
3 Maig 2019.
  
9. **Prof. Vladimir Guterman** (Southern Federal University), Rostov-on-Don, Rússia.  
*Pt-Containing Nanostructured Electrocatalysts for Low-Temperature Fuel Cells*  
21 Maig 2019.
  
10. **Prof. Francisco Zaera** (University of California), Riverside, EUA.  
*The Route to Better Catalysts: From Surface Science to Nanotechnology*  
24 Maig 2019.
  
11. **Prof. Diana Cheshmedzhieva** (University of Sofia), Sofia, Bulgària.  
*Application of theoretical computations in studying reaction mechanisms and reactivity of organic compounds*  
18 Juny 2019.
  
12. **Dr. Isaac Alcón** (Freie Universität Berlin), Berlin, Alemanya.  
*Quantum interference engineering of nanoporous graphene for carbon nanocircuitry*  
8 Octubre 2019.
  
13. **Dr. Sergi Vela** (EPFL), Lausanne, Suïssa i (Université Strasbourg) Strasbourg, França.  
*Modern Computational Tools to Investigate Spin Crossover and Azoheteroarene-based molecular switches*  
21 Octubre 2019.

14. **Prof. Notker Rösch** (Technische Universität München), Munic, Alemanya.

*Single Atom Catalysis – a Theoretician's Dream Scenario? Lessons from Working on C-C Coupling over Zeolite-supported Rh(I)*

6 Novembre 2019.

15. **Dr. Aleix Comas-Vives** (Universitat Autònoma de Barcelona), Bellaterra, Espanya.

*Ab Initio and Multiscale Modelling of CO<sub>2</sub> Conversion to Methanol and Syngas: Active Sites and Selectivity*

11 Desembre 2019.

### II.3 INVESTIGADORS CONVIDATS PER L'IQTCUB

Durant el 2019, l'IQTCUB ha acollit un total de vint-i-dos visites temporals d'investigadors externs.

1. **Prof. Hristiyan Aleksandrov** (investigador convidat).  
University of Sofia, Bulgària.  
Gener-febrer, juny-agost 2019.
2. **Prof. Iskra Koleva** (investigador convidat).  
University of Sofia, Bulgària.  
Gener-febrer, juny-juliol 2019.
3. **Dr. Annika Borg** (investigador convidat).  
Graz University of Technology, Àustria.  
Febrer 2019.
4. **Dr. David Gobrecht** (investigador HPC Europa).  
Katholieke Universiteit Leuven, Bèlgica.  
Febrer 2019.
5. **Dr. Juan Aragó** (investigador convidat).  
Institut de Ciència Molecular de la Universitat de València, Espanya.  
Març 2019.
6. **MSc. Laura Granda** (investigador HPC Europa).  
Leiden University, Països Baixos.  
Abril-juliol 2019.

7. **Dr. Ciro Achille** (investigador convidat).  
Universitat de Pàdova, Itàlia.  
Maig 2019.
  
8. **Prof. Anela Ivanova** (investigador convidat).  
University of Sofia, Bulgària.  
Maig 2019.
  
9. **Prof. Georgi Vayssilov** (investigador convidat).  
University of Sofia, Bulgària.  
Juny 2019.
  
10. **Prof. Rositca Nikolova** (investigador convidat).  
University of Sofia, Bulgària.  
Juny 2019.
  
11. **Dr. Miroslava Nedyalkova** (investigador convidat).  
University of Sofia, Bulgària.  
Juny-juliol 2019.
  
12. **Prof. Vasil Simeonov** (investigador convidat).  
University of Sofia, Bulgària.  
Juliol 2019.
  
13. **Dr. Rita Dias** (investigador convidat).  
NTNU, Noruega.  
Octubre 2019.  
Juliol 2019.
  
14. **Dr. Lorenzo Mino** (investigador convidat).  
Università degli Studi di Torino, Itàlia.  
Juliol-agost 2019.

15. **MSc. Cameron Beevers** (investigador HPC Europa).  
Cardiff University, Regne Unit.  
Setembre-novembre 2019.
  
16. **Antonio Pantoja** (investigador intercanvi).  
UNAM, Mèxic.  
Setembre 2019 – Febrer 2020.
  
17. **MSc. Hedda Oschinski** (investigador programa ERASMUS).  
Leibniz University, Alemanya.  
Setembre 2019 – març 2020.
  
18. **Dr. Enrico Bisquoli** (investigador convidat).  
Universitat de Pisa, Itàlia.  
Octubre-desembre 2019.
  
19. **Dr. Ludivine Levedel** (investigador convidat).  
Université de Poitiers, França.  
Novembre 2019.
  
20. **Prof. Maria Hrmova** (investigador convidat).  
University of Adelaide, Austràlia.  
Novembre 2019.
  
21. **Dr. Giovanni Di Liberto** (investigador HPC Europa).  
Università degli Studi di Milano-Bicocca, Itàlia.  
Novembre-desembre 2019.
  
22. **Dr. Massomeh Keyhanian** (investigador convidat).  
University of Mazandaran, Iran.  
Desembre 2019 – juliol 2020.

## III. ACTIVITAT CIENTÍFICA DELS MEMBRES DE L'IQTCUB

### III.1 RESULTATS MÉS RELLEVANTS

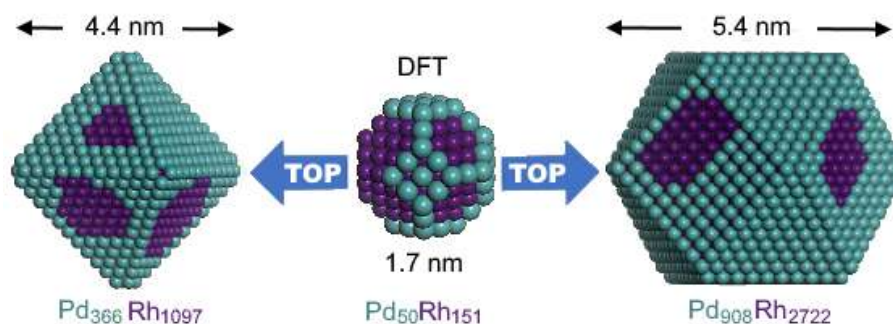
En aquesta secció es descriuen alguns dels resultats més rellevants obtinguts per cada línia de recerca de l'IQTCUB.

#### LÍNIA 1. ENERGIA NETA I SOSTENIBLE

**Using density functional calculations to elucidate atomic ordering of Pd-Rh nanoparticles at sizes relevant for catalytic applications.**

L. Vega, H. A. Aleksandrov, K. M. Neyman.

*Chinese J. Catal.*, 40 (2019) 1749.

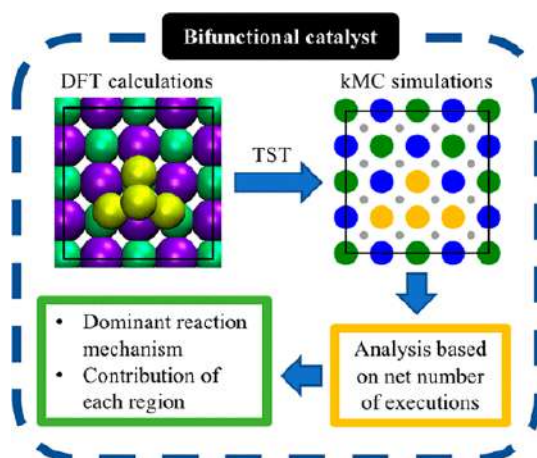


En el marc de teoria DFT s'identifica la composició superficial de partícules de Pd-Rh de milers d'àtoms i s'obre el camí per avaluar la segregació superficial a causa dels reactants adsorbts.

Aquest estudi quantifica efectes d'ordenació dels àtoms i segregació superficial en partícules de Pd-Rh amb composicions 1:3, 1:1 i 3:1 que contenen fins a 201 àtoms (ca. 1,7 nm), tot això emprant càlculs dins la teoria del funcional de la densitat (DFT) i la nostra nova Aproximació Topològica. Les dades obtingudes s'utilitzen per optimitzar energèticament de forma fiable les preferències en els patrons d'ordenació dels àtoms, inaccessibles pels càlculs DFT de partícules de Pd-Rh que contenen milers d'àtoms i que presenten mides superiors a 5 nm. Aquestes partícules de milers d'àtoms són les típicament emprades en catàlisi. En el estudi, també es descriuen com els efectes de segregació en la disposició superficial del catalitzador de Pd-Rh induïts pels adsorbats, poden ser avaluats d'una manera simple seguint el mateix marc metodològic de càlcul.

**Kinetic Monte Carlo simulations unveil synergic effects at work on bifunctional catalysts.**

H. Prats, S. Posada-Pérez, J. A. Rodríguez, R. Sayós, F. Illas.

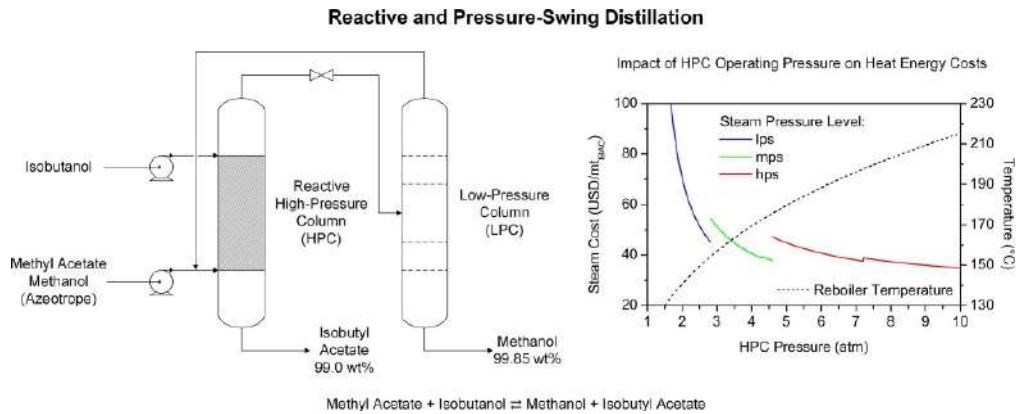
**ACS Catal.**, 9 (2019) 9117-9126.

La interacció entre les partícules metàl·liques i el suport d'un catalitzador heterogeni ha estat motiu d'un gran nombre d'estudis. Mentre que les interaccions fortes poden ocasionar la desactivació del catalitzador mitjançant un mecanisme ben conegut, en d'altres casos l'efecte pot ser beneficiós i produir un augment de l'activitat catalítica i/o de la selectivitat encara que la química darrera no està gens clara. En aquest estudi, mitjançant simulacions kinetic Monte Carlo descobrim l'origen de l'activitat del sistema Au/MoC en la reacció WGS. Les simulacions aporten una evidència forta d'un efecte cooperatiu entre les diferents regions del catalitzador: les regions netes del MoC són les responsables d'adsorbir i dissociar les molècules d'aigua, mentre que les zones properes als clúster d'or contribueixen a la formació de COOH.

**Pressure selection for non-reactive and reactive pressure-swing distillation.**

A. Risco, V. Plesu, J. A. Heydenreich, J. Bonet, A. E. Bonet-Ruiz, A. Calvet, P. Iancu, J. Llorens.

**Chem. Eng. Process – Process Intensification 135 (2019) 9.**



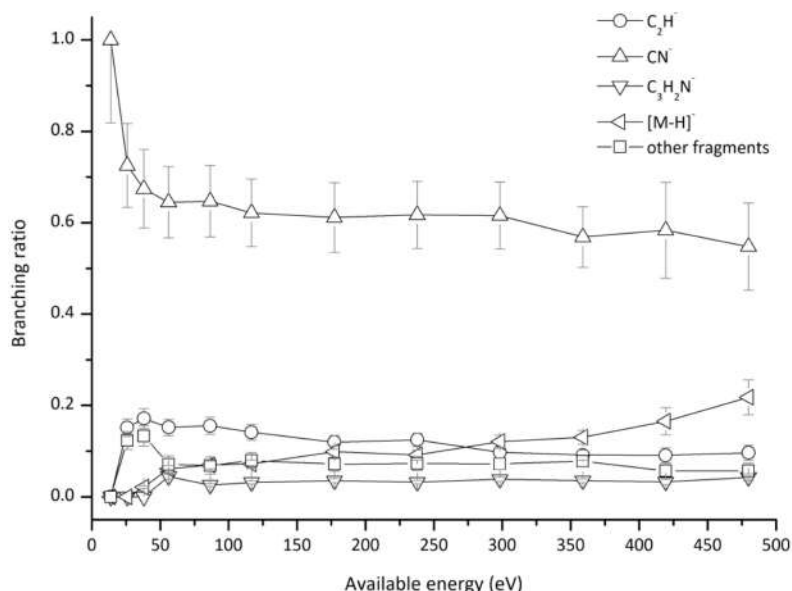
Estudi teòric de simulació que mostra que en el moment en que els serveis calents augmenten de qualitat, i.e. vapor a baixa, mitja o alta pressió, el seu cost augmenta en graó. Aquest fet cal tenir-lo en compte quan s'optimitza la pressió en un sistema de rectificació per canvi de pressió.



### Ion-pair formation in neutral potassium-neutral pyrimidine collisions: electron transfer experiments.

A. M. Mendes; B. Pamplona, S. Kumar; F. Ferreira da Silva, A. Aguilar, G. García, M. C. Bacchus\_Montabonel, P. Limao-Vieira.

*Front. Chem.*, 7 (2019) 157.



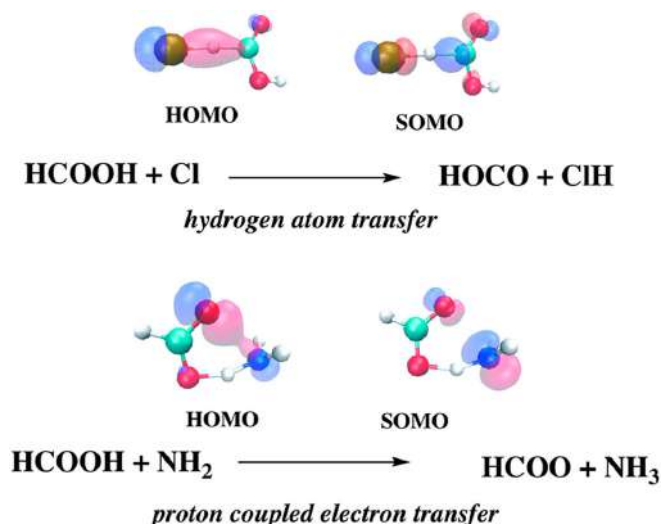
Abundàncies relatives (quantitat d'anió fragment / quantitat total d'anions) per als principals anions formats en funció de l'energia de col·lisió en el sistema centre de masses.

Estudi de la formació de parelles d'ions en col·lisions hipertèrmiques (30-800 eV) de potassi neutre i pirimidina neutra. Els ions negatius es formen per transferència electrònica des de l'àtom alcalí a la molècula mesurant-se les fragmentacions i abundàncies relatives per anàlisi de temps de vol. Els ions majoritaris s'assignen a CN<sup>-</sup> i C<sub>2</sub>H<sup>-</sup> i es discuteix el mecanisme de transferència electrònica. Els càlculs teòrics proporcionen una bona base per l'accessibilitat dels orbitals moleculars no ocupats en el procés de col·lisió. Més informació sobre la dinàmica de reacció s'obté mesurant l'espectre de pèrdua d'energia del catió K<sup>+</sup> lo qual permet discutir el rol dels estats accessibles. S'obté una afinitat electrònica vertical de  $(-5.69 \pm 0.20)$  eV assignable a l'estat  $\pi^*_3(b1)$  que du a la formació de CN<sup>-</sup>.

**The gas phase oxidation of HCOOH by Cl and NH<sub>2</sub> radicals. Proton coupled electron transfer versus hydrogen atom transfer.**

J. M. Anglada, R. Crehuet, A. Solé.

*Mol. Phys.*, 117 (2019) 1430.



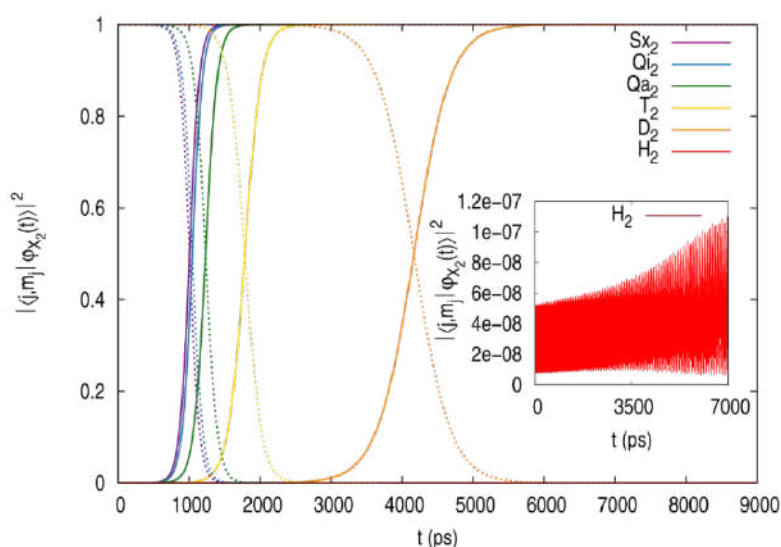
Exemples de mecanismes de reacció hat i pcet.

La reacció de l'àcid fòrmic (HCOOH) amb l'àtom de clor i el radical amidogen (NH<sub>2</sub>) s'ha investigat mitjançant mètodes teòrics d'alt nivell com BH & HLYP, MP2, QCISD i CCSD (T) amb les bases 6-311 + G (2df, 2p), aug-cc-pVTZ, aug-cc-pVQZ i extrapolació a CBS. S'ha considerat l'abstracció de l'àtom d'hidrogen àcid i de l'hidrogen del grup formil per part dels dos radicals i les diferents reaccions es duen a terme mitjançant mecanismes de transferència d'electrons (pcet) i transferència d'àtoms d'hidrogen (hat). La nostra constant de velocitat calculada a 298 K per a la reacció amb Cl és de  $1,14 \times 10^{-13} \text{ cm}^3 \text{ molècula}^{-1} \text{ s}^{-1}$ , en bon acord amb el valor experimental  $1,8 \pm 0,12 / 2,0 \times 10^{-13} \text{ cm}^3 \text{ molècula}^{-1} \text{ s}^{-1}$  i la reacció es desenvolupa exclusivament mitjançant l'abstracció de l'àtom d'hidrogen del grup formil, mitjançant el mecanisme hat, produint HOCO + ClH. La constant de velocitat calculada, a 298 K, per a la reacció amb NH<sub>2</sub> és d' $1,71 \times 10^{-15} \text{ cm}^3 \text{ molècula}^{-1} \text{ s}^{-1}$ , i la reacció passa per l'abstracció de l'àtom d'hidrogen àcid, mitjançant un mecanisme pcet, donant lloc a la formació de HCOO + NH<sub>3</sub>.

### Rotational energy relaxation quantum dynamics of a diatomic molecule in a superfluid helium nanodroplet and study of the hydrogen isotopes case.

M. Blancafort-Jorquera, A. Vila, M. González.

Phys. Chem. Chem. Phys., 21 (2019) 21007.



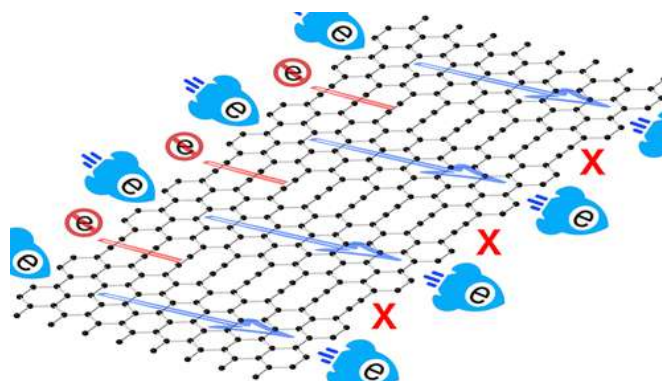
Poblacions dels estats rotacionals de les molècules ( $j=0, m_j=0$ ) (línies contínues) i ( $j=2, m_j=0$ ) (línies discontinúes), en funció del temps.

La relaxació d'energia rotacional (RER) d'una molècula  $X_2$  ( $j, m_j$ ) en una nanogota d'heli,  $^4\text{He}$ , superfluid [HeND;  $T=0.37$  K] es va estudiar mitjançant un mètode dinàmic quàntic híbrid proposat per nosaltres. Aquest és el primer estudi teòric sobre RER en HeNDs i aquí es van examinar diversos isòtops de  $\text{H}_2$ . L'estructura de la HeND no canvia durant la RER, que té lloc segons un mecanisme en cascada i amb conservació de  $m_j$ . El temps de vida d'un estat de rotació excitat ( $\approx 1.0$ - $7.6$  ns) augmenta quan  $B_e$  augmenta,  $j$  augmenta i  $N$  disminueix (per sobre de  $N = 100$  àtoms d'heli hi ha una petita influència de  $N$  en el temps de vida). L'anàlisi de la influència de l'acoblament entre els estats rotacionals  $j - j-2$  i la velocitat angular del  $X_2$  en el temps de vida va ser útil per interpretar els resultats. Esperem que el present estudi incentivi més estudis sobre RER en HeND, un fenomen bàsic, interessant i difícil d'estudiar sobre el qual encara coneixem molt poc.

**Grazynes: carbon-based two-dimensional composites with anisotropic properties.**

S. Kamalinahad, F. Viñes, P. Gamallo.

**J. Phys. Chem. C** 123 (2019) 27140.



Estructures de *grazynes* materials 2D on les propietats elèctriques i elàstiques depenen de la direcció.

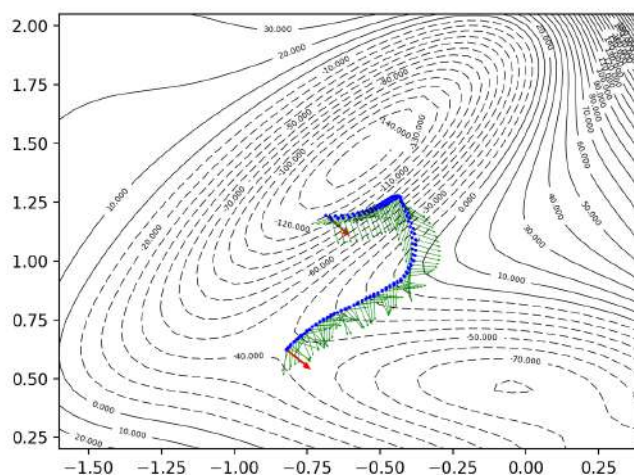
Presentem una nova família d'al·lòtrops de carboni 2D, basats en tires de grafè unides entre elles mitjançant connexions acetilèniques. La gran quantitat de connexions permetes fa inevitable un nom a la família: *grazynes*. Aquest estudi presenta les propietats energètiques, estructurals, elàstiques i electròniques del conjunt de *grazynes* més simples mitjançant càlculs DFT i suggerint possibles rutes sintètiques. Els resultants conclouen que aquests materials són estables, més rígids que el grafè en la direcció acetilènica, altament anisotròpic, i amb la presència de punts de Dirac a l'espai recíproc en la direcció de les tires de grafè. Així, els *grazynes* aporten direccionalitat en la conductivitat electrònica i resisteixen tant l'estirament com la compressió, tant important des del punt de vista de l'aplicabilitat en nanoelectrònica.

## LÍNIA 2. NANOMATERIALS I NANOELÈCTRONICA

**Interplay between the gentlest ascent dynamics method and conjugate directions to locate transition states.**

J. M. Bofill, J. Ribas-Ariño, R. Valero, G. Albareda, I. de P. R. Moreira, W. Quapp.

**J. Chem. Theory Comp.**, 15 (2019) 5426.



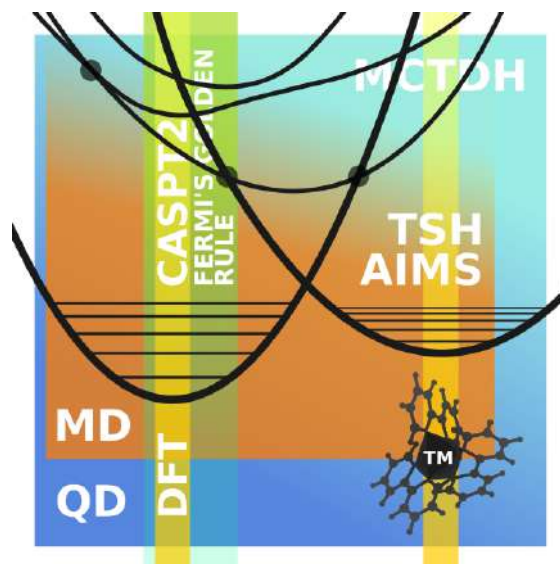
Comportament de la corba GAD-CD (blau) en una SEP. El conjunt de vectors (verd) demostra l'evolució dels vectors de control.

S'ha proposat un algoritme per localitzar estats de transició en una superfície d'energia potencial (SEP). Aquest algoritme està basat en el mètode conegut amb el nom de dinàmica d'ascens suau (GAD) on el gradient de la SEP es projecta en una direcció donada i la resta en un subespai ortogonal a aquesta. En el mètode que s'ha proposat, anomenat GAD amb direccions conjugades (GAD-CD), la projecció no solament s'aplica al gradient sinó també a la matriu Hessiana. La matriu Hessiana projectada és diagonal per blocs. La direcció es modifica d'acord amb el mètode GAD. Amb la finalitat d'assegurar estabilitat i evitar un cost computacional alt, s'utilitza la tècnica de la regió d'acceptació i la matriu Hessiana es modifica a cada iteració. Quan es compara aquest algoritme amb l'original GAD s'observa una eficiència molt més alta per sistemes químics de dimensió moderada. Aquest algoritme està basat en la teoria del control òptim.

**Deactivation of excited states in transition metal complexes: Insight from computational chemistry.**

C. Sousa, M. Alías, A. Domingo, C. de Graaf.

Chem. Eur. J. 25 (2019) 1152-1164.



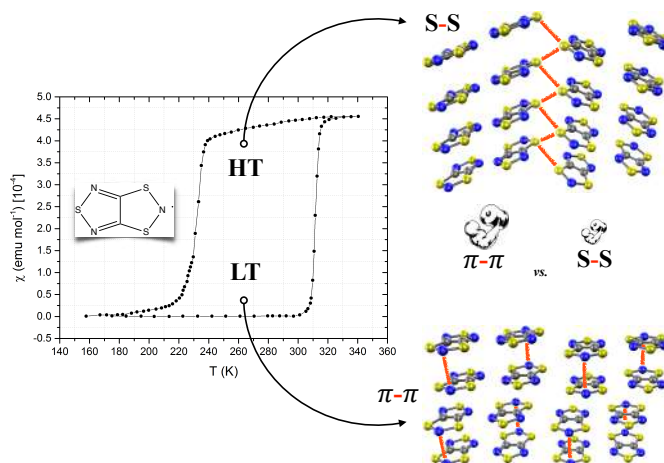
Mètodes computacionals disponibles per estudiar la dinàmica del procés de desactivació d'estats excitats en materials amb metalls de transició.

La investigació de la dinàmica del procés de desactivació dels estats excitats en sistemes amb metalls de transició constitueix un pas essencial pel desenvolupament de materials moleculars fotocommutables amb aplicacions en camps emergents com la conversió d'energia, emmagatzematge de dades o dispositius moleculars. En aquest treball es presenta una perspectiva general de les metodologies d'avantguarda disponibles per incloure els diversos aspectes necessaris per a la correcta descripció del decaïment dels estats excitats en complexos que contenen metalls de transició.

### Reorganization of intermolecular interactions in the polymorphic phase transition of a prototypical dithiazolyl-based bistable material.

T. Francese, F. Mota, M. Deumal, J. J. Novoa, R. W. A. Havenith, R. Broer, J. Ribas-Arino.

*Cryst. Growth Des.*, 19 (2019) 2329.

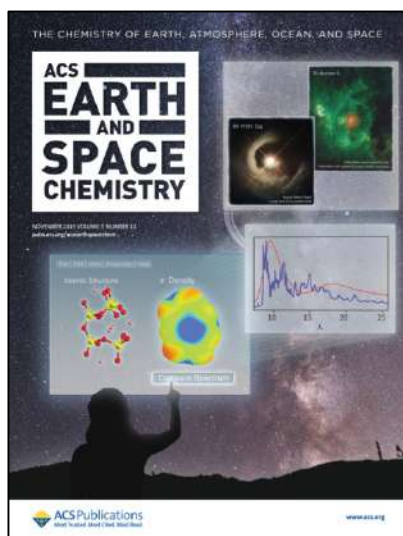


Les transicions de spin que presenten alguns cristalls molecular basats en radicals ditiazolil podrien ser usades en el desenvolupament de nous sensors i dispositius de memòria. En aquest article, s'ha dut a terme un estudi computacional sistemàtic de les interaccions intermoleculars presents en els dos polimorfs del cristall molecular del radical 1,3,5-tritia-2,4,6-triazapentalenil amb l'objectiu d'elucidar l'origen de la diferència d'energia entre els dos polimorfs involucrats en la seva transició de fase magnètica i entendre l'empaquetament cristal·lí d'aquest exemple notable de material biestable. Les interaccions  $\pi$ - $\pi$  entre radicals són les principals forces directrius de l'empaquetament cristal·lí dels dos polimorfs, que presenten apilaments tipus  $\pi$  de radicals. La diferència d'energia entre polimorfs prové d'un balanç entre les interaccions  $\pi$ - $\pi$  dels apilaments i les interaccions S...S entre radicals de diferents columnes. Els motius supramoleculars que s'han identificat com a importants en aquest treball són comuns en altres membres de la família de radicals ditiazolil commutables. Per tant, els resultats obtinguts són rellevants per a tota aquesta família de materials.

**Structure and properties of nanosilicates with olivine  $(\text{Mg}_2\text{SiO}_4)_N$  and pyroxene  $(\text{MgSiO}_3)_N$  compositions.**

A. Macia Escatllar, T. Lazaukas, S. M. Woodley, S. T. Bromley.

**ACS Earth Space Chem.**, 3 (2019) 2390-2403.



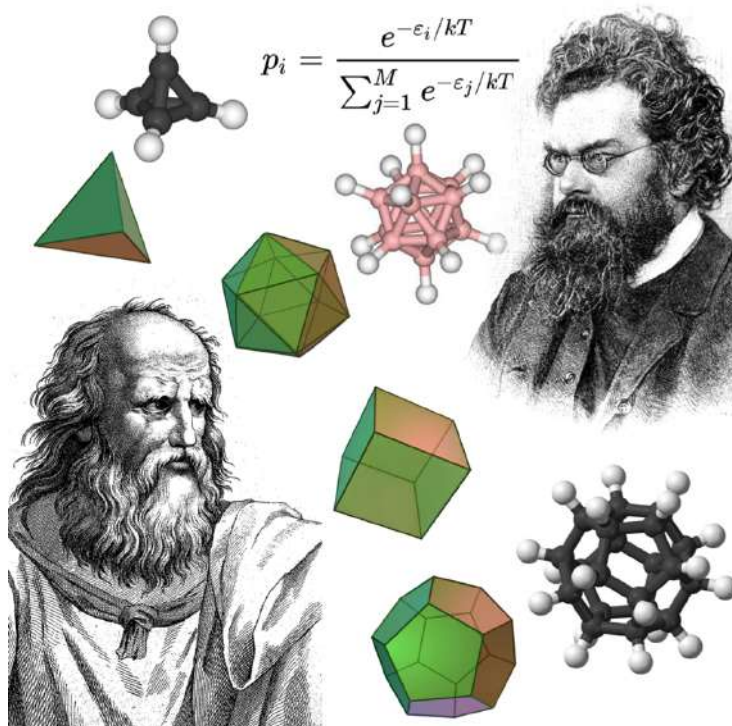
Els silicats rics en magnesi són omnipresents tant a nivell terrestre com astronòmic, on solen estar presents com a partícules petites. Les partícules de silicats riques en Mg de mida nanomètrica són probablement importants per comprendre la formació, el processament i les propietats dels grans de pols còsmics. En conjunt, el nostre treball ofereix una nova plataforma per a una comprensió precisa i detallada dels silicats a escala nanomètrica.



**Effects of temperature on the shape and symmetry of molecules and solids.**

A. Carreras, E. Bernuz, X. Marugan, M. Llunell, P. Alemany.

**Chem. Eur. J.** 25 (2019) 673-691.



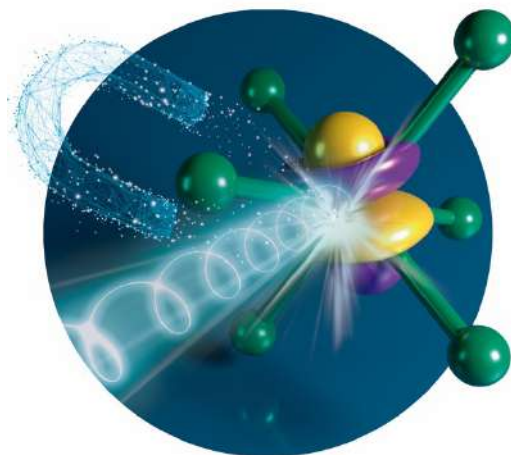
Com influeix la temperatura en la forma de les molècules? Bastint ponts entre Plató i Boltzmann usant les mesures contínues de forma.

El concepte d'estructura molecular, amb atributs com ara simetria i forma directament manlevats de la descripció dels objectes macroscòpics, és avui en dia de cabdal rellevància en química malgrat tots els problemes que pugui plantejar des d'un punt de vista filosòfic. Seguint aquesta tendència, és fàcil trobar descripcions com ara "l'àtom tetraèdric" a qualsevol publicació química, des dels llibres de text elementals fins a les publicacions científiques més actuals. La definició de la forma d'una molècula no és, però, de lluny tan simple com ens pot semblar a primera vista. Les molècules no es comporten com els objectes macroscòpics, bàsicament degut a l'incessant moviment de les seves partícules constituents, els nuclis i els electrons. Com afecta aquesta agitació tèrmica la forma i la simetria de les molècules? En aquest treball introduïm el llenguatge de les mesures contínues de forma i de simetria com una nova manera per tractar de donar resposta a aquest tipus de preguntes.

**[UF<sub>6</sub>]<sup>2-</sup>: A molecular hexafluorido actinide(IV) complex with compensating spin and orbital magnetic moments.**

K. S. Pedersen, K. R. Meihaus, A. Rogalev, F. Wilhelm, D. Aravena, M. Amoza, E. Ruiz, J. R. Long, J. Bendix, R. Clérac.

**Angew. Chem. Int. Ed.** 58 (2019) 15650.



Vinyeta que simbolitza la combinació d'estudis computacionals i experimentals d'un nou anió d'urani.

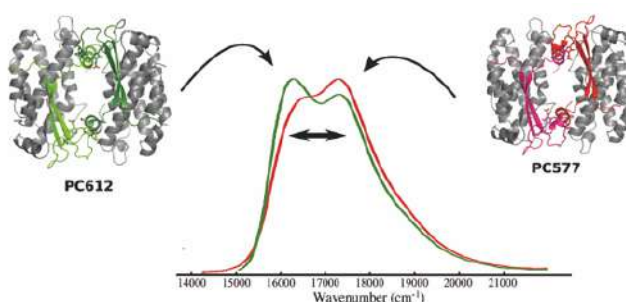
Síntesi, determinació estructural i estudis espectroscòpics i magnètics d'un nou anió d'urani, dut a terme per un equip internacional en el qual dos investigadors de l'IQTC han estat a càrrec dels càlculs multireferents CASSCF que permeten explicar la seva inesperadament petita magnetització trobada mitjançant mesures XMCD (dicroisme circular de raigs X) de sincrotró.

### LÍNIA 3. BIOMEDICINA I MATÈRIA TOVA

#### **Spectral variability in phycocyanin cryptophyte antenna complexes is controlled by changes in the $\alpha$ polypeptide chains.**

M. Corbella, L. Cupellini, F. Lipparini, G. D. Scholes, C. Curutchet.

**ChemPhotoChem**, 3 (2019) 945.



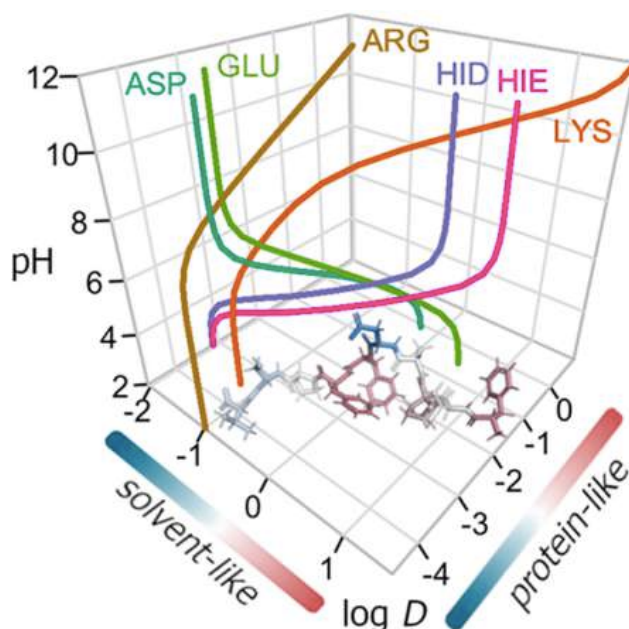
Simulacions multiescala indiquen que les diferències en les propietats de captura de llum dels complexos antena d'algues criptòfites PC577, PC612, PC630 i PC645 s'originen per canvis en les cadenes polipeptídiques  $\alpha$  en la seva estructura.

Els models quantitius de captura de llum en proteïnes fotosintètiques són molt sensibles a la determinació acurada de les energies relatives dels seus pigments. En aquest estudi es va analitzar la base d'aquestes propietats en quatre antenes d'algues criptòfites (PC577, PC612, PC630 i PC645), les quals han atret una gran atenció degut a la recent observació d'efectes de coherència en els seus mecanismes de captura de llum. Mitjançant càlculs multiescala de mecànica quàntica/molecular polaritzable (QM/MMPol), l'estudi demostra que aquestes proteïnes comparteixen un mateix ordenament energètic  $PCB82 < PCB158 < DBV51/61$  pels pigments localitzats a les cadenes  $\beta$ , molt conservades, mentre que les bilines a les cadenes  $\alpha$ , molt més divergents, causen les seves diferències espectrals. A més, presenta un sòlid Hamiltonià excitònic per aquestes proteïnes que obre el camí a anàlisis detallats de la base molecular dels efectes de coherència observats.

**Development of a structure-based pH-dependent lipophilicity scale of amino acids from continuum solvation calculations.**

W. J. Zamora, J. M. Campanera, F. J. Luque.

*J. Phys. Chem. Letters.*, 10 (2019) 883.



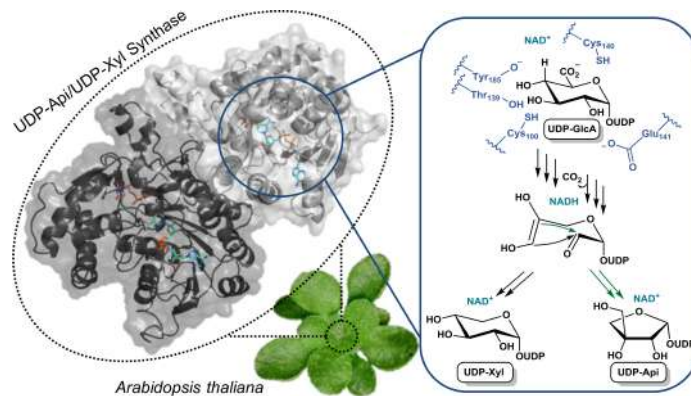
Representació del logD de determinats aminoàcids en dues escales d'hidrofobicitat.

Es descriu una estratègia flexible per derivar una escala depenent del pH basada en coeficients de distribució estimats a partir de les preferències conformacionals dels aminoàcids. Aquest procediment es basa en l'ús de la versió parametritzada del model de solvatació continu IEFPCM/MST, que proporciona una via efectiva per descriure la partició entre n-octanol i aigua, en combinació amb un formalisme que combina els coeficients de partició de espècies neutres i iòniques i el corresponent valor de pKa dels grups ionitzables. S'han definit dues escales anomenades tipus-solvent i tipus-proteïnes, que ha estat calibrades per comparació amb dades experimentals en diferents entorns químics i biològics i condicions de pH, emprant temps de retenció de pèptids i reconeixement de pèptids antigènics. Aquest mètode permet tanmateix la seva aplicació a residus no estàndard.

**Deciphering the enzymatic mechanism of sugar ring contraction in UDP-apiose biosynthesis.**

S. Savino, A. J. E. Borg, A. Dennig, M. Pfeiffer, F. de Giorgi, H. Weber, K. D. Dubey, C. Rovira, A. Mattevi, B. Nidetzky.

**Nat. Catal.**, 2 (2019) 1115.

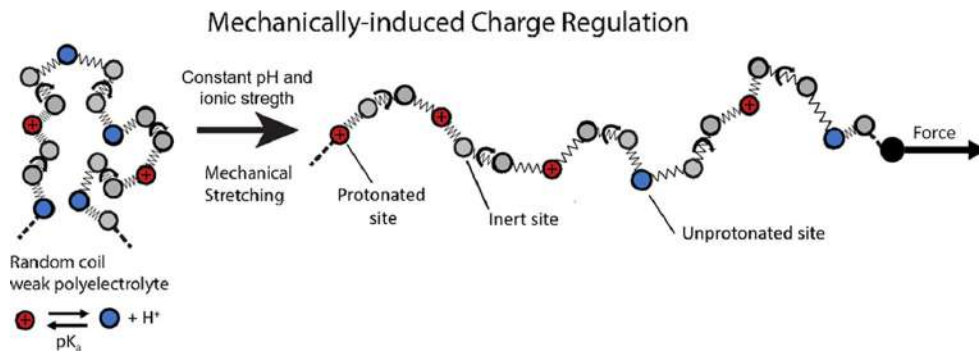


En situacions meteorològiques canviants, les plantes han de ser robustes i flexibles al mateix temps. Aquestes propietats estructurals estan ancorades a les parets cel·lulars, que es construeixen en gran part a partir de polímers i polisacàrids. Com a agents d'unió, els polisacàrids tenen la tasca important de connectar els polímers de cadena llarga i de construir una xarxa molecular de petites cadenes, anomenades fibrils, que contribueixen a la resistència a la tracció de la planta. Un dels blocs de sucre és l'apiosa monosacàrid de cadena ramificada. El mecanisme responsable de la producció d'apiosa a la natura era encara desconegut. Recentment s'ha descobert com l'apiosa es produïda per un únic enzim anomenat UAXS (UDP-apiosa / UDP-xilosa sintetasa) i tot el mecanisme d'aquest enzim ha estat descodificat mitjançant una col·laboració interdisciplinària. L'enzim UAXS catalitza selectivament quatre passos de reacció, donant lloc al canvi d'una molècula de sucre de sis anells (hexosa) a un sucre de cinc anells convertit estructuralment (pentosa). Amb la creació de nous compostos orgànics de carboni, l'enzim és l'encarregat de donar a les plantes les seves propietats de força.

**Effect of charge regulation and conformational equilibria in the stretching properties of weak polyelectrolytes.**

P. M. Blanco, S. Madurga, F. Mas, J. L. Garcés.

**Macromolecules** 52 (2019) 8017-8031.



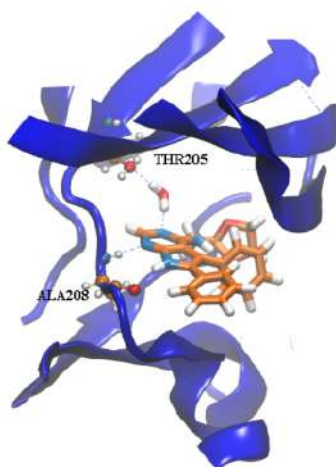
Esquema d'un model de polielectròlit feble sota la influència del pH, la força iònica i una força externa. Els monòmers es representen com a llocs units per enllaços harmònics flexibles.

Els polielectròlits febles poden modular la seva càrrega en resposta a pertorbacions externes, com ara canvis en el pH, força iònica ( $I$ ) o interaccions electrostàtiques amb altres espècies carregades, fenomen conegut com a regulació de càrrega (CR). D'altra banda, està ben establert que la CR està molt acoblada amb els graus de llibertat conformacionals. En aquest treball s'analitza la influència de la CR en les propietats d'estirament de polielectròlits febles i s'explora la possibilitat de CR induïda per estiraments mecànics. Amb aquest objectiu, fem ús d'un model mínim, que recull els aspectes fonamentals presents en l'estirament d'un polielectròlit lineal dèbil flexible: rotació d'angle intern, estirament d'enllaços, flexió d'enllaços i enllaç de protons. L'estirament mecànic s'estudia mitjançant la realització de simulacions Monte Carlo en el formalisme semi Grand Canònic a diferents condicions de pH i força iònica.

**Effect of set up protocols on the accuracy of alchemical free energy calculation over a set of ACK1 inhibitors.**

J. M. Granadino-Roldán, A. S. J. S. Mey, J. J. Pérez González, S. Bosisio, J. Rubio-Martinez, J. Michel.

**PLoS ONE** 14 (2019) e0213217.



Estructura després de 2 ns de MD que mostra la molècula d'aigua col·locada manualment a la butxaca que s'uneix a l'ATP.

El cribratge virtual hit-to-lead es basa freqüentment en una cascada de mètodes computacionals que comença amb càlculs ràpids aplicats a un gran nombre de compostos i acaba amb càlculs més cars restringits a un subconjunt de compostos que han passat filtres inicials. Aquest treball es centra en la creació de protocols per a la valoració de l'energia lliure alquímica (AFE) en el marc d'una cascada de Docking - MM / PBSA – AFE.



## III.2 LLISTA DE PUBLICACIONS

## ARTICLES PUBLICATS

1. *La<sub>1.5</sub>Sr<sub>0.5</sub>NiMn<sub>0.5</sub>Ru<sub>0.5</sub>O<sub>6</sub> double perovskite with enhanced ORR/OER bifunctional catalytic activity.*  
M. Retuerto, F. Calle-Vallejo, L. Pascual, G. Lumbeeck, M. Fernández-Díaz, M. Croft, J. Gopalakrishnan, M. A. Peña, J. Hadermann, M. Greenblatt, S. Rojas.  
**ACS Appl. Mater. Inter.** 11 (2019) 21454-21464.
2. *Molecular mechanisms of oxygen activation and hydrogen peroxide formation in lytic polysaccharide monooxygenases.*  
B. Wang, P. H. Walton, C. Rovira.  
**ACS Catal.** 9 (2019) 4958-4969.
3. *Adsorption preference determines segregation direction: a shortcut to more realistic surface models of alloy catalysts.*  
S. Liu, Z.-J. Zhao, C. Yang, S. Zha, K. M. Neyman, F. Studt, J. Gong.  
**ACS Catal.** 9 (2019) 5011-5018.
4. *Kinetic Monte Carlo simulations unveil synergic effects at work on bifunctional catalysts.*  
H. Prats, S. Posada-Pérez, J. A. Rodríguez, R. Sayós, F. Illas.  
**ACS Catal.** 9 (2019) 9117-9126.
5. *Outlining the scaling-based and scaling-free optimization of electrocatalysts.*  
N. Govindarajan, M. T. M. Koper, E. J. Meijer, F. Calle-Vallejo.  
**ACS Catal.** 9 (2019) 4218-4225.
6. *Dynamic and functional profiling of xylan-degrading enzymes in *Aspergillus secretomes* using activity-based probes.*  
S. Schröder, C. de Boer, Casper, N. McGregor, R. Rowland, O. Moroz, E. Blagova, J. Reijngoud, M. Arentshorst, D. Osborn, M. Morant, E. Abbate, M. Stringer, K. Krogh, L. Raich, C. Rovira, J.-G. Berrin, G. van Wezel, A. Ram, B. Florea, G. A. van der Marel, J. Codée, K. Wilson, L. Wu, G. J. Davies, H. S. Overkleeft.  
**ACS Cent. Sci.** 5 (2019) 1067-1078.
7. *What can infrared spectra tell us about the crystallinity of nanosized interstellar silicate dust grains?*  
L. Zamirri, A. Macia Escatllar, J. Marinoso Guiu, P. Ugliengo, S. T. Bromley.  
**ACS Earth Space Chem.** 3 (2019) 2323-2338.
8. *Structure and properties of nanosilicates with olivine (Mg<sub>2</sub>SiO<sub>4</sub>)<sub>N</sub> and pyroxene (MgSiO<sub>3</sub>)<sub>N</sub> compositions.*  
A. Macia Escatllar, T. Lazaukas, S. M. Woodley, S. T. Bromley.  
**ACS Earth Space Chem.** 3 (2019) 2390-2403.



9. *Oxidative cleavage of cellobiose by lytic polysaccharide monoxygenase (LPMO)-inspired copper complexes.*  
A. C. Neira, P. R. Martínez-Alanis, G. Aullón, M. Flores-Alamo, P. Zerón, A. Company, J. Chen, J. B. Kasper, W. R. Browne, E. Nordlander, I. Castillo.  
**ACS Omega** 4 (2019) 10729-10740.
10. *Subsurface carbon – a general feature of noble metals.*  
O. Piqué, I. Z. Koleva, F. Viñes, H. A. Aleksandrov, G. N. Vayssilov.  
**Angew. Chem. Int. Ed.** 58 (2019) 1744-1748.
11. *Enhanced electroreduction of carbon dioxide to methanol using zinc dendrites pulse-deposited on silver foam.*  
Q. H. Low, N. W. X. Loo, F. Calle-Vallejo, B. S. Yei.  
**Angew. Chem. Int. Ed.** 58 (2019) 2256-2260.
12. *The periodic table – a universal icon: its birth 150 years ago, and its popularization through literature, art and music.*  
S. Shaik, E. Cremades, S. Alvarez.  
**Angew. Chem. Int. Ed.** 58 (2019) 13194-13206.
13. *Electrochemically gated long distance charge transport in photosystem.*  
M. López-Martínez, M. López-Ortiz, M. E. Antinori, E. Wientjes, A. Nin-Hill, C. Rovira, R. Croce, I. Díez-Pérez, P. Gorostiza.  
**Angew. Chem. Int. Ed.** 58 (2019) 13280-13284.
14. *[UF6]<sup>2-</sup>: A molecular hexafluorido actinide(IV) complex with compensating spin and orbital magnetic moments.*  
K. S. Pedersen, K. R. Meihaus, A. Rogalev, F. Wilhelm, D. Aravena, M. Amozá, E. Ruiz, J. R. Long, J. Bendix, R. Clerac.  
**Angew. Chem. Int. Ed.** 58 (2019) 15650-15654.
15. *A proposal for evading the measurement uncertainty in classical and quantum computing: application to a resonant tunneling diode and a Mach-Zehnder interferometer.*  
D. Pandey, L. Bellentani, M. Villani, G. Albareda, P. Bordone, A. Bertoni, X. Oriols.  
**Appl. Sci.** 9 (2019) 2300-2320.
16. *Pharmacology and preclinical validation of a novel anticancer compound targeting PEPCCK-M.*  
M. Aragón, J. Moreno-Felici, S. Abás, S. Rodríguez-Arévalo, P. Hyrossová, A. Figueras, F. Viñals, B. Pérez, M. I. Loza, J. Brea, P. Latorre, J. A. Carrodegua, P. M. García-Rovés, C. Galdeano, T. Ginex, F. J. Luque, C. Escolano, J. C. Perales.  
**Biomed. Pharmacother.** 121 (2019) 109601.
17. *A photoswitchable GABA receptor channel blocker.*  
G. Maleeva, D. Wutz, K. Rustler, A. Nin-Hill, M. Alfonso-Prieto, E. Petukhova, A. Bautista-Barrufet, A. Gomila-Juaneda, P. Scholze, F. Peiretti, C. Rovira, B. König, P. Gorostiza, P. Bregestovski.  
**Br. J. Pharmacol.** 176 (2019) 2661-2677.

18. *Nickel-catalyzed aryl trifluoromethyl sulfides synthesis: a DFT study.*  
J. Jover.  
**Catal. Sci. Technol.** 9 (2019) 5962-5970.
19. *Synthesis, characterization, solution behavior and theoretical studies of Pd(II) allyl complexes with 2-phenyl-3H-indoles as ligands.*  
M. Tomé, A. Grabulosa, M. Rocamora, G. Aullón, T. Calvet, M. Font-Bardía, C. López.  
**Catalysts** 10 (2019) 811.
20. *Conformational effects of [Ni<sub>2</sub>(μ-SAr)<sub>2</sub>] cores on their electrocatalytic activity.*  
A. Mondragón-Díaz, E. Robles-Marín, B. A. Murueta-Cruz, J. C. Aquite, P. R. Martínez-Alanis, M. Flores-Alamo, G. Aullón, L. N. Benítez, I. Castillo.  
**Chem. Asian J.** 14 (2019) 3301-3312.
21. *Slow-spin relaxation of a low-spin S = 1/2 Fe<sup>III</sup> carborane complex.*  
A. B. Buades, V. S. Arderiu, L. Maxwell, M. Amoza, D. Choquesillo-Lazarte, N. Aliaga-Alcalde, C. Viñas, F. Teixidor, E. Ruiz.  
**Chem. Commun.** 55 (2019) 3825-3828.
22. *Open-shell jellium aromaticity in metal clusters.*  
J. Poater, M. Solà.  
**Chem. Commun.** 55 (2019) 5559-5562.
23. *Assessing the usefulness of transition metal carbides for hydrogenation reactions.*  
H. Prats, J. J. Piñero, F. Viñes, S. T. Bromley, R. Sayós, F. Illas.  
**Chem. Commun.** 55 (2019) 12797-12800.
24. *Pressure selection for non-reactive and reactive pressure-swing distillation.*  
A. Risco, V. Plesu, J. A. Heydenreich, J. Bonet, A. E. Bonet-Ruiz, A. Calvet, P. Iancu, J. Llorens.  
**Chem. Eng. Process. - Process Intensification** 135 (2019) 9-21.
25. *Castor oil biorefinery: conceptual process design, simulation and economic analysis.*  
A. C. Dimian, P. Iancu, V. Plesu, A. E. Bonet-Ruiz, J. Bonet-Ruiz.  
**Chem. Eng. Res. Des.** 141 (2019) 198-219.
26. *Hydration of cyclohexene to cyclohexanol in a hybrid reactive distillation with a side decantar.*  
I. Marchante, A. E. B. Ruiz, V. Plesu, J. Bonet-Ruiz, P. Iancu, J. Llorens.  
**Chem. Eng. Trans.** 76 (2019) 25-30.
27. *Integrated reaction-separation processes sequencing and screening at early stages of design.*  
K. Marin, J. Bonet-Ruiz, A. E. Bonet-Ruiz, V. Plesu, P. Iancu, J. Llorens.  
**Chem. Eng. Trans.** 76 (2019) 631-636.
28. *Deactivation of excited states in transition metal complexes: Insight from computational chemistry.*  
C. Sousa, M. Alías, A. Domingo, C. de Graaf.  
**Chem. Eur. J.** 25 (2019) 1152-1164.

29. *Effects of temperature on the shape and symmetry of molecules and solids.*  
A. Carreras, E. Bernuz, X. Marugan, M. Llunell, P. Alemany.  
**Chem. Eur. J.** 25 (2019) 673-691.
30. *Ammonia–borane derived BN fragments trapped on bi- and trimetallic titanium(III) systems.*  
E. del Horno, J. Jover, M. Mena, A. Pérez-Redondo, C. Yélamos.  
**Chem. Eur. J.** 25 (2019) 7096-7100.
31. *Magnetization slow dynamics in ferrocenium complexes.*  
M. Ding, A. K. Hickey, M. Pink, J. Telsler, D. L. Tierney, M. Amoza, M. Rouzieres, T. J. Ozumerzifon, W. A. Hoffert, M. P. Shores, E. Ruiz, R. Clerac, J. M. Smith.  
**Chem. Eur. J.** 25 (2019) 10625-10632.
32. *IUPAC in Brussels in 1921: a historical photo.*  
E. Homburg, D. Fauque, P. J. T. Morris, F. Calascibetta, S. Alvarez.  
**Chem. Int.** 41 (2019) 11-15.
33. *Computational exploration of NO single-site disproportionation on Fe-MOF-5.*  
J. Jover, C. K. Brozek, M. Dincă, N. López.  
**Chem. Mater.** 31 (2019) 8875-8885.
34. *Approaching multiplet splitting in X-ray photoelectron spectra by density functional theory methods: NO and O<sub>2</sub> molecules as examples.*  
C. Sousa, P. S. Bagus, F. Illas.  
**Chem. Phys. Lett.** 731 (2019) 136617.
35. *Carbon monoxide insertion at a heavy p-block element: unprecedented formation of a cationic bismuth carbamoyl.*  
J. Ramler, J. Poater, F. Hirsch, B. Ritschel, I. Fischer, F. M. Bickelhaupt, C. Lichtenberg.  
**Chem. Sci.** 10 (2019) 4169-4176.
36. *Revealing the nature of active sites in electrocatalysis.*  
B. Garlyyev, J. Fichtner, O. Piqué, O. Schneider, A. S. Bandarenka, F. Calle-Vallejo.  
**Chem. Sci.** 10 (2019) 8060-8075.
37.  *$\alpha$ D-Gal-cyclophellitol cyclosulfamidate is a Michaelis complex analog that stabilizes therapeutic lysosomal  $\alpha$ -galactosidase A in Fabry disease.*  
M. Artola, C. Hedberg, R. J. Rowland, L. Raich, K. Kytidou, L. Wu, A. Schaaf, M. J. Ferraz, G. A. van der Marel, J. D. C. Codée, C. Rovira, J. M. F. G. Aerts, G. J. Davies, H. S. Overkleeft.  
**Chem. Sci.** 10 (2019) 9233–9243.
38. *Spectral variability in phycocyanin cryptophyte antenna complexes is controlled by changes in the  $\alpha$ -polypeptide chains.*  
M. Corbella, L. Cupellini, F. Lipparini, G.D. Scholes, C. Curutchet.  
**ChemPhotoChem** 3 (2019) 945-956.

39. *Ligand binding rate constants in heme proteins using Markov state models and molecular dynamics simulations.*  
M. Bringas, L. E. Lombardi, F. J. Luque, D. Estrin, L. Capece.  
**ChemPhysChem** 20 (2019) 2451-2460.
40. *Influence of van der Waals interactions on the solvation energies of adsorbates at Pt-based Eelectrocatalysts.*  
L. P. Granda-Marulanda, S. Builes, M. T. M. Koper, F. Calle-Vallejo.  
**ChemPhysChem** 20 (2019) 2968-2972.
41. *Using density functional calculations to elucidate atomic ordering of Pd-Rh nanoparticles at sizes relevant for catalytic applications.*  
L. Vega, H. A. Aleksandrov, K. M. Neyman.  
**Chinese J. Catal.** 40 (2019) 1749-1757.
42. *Computational modeling of transition temperatures in spin-crossover systems.*  
J. Cirera, E. Ruiz.  
**Comment. Inorg. Chem.** 39 (2019) 216-241.
43. *Theoretical justification of stable ferromagnetism in ferroelectric BiFeO<sub>3</sub> by first-principles.*  
H. H'Mok, E. Martínez-Aguilar, J. Antúnez García, J. Ribas-Ariño, L. Mestres, P. Alemany, D. H. Galván, J. M. Siqueiros-Beltrones, O. Raymond Herrera.  
**Comput. Mater. Sci.** 164 (2019) 66-73.
44. *Marvellous molecular shapes.*  
S. Alvarez.  
**Compt. Rend. Chim.** 22 (2019) 437-444.
45. *Experimental and theoretical study of Pb···S and Pb···O sigma-hole interactions in the cristal structures of Pb(II) complexes.*  
J. D. Velásquez, G. Mahmoudi, E. Zangrando, A. V. Gurbanov, F. I. Zubkov, Y. Zorlu, A. Masoudiasl, J. Echeverría.  
**CrystEngComm.** 21 (2019) 6018-6025.
46. *Designing of antiferromagnetically coupled mono-, di- and tri-bridged copper(II) based catecholase models by varying "auxiliary part" of ligand and anionic co-ligand.*  
S. Dasgupta, P. Chakraborty, P. Kundu, H. Kara, G. Aullón, E. Zangrando, D. Das.  
**CrystEngComm.** 21 (2019) 7094-7107.
47. *Effect of the substituents on the nature and strength of lone pair-carbonyl interactions in acyl halides.*  
J. D. Velasquez, J. Echeverría, S. Alvarez.  
**Cryst. Growth Des.** 19 (2019) 6511-6518.
48. *Reorganization of intermolecular interactions in the polymorphic phase transition of a prototypical dithiazolyl-based bistable material.*  
T. Francese, F. Mota, M. Deumal, J. J. Novoa, R. W. A. Havenith, R. Broer, J. Ribas-Ariño.  
**Cryst. Growth Des.** 19 (2019) 2329-2339.

49. *Modeling catalytic reaction mechanisms in glycoside hydrolases.*  
J. Coines, L. Raich, C. Rovira.  
**Curr. Opin. Chem. Biol.** 53 (2019) 183-191.
50. *Single-ion magnetic anisotropy in a vacant octahedral Co(II) complex.*  
A. K. Mondal, J. Jover, E. Ruiz, S. Konar.  
**Dalton Trans.** 48 (2019) 25-29.
51. *Microwave assisted synthesis of heterometallic 3d–4f M<sub>4</sub>Ln complexes.*  
L. Rosado Piquer, S. Dey, L. Castilla-Amorós, S. J. Teat, J. Cirera, G. Rajaraman, E. C. Sañudo.  
**Dalton Trans.** 48 (2019) 12440-12450.
52. *Dinuclear Co<sup>II</sup>Y<sup>III</sup> vs. tetranuclear Co<sup>II</sup><sub>2</sub>Y<sup>III</sup><sub>2</sub> complexes: the effect of increasing molecular size on magnetic anisotropy and relaxation dynamics.*  
A. Masegosa, M. A. Palacios, E. Ruiz, S. Gómez-Coca, J. Krzystek, J. M. Moreno, E. Colacio.  
**Dalton Trans.** 48 (2019) 14873-14884.
53. *Computational assessment on the Tolman cone angles for P-ligands.*  
J. Jover, J. Cirera.  
**Dalton Trans.** 48 (2019) 15036-15048.
54. *Stochastic Schrödinger equations and conditional states: a general non-Markovian quantum electron transport simulator for THz electronics.*  
D. Pandey, E. Colomé, G. Albareda, X. Oriols.  
**Entropy** 21 (2019) 1148-1172.
55. *Trinuclear gold–carborane cluster as a host structure.*  
G. Aullón, A. Laguna, O. A. Filippov, J. M. Oliva-Enrich.  
**Eur. J. Inorg. Chem.** 1 (2019) 18-22.
56. *Electronic structure of the  $\alpha$ - (BEDT-TTF)<sub>2</sub>I<sub>3</sub> surface by photoelectron spectroscopy.*  
E. Tisserond, N. Nilforoushan, M. Caputo, P. Alemany, E. Canadell, L. Khalil, I. Vobornik, J. Fujii, P. Das Kumar, C. Mézière, P. Batail, J.-P. Pouget, C. Pasquier, M. Marsi, M. Monteverde.  
**Eur. Phys. J. B** 92 (2019) 70.
57. *A model for a driven Frenkel-Kontorova chain.*  
W. Quapp, J. M. Bofill.  
**Eur. Phys. J. B** 92 (2019) 95-109.
58. *Sliding paths for series of Frenkel-Kontorova models - a contribution to the concept of 1D-superlubricity.*  
W. Quapp, J. M. Bofill  
**Eur. Phys. J. B** 92 (2019) 193-213.

59. *Pt/CeO<sub>2</sub> and Pt/CeSnO<sub>x</sub> catalysts for low-temperature CO oxidation prepared by plasma-arc technique.*  
T. Y. Kardash, E. A. Derevyannikova, E. M. Slavinskaya, A. I. Stadnichenko, V. A. Maltsev, A. V. Zaikovskii, S. A. Novopashin, A. I. Boronin, K. M. Neyman.  
**Front. Chem.** 7 (2019) 1-17.
60. *Oxygen vacancies in oxide nanoclusters: when silica is more reducible than titania.*  
A. Cuko, S. T. Bromley, M. Calatayud.  
**Front. Chem.** 7 (2019) 37.
61. *Ion-pair formation in neutral potassium-neutral pyrimidine collisions: electron transfer experiments.*  
M. Mendes, B. Pamplona; S. Kumar, F. Ferreira da Silva, A. Aguilar; G. García; M-C Bacchus-Montabonel, P. Limao-Vieira.  
**Front. Chem.** 7 (2019) 157.
62. *Conformational itinerary of sucrose during hydrolysis by retaining amylosucrase.*  
S. Alonso-Gil, J. Coines, I. André, C. Rovira.  
**Front. Chem.** 7 (2019) 269.
63. *Toward understanding calmodulin plasticity by molecular dynamics.*  
E. Garrido, M. Jaumot, N. Agell, J. M. Granadino-Roldán, J. Rubio-Martinez.  
**Future Med. Chem.** 11 (2019) 975-991.
64. *Lipophilicity in drug design: an overview of lipophilicity descriptors in 3D-QSAR studies.*  
T. Ginex, J. Vazquez, E. Gibert, E. Herrero, F. J. Luque.  
**Future Med. Chem.** 11 (2019) 1177-1193.
65. *Charge delocalization, oxidation states and silver mobility in the mixed silver-copper oxide AgCuO<sub>2</sub>.*  
A. Carreras, S. Conejeros, A. Camón, A. García, N. Casañ-Pastor, P. Alemany, E. Canadell.  
**Inorg. Chem.** 58 (2019) 7026-7035.
66. *On the silicon-silicon bonds  $\sigma$ -coordinated to group 10 transition metals.*  
G. Aullón.  
**Inorg. Chim. Acta** 486 (2019) 449-457.
67. *Control over near-ballistic electron transport through formation of parallel pathways in a single-molecule wire.*  
A. C. Aragones, N. Darwish, S. Ciampi, L. Jiang, R. Roesch, E. Ruiz, C. A. Nijhuis, I. Diez-Perez.  
**J. Am. Chem. Soc.** 141 (2019) 240-250.
68. *Room temperature methane capture and activation by Ni clusters supported on TiC(001): effects of metal carbide interactions on the cleavage of the C-H bond.*  
H. Prats, R. A. Gutiérrez, J. J. Piñero, F. Viñes, S. T. Bromley, P. J. Ramírez, J. A. Rodríguez, F. Illas.  
**J. Am. Chem. Soc.** 141 (2019) 5303-5313.

69. *para-Selective C-H olefination of aniline derivatives via Pd/S,O-ligand catalysis.*  
K. Naksomboon, J. Poater, F. M. Bickelhaupt, M. A. Fernández-Ibáñez.  
**J. Am. Chem. Soc.** 141 (2019) 6719-6725.
70. *Fenton-derived OH radicals enable the MPnS enzyme to convert 2-hydroxyethylphosphonate to methylphosphonate: insights from ab initio QM/MM MD simulations.*  
B. Wang, Z. Cao, C. Rovira, J. Song, S. Shaik.  
**J. Am. Chem. Soc.** 141 (2019) 9284-9291.
71. *Calculating the partition coefficients of organic solvents in octanol/water and octanol/air.*  
M. Nedyalkova, S. Madurga, M. Tobiszewski, V. Simeonov.  
**J. Chem. Inf. Model.** 59 (2019) 2257-2263.
72. *Understanding the mechanism of direct activation of AMP-kinase: toward a fine allosteric tuning of the kinase activity.*  
E. Aledavood, G. Moraes, J. Lameira, A. Castro, F. J. Luque, C. Estarellas.  
**J. Chem. Inf. Model.** 59 (2019) 2859-2870.
73. *Efficient preparation of TiO<sub>2</sub> nanoparticles models using interatomic potentials.*  
A. Macià-Escatllar, Á. Morales-García, F. Illas, S. T. Bromley.  
**J. Chem. Phys.** 150 (2019) 214305.
74. *Electronic properties of realistic anatase TiO<sub>2</sub> nanoparticles from G<sub>0</sub>W<sub>0</sub> calculations on a gaussian and plane wave scheme.*  
Á. Morales-García, R. Valero, F. Illas.  
**J. Chem. Theory Comput.** 15 (2019) 5024-5030.
75. *Interplay between the gentlest ascent dynamics method and conjugate directions to locate transition states.*  
J. M. Bofill, J. Ribas-Ariño, R. Valero, G. Albareda, I. d. P. R. Moreira, W. Quapp.  
**J. Chem. Theory Comput.** 15 (2019) 5426-5439.
76. *PyFrag 2019 – Automating the exploration and analysis of reaction mechanisms.*  
X. Sun, T. M. Soini, J. Poater, T. A. Hamlin, F. M. Bickelhaupt.  
**J. Comput. Chem.** 40 (2019) 2227-2233.
77. *Prediction of the n-octanol/water partition coefficients in the SAMPL6 blind challenge from MST continuum solvation calculations.*  
W. J. Zamora, S. Pinheiro, K. German, C. Ràfols, C. Curutchet, F. J. Luque.  
**J. Comput. Aided Mol. Des.** 34 (2019) 443-451.
78. *Identification of dihydrofuro[3,4-d]pyrimidine derivatives as novel HIV-1 non-nucleoside reverse transcriptase inhibitors with promising antiviral activities and desirable physicochemical properties.*  
D. Kang, H. Zhang, Z. Wang, T. Zhao, T. Ginex, F. J. Luque, Y. Yang, G. Wu, D. Feng, F. Wei, J. Zhang, E. De Clercq, C. Pannecouque, C. H. Chen, K.-H. Lee, N. A. Murugan, T. A. Steitz, P. Zhan, X. Liu.  
**J. Med. Chem.** 62 (2019) 1484-1501.

79. *Exploiting the tolerant region I of the non-nucleoside reverse transcriptase inhibitor (NNRTI) binding pocket: discovery of potent diarylpyrimidine-typed HIV-1 NNRTIs against wild-type and E138K mutant virus with significantly improved water solubility and favorable safety profiles.*  
 B. Huang, W. Chen, T. Zhao, L. Tong, J. Zhenyu, X. Jiang, T. Ginex, D. Vilchez, F. J. Luque, D. Kang, P. Gao, J. Zhang, Y. Tian, D. Daelemans, E. De Clercq, C. Pannecouque, P. Zhan, X. L. Xinyong.  
**J. Med. Chem.** 62 (2019) 2083-2098.
80. *Probing through-space polar- $\pi$  interactions in 2,6-diarylphenols.*  
 V. Bosmans, J. Poater, R. Hammink, P. Tinnemans, F. M. Bickelhaupt, J. Mecinovic.  
**J. Org. Chem.** 84 (2019) 3632-3637.
81. *"Aggregation-induced emission" of transition metal compounds: design, mechanistic insights, and applications.*  
 P. Alam, C. Climent, P. Alemany, I. R. Laskar.  
**J. Photochem. Photobiol. C: Photochem. Rev.** 41 (2019) 100317.
82. *Understanding H<sub>2</sub> formation on hydroxylated pyroxene nanoclusters: ab initio study of the reaction energetics and kinetics.*  
 B. Kerkeni, M-C. Bacchus-Montabonel, X. Shan, S. T. Bromley.  
**J. Phys. Chem. A** 123 (2019) 9282-9291.
83. *Understanding competition of polyalcohol dehydration reactions in hot water.*  
 Y-L. Chang, T. Sasaki, J. Ribas-Ariño, M. Machida, M. Shiga.  
**J. Phys. Chem. B** 123 (2019) 1662-1671.
84. *Surface activity of early transition metal oxycarbides: CO<sub>2</sub> adsorption case study.*  
 C. Kunkel, F. Viñes, F. Illas.  
**J. Phys. Chem. C** 123 (2019) 3664-3671.
85. *Affordable estimation of solvation contributions to the adsorption energies of oxygenates on metal nanoparticles.*  
 F. Calle-Vallejo, R. de Morais, F. Illas, D. Loffreda, P. Sautet.  
**J. Phys. Chem. C** 123 (2019) 5578-5582.
86. *Combining theory and experiment for a multitechnique characterization of activated CO<sub>2</sub> on transition metal carbide (001) surfaces.*  
 C. Kunkel, F. Viñes, P. J. Ramírez, J. A. Rodríguez, F. Illas.  
**J. Phys. Chem. C** 123 (2019) 7567-7576.
87. *Pd segregation on the surface of bimetallic PdAu nanoparticles induced by low coverage of adsorbed CO.*  
 M. Mamatkulov, I. V. Yudanov, A. V. Bukhtiyarov, I. P. Prosvirin, V. I. Bukhtiyarov, K. M. Neyman.  
**J. Phys. Chem. C** 123 (2019) 8037-8046.



88. *Correcting flaws in the assignment of nitrogen chemical environments in n-doped graphene.*  
M. Figueras, I. Villar-Garcia, F. Viñes, C. Sousa, V. de la Peña O'Shea, F. Illas.  
**J. Phys. Chem. C** 123 (2019) 11319-11327.
89. *Approaching the quantitative description of enantioselective adsorption by the density functional means.*  
F. Viñes, O. Lamiel-García.  
**J. Phys. Chem. C** 123 (2019) 11714-11722.
90. *Optical properties and chemical ordering of Ag-Pt nanoalloys: a computational study.*  
S. Olobardi, L. Vega, A. Fortunelli, M. Stener, F. Viñes, K. M. Neyman.  
**J. Phys. Chem. C** 123 (2019) 25482-25491.
91. *Grazynes: carbon-based two-dimensional composites with anisotropic properties.*  
S. Kamalinahad, F. Viñes, P. Gamallo.  
**J. Phys. Chem. C** 123 (2019) 27140-27149.
92. *Development of a structure-based pH-dependent lipophilicity scale of amino acids from continuum solvation calculations.*  
W. J. Zamora, J. M. Campanera, F. J. Luque.  
**J. Phys. Chem. Lett.** 10 (2019) 883-889.
93. *Modulating ligand dissociation through methyl isomerism in accessory sites: binding of retinol to cellular carriers.*  
C. Estarellas, S. Scaffidi, G. Saladino, F. Spyrakis, L. Franzoni, C. Galdeano, A. Bidon-Chanal, F. L. Gervasio, F. J. Luque.  
**J. Phys. Chem. Lett.** 10 (2019) 7333-7339.
94. *Effect of charge regulation and conformational equilibria in the stretching properties of weak polyelectrolytes.*  
P. M. Blanco, S. Madurga, F. Mas, J. L. Garcés.  
**Macromolecules** 52 (2019) 8017-8031.
95. *The role of vibrational anharmonicity in the computational study of thermal spin crossover.*  
J. Wu, C. Sousa, C. de Graaf.  
**Magnetochemistry** 5 (2019) 49.
96. *Newton trajectories for the tilted Frenkel-Kontorova model.*  
W. Quapp, J. M. Bofill.  
**Mol. Phys.** 117 (2019) 1541-1558.
97. *The gas phase oxidation of HCOOH by Cl and NH<sub>2</sub> radicals. Proton coupled electron transfer versus hydrogen atom transfer.*  
J. M. Anglada, R. Crehuet, A. Solé.  
**Mol. Phys.** 117 (2019) 1430-1441.

98. *Understanding the interplay between size, morphology and energy gap in photoactive TiO<sub>2</sub> nanoparticles.*  
A. Morales-Garcia, A. Macia Escatllar, F. Illas, S. T. Bromley.  
**Nanoscale** 11 (2019) 9032-9041.
99. *Fast identification of optimal pure platinum nanoparticle shapes and sizes for efficient oxygen electroreduction.*  
M. Rück, A. Bandarenka, F. Calle-Vallejo, A. Gagliardi.  
**Nanoscale Adv.** 1 (2019) 2901-2909.
100. *Structural principles to steer the selectivity of the electrocatalytic reduction of aliphatic ketones on platinum.*  
C. J. Bondue, F. Calle-Vallejo, M. C. Figueiredo, M. T. M. Koper.  
**Nat. Catal.** 2 (2019) 243-250.
101. *Deciphering the enzymatic mechanism of sugar ring contraction in UDP-apiose biosynthesis.*  
S. Savino, A. J. E. Borg, A. Dennig, M. Pfeiffer, F. de Giorgi, H. Weber, K. D. Dubey, C. Rovira, A. Mattevi, B. Nidetzky.  
**Nat. Catal.** 2 (2019) 1115-1123.
102. *Discovery of processive catalysis by an exo-hydrolase with a pocket-shaped active site.*  
V. A. Streltsov, S. Luang, A. Peisley, J. N. Varghese, J. R. Ketudat Cairns, S. Fort, M. Hijnen, I. Tvaroška, A. Ardá, J. Jiménez-Barbero, M. Alfonso-Prieto, C. Rovira, F. Mendoza, L. Tiessler-Sala, J.-E. Sánchez-Aparicio, J. Rodríguez-Guerra, J. M. Lluch, J.-D. Maréchal, L. Masgrau, M. Hrmova.  
**Nat. Commun.** 10 (2019) 2222.
103. *Na-doped ruthenium perovskite electrocatalysts with improved oxygen evolution activity and durability in acidic media.*  
M. Retuerto, L. Pascual, F. Calle-Vallejo, P. Ferrer, D. Gianolio, A. G. Pereira, Á. García, J. Torrero, M. T. Fernández-Díaz, P. Bencok, M. A. Peña, J. L. G. Fierro, S. Rojas.  
**Nat. Commun.** 10 (2019) 2041.
104. *Advances and challenges in understanding the electrocatalytic conversion of carbon dioxide to fuels.*  
Y. Y. Birdja, E. Pérez-Gallent, M. C. Figueiredo, A. J. Göttle, F. Calle-Vallejo, M. T. M. Koper.  
**Nat. Energy** 4 (2019) 732-745.
105. *Mapping of the working route of phosphatase activity of copper based models with special emphasis on the role of oxo-anions by combined experimental and theoretical studies.*  
S. Dasgupta, G. Aullón, E. Zangrando, D. Das.  
**New J. Chem.** 43 (2019) 2501-2512.

106. *Supramolecular tripodal Au(I) assemblies in water. Interactions with pyrene fluorescent probe.*  
A. Pinto, G. Hernández, R. Gavara, E. Aguiló, A. J. Moro, G. Aullón, M. Malfois, J. C. Lima, L. Rodríguez.  
**New J. Chem.** 43 (2019) 8279-8289.
107. *Applying discriminant and cluster analyses to separate allergenic from non-allergenic proteins.*  
L. Naneva, M. Nedyalkova, S. Madurga, F. Mas, V. Simeonov.  
**Open Chem.** 17 (2019) 401-407.
108. *Direct and asymmetric nickel(II)-catalyzed construction of carbon-carbon bonds from N-acyl thiazinanethiones.*  
S. C. D. Kennington, A. J. Taylor, P. Romea, F. Urpí, G. Aullón, M. Font-Bardia, L. Ferré, J. Rodrialvarez.  
**Org. Lett.** 21 (2019) 305-309.
109. *Role of charge regulation and fluctuations in the conformational and mechanical properties of weak flexible polyelectrolyte.*  
P. M. Blanco, S. Madurga, C. Nambuena, F. Mas, J. L. Garcés.  
**Polymers** 11 (2019) 1962.
110. *Glucose transport via the pseudomonads porin OprB. Implications for the design of trojan-horse antinfectives.*  
J. Coines, S. Acosta-Gutierrez, I. Bodrenko, C. Rovira, M. Ceccarelli.  
**Phys. Chem. Chem. Phys.** 21 (2019) 8557-8463.
111. *Effect of electron correlation in the decomposition of core level binding energy shifts into initial and final state contributions.*  
M. Figueras, C. Sousa, F. Illas.  
**Phys. Chem. Chem. Phys.** 21 (2019) 9399-9406.
112. *Understanding the differences between iron and palladium in cross-coupling.*  
X. Sun, M. V. J. Rocha, T. A. Hamlin, J. Poater, F. M. Bickelhaupt.  
**Phys. Chem. Chem. Phys.** 21 (2019) 9651-9664.
113. *Double-well potential energy in the interaction between h-BN and Ni(111).*  
J. Ontaneda, F. Viñes, F. Illas, R. Grau-Crespo.  
**Phys. Chem. Chem. Phys.** 21 (2019) 10888-10894.
114. *Conformational analysis of enantiomerization coupled to internal rotation in triptycyl-n-helicenes.*  
A. Carreras, L. Fuligni, P. Alemany, M. Llunell, J. M. Bofill, W. Quapp.  
**Phys. Chem. Chem. Phys.** 21 (2019) 11395-11404.
115. *Revising the common understanding of metamagnetism in the molecule-based bisdithiazolyl BDTMe compound.*  
C. Climent, S. Vela, J. Jornet-Somoza, M. Deumal.  
**Phys. Chem. Chem. Phys.** 21 (2019) 12184-12191.

116. CeO<sub>2</sub>(111) electronic reducibility tuned by ultra-small supported bimetallic Pt-Cu clusters. L. O. Paz-Borbón, F. Buendía, I. L. Garzón, A. Posada Amarillas, F. Illas.  
**Phys. Chem. Chem. Phys.** 21 (2019) 15286-15296.
117. *Implicit solvent effect in the determination of Bronsted-Evans-Polanyi relationships for heterogeneously catalyzed reactions.*  
J. R. B. Gomes, F. Viñes, F. Illas, J. Fajín.  
**Phys. Chem. Chem. Phys.** 21 (2019) 17687-17695.
118. *Rotational energy relaxation quantum dynamics of a diatomic molecule in a superfluid helium nanodroplet and study of the hydrogen isotopes case.*  
M. Blancafort-Jorquera, A. Vilà, M. González.  
**Phys. Chem. Chem. Phys.** 21 (2019) 21007.
119. *Electronic and symmetry engineering of an organic charge-transfer salt with metallic conductivity.*  
Y. Kiyota, I.-R. Jeon, O. Jeannin, M. Beau, T. Kawamoto, P. Alemany, E. Canadell, T. Mori, M. Fourmigué.  
**Phys. Chem. Chem. Phys.** 21 (2019) 22639-22646.
120. *Thickness biased capture of CO<sub>2</sub> on carbide MXenes.*  
Á. Morales-García, M. Mayans-Llorach, F. Viñes, F. Illas.  
**Phys. Chem. Chem. Phys.** 21 (2019) 23136-23142.
121. *Quantum-classical approach to the reaction dynamics in a superfluid helium nanodroplet. The Ne<sub>2</sub> dimer and Ne-Ne adduct formation reaction Ne + Ne-doped nanodroplet.*  
M. Blancafort-Jorquera, A. Vilà, M. González.  
**Phys. Chem. Chem. Phys.** 21 (2019) 24218.
122. *Electron self-organization in NbSe<sub>3</sub> revealed by polarization-dependent nano-ARPES.*  
M. A. Valbuena, P. Chudzinski, S. Pons, S. Conejeros, P. Alemany, E. Canadell, H. Berger, E. Frantzeskakis, J. Avila, M. C. Asensio, T. Giamarchi, M. Grioni.  
**Phys. Rev. B** 99 (2019) 75118.
123. *Fermi surface properties of the bifunctional organic metal κ-(BETS)<sub>2</sub>Mn[N(CN)<sub>2</sub>]<sub>3</sub> near the metal-insulator transition.*  
V. N. Zverev, W. Biberacher, S. Oberbauer, I. Sheikin, P. Alemany, E. Canadell, M. V. Kartsovnik.  
**Phys. Rev. B** 99 (2019) 125136.
124. *Selective nanomechanics of aromatic versus aliphatic thiolates on gold surfaces.*  
M. E. Zoloff-Michoff, J. Ribas-Ariño, D. Marx.  
**Phys. Rev. Lett.** 122 (2019) 086801.
125. *Nonadiabatic quantum dynamics without potential energy surfaces.*  
G. Albareda, A. Kelly, A. Rubio.  
**Phys. Rev. Mater.** 3 (2019) 023803-023809.

126. *Effect of set up protocols on the accuracy of alchemical free energy calculation over a set of ACK1 inhibitors.*  
 J. M. Granadino-Roldán, A. S. J. S. Mey, J. J. Pérez González, S. Bosisio, J. Rubio-Martinez, J. Michel.  
**PLoS ONE** 14 (2019) e0213217.
127. *Interaction of human hemoglobin and semi-hemoglobins with the Staphylococcus aureus hemophore IsdB: a kinetic and mechanistic insight.*  
 E. Gianquinto, I. Moscetti, O. De Bei, B. Campanini, M. Marchetti, F. J. Luque, S. Cannistraro, L. Ronda, A. R. Bizzarri, F. Spyraakis, S. Bettati.  
**Sci. Rep.** 9 (2019) 18629.
128. *Silver atom, trimer and tetramer species supported on a ceria nanoparticle: a density functional study.*  
 V. A. Nasluzov, E. A. Ivanova-Shor, A. M. Shor, K. M. Neyman.  
**Surf. Sci.** 681 (2019) 38-46.
129. *Study of active surface centers of Pt/CeO<sub>2</sub> catalysts prepared using radio-frequency plasma sputtering technique.*  
 A. I. Stadnichenko, V. V. Muravev, S. V. Koscheev, V. I. Zaikovskii, H. A. Aleksandrov, K. M. Neyman, A. I. Boronin.  
**Surf. Sci.** 679 (2019) 273-283.
130. *Differential many-body effects for initial and core-ion states: impact on XPS spectra.*  
 P. S. Bagus, C. Sousa, F. Illas.  
**Theor. Chem. Acc.** 138 (2019) 61.
131. *Electronic energy transfer in biomacromolecules.*  
 L. Cupellini, M. Corbella, B. Mennucci, C. Curutchet.  
**WIREs Comput. Mol. Sci.** 9 (2019) e1392.

## CAPÍTOLS DE LLIBRES I PROCEEDINGS

---

1. *150 Anys de Taules Periòdiques a la UB.*  
editat per S. Alvarez i C. Mans (Edicions UB, Barcelona) 2019.
2. *100 Curiositats sobre la Taula Periòdica i els elements químics.*  
S. Alvarez, autor de diversos capítols.  
coeditat per S. Alvarez (Ed. Cossetània, Valls) 2019. ISBN: 978-84-9034-844-4.
3. *How to design models for ceria nanoparticles: challenges and strategies for describing nanostructured reducible oxides.*  
A. Bruix, K.M. Neyman.  
**Computational Modelling of Nanoparticles**, vol. 12, p. 55-99 (sèrie: Frontiers of Nanoscience) editat per S. T. Bromley i S. M. Woodley (Elsevier, Oxford) 2019.
4. *Fractal Dimension (FD).*  
P. M. Blanco, S. Madurga, A. Isvoran, L. Pitulice, F. Mas.  
**New Frontiers in Nanochemistry. Concepts, Theories, and Trends**, vol. 1, cap. 16, p. 171-186 (sèrie: Structural Nanochemistry) editat per M. V. Putz (Apple Academic Press, EUA) 2019.
5. *Fractal Kinetics (FK).*  
F. Mas, L. Pitulice, S. Madurga, J. L. Garcés, E. Vilaseca, A. Isvoran.  
**New Frontiers in Nanochemistry. Concepts, Theories, and Trends**, vol. 1, cap. 17, p. 187-199 (sèrie: Structural Nanochemistry) editat per M. V. Putz (Apple Academic Press, EUA) 2019.
6. *Macromolecular Crowding (MC).*  
A. Isvoran, L. Pitulice, E. Vilaseca, I. Pastor, S. Madurga, F. Mas.  
**New Frontiers in Nanochemistry. Concepts, Theories, and Trends**, vol. 3, cap. 20, p. 307-317 (sèrie: Sustainable Nanochemistry) editat per M. V. Putz (Apple Academic Press, EUA) 2019.
7. *Simulation paths of anticancer drugs on a graphene oxide surface.*  
M. Nedyalkova, J. Romanova, J. Stoycheva, S. Madurga.  
**Graphene Functionalization Strategies. From Synthesis to Applications**, p. 215-228 editat per A. Khan, M. Jawaid, B. Neppolian i A. Asiri (Ed. Springer, Singapore) 2019.

### III.3 ALTRES ACTIVITATS

#### TESIS DOCTORALS 2019

---

1. *Toward refined theoretical models for the description of lipophilicity in biomolecules.*  
**William J. Zamora**  
Programa de doctorat: Biotecnologia.  
Facultat de Farmàcia i Ciències de l'Alimentació, Universitat de Barcelona.  
Supervisor/s: F. J. Luque, J. M. Campanera.  
Febrer 2019
2. *Rationalization of the mechanism of bistability in dithiazolyl-based molecular magnets.*  
**Tommaso Francese**  
Programa de doctorat: Química Teòrica i Modelització Computacional.  
Facultat de Química, Universitat de Barcelona.  
Supervisor/s: J. J. Novoa Vide, Ria Broer.  
Març 2019.
3. *Monte Carlo based methods applied to heterogeneous catalysis and gas separation.*  
**Héctor Prats García**  
Programa de doctorat: Química Teòrica i Modelització Computacional.  
Facultat de Química, Universitat de Barcelona.  
Supervisor/s: Ramón Sayós, Francesc Illas.  
Març 2019.
4. *Desarrollos metodológicos en la exploración de la especie bioactiva en fármacos: Búsqueda de agentes antimaláricos.*  
**Antonio Viayna Gaza**  
Programa de doctorat: Biotecnologia.  
Facultat de Farmàcia i Ciències de l'Alimentació, Universitat de Barcelona.  
Supervisor/s: F. J. Luque.  
Juny 2019.
5. *On the usage of lipophilic descriptors for molecular similarity evaluation.*  
**Javier Vázquez Lozano**  
Programa de doctorat: Biotecnologia.  
Facultat de Farmàcia i Ciències de l'Alimentació, Universitat de Barcelona.  
Supervisor/s: F. J. Luque, Enric Herrero.  
Setembre 2019.

6. *Models and computational methods applied to industrial gas separation processes and enhanced oil recovery.*  
**Gerard Alonso Benito**  
Programa de doctorat: Química Teòrica i Modelització Computacional.  
Facultat de Química, Universitat de Barcelona.  
Supervisor/s: Ramón Sayós, Pablo Gamallo.  
Novembre 2019.
  
7. *Anisotropía en imanes unimoleculares y qubits con complejos metálicos con espín  $S = 1/2$ .*  
**Martín Amoza Dávila**  
Programa de doctorat: Molecular Inorganic Chemistry.  
Facultat de Química, Universitat de Barcelona.  
Supervisor/s: E. Ruiz.  
Novembre 2019.
  
8. *Theoretical reaction and relaxation dynamics in superfluid helium nanodroplets.*  
**Miquel Blancafort Jorquera**  
Programa de doctorat: Química Teòrica i Modelització Computacional.  
Facultat de Química, Universitat de Barcelona.  
Supervisor/s: Miguel González.  
Novembre 2019.
  
9. *The supramolecular organization of cancer metabolism: from macromolecular crowding to metabolic reprogramming underlying cancer metastasis and drug resistance.*  
**Cristina Balcells Nadal**  
Programa de doctorat: Biotecnologia Molecular.  
Facultat de Química, Universitat de Barcelona.  
Supervisor/s: Marta Cascante, Francesc Mas.  
Desembre 2019.



## TREBALLS FINAL DE MÀSTER 2019

---

1. *Simulation and experimental struvite crystallization with real waste water.*  
**Víctor Alcaraz Esteban**  
Màster: Enginyeria Química.  
Facultat de Química, Universitat de Barcelona.  
Supervisor/s: Alexandra Plesu Popescu, Joan Llorens Llacuna.  
Febrer 2019.
2. *CFD Analysis of mass transfer, shear stress and hydrodynamics in a lab apparatus to test forward osmosis membranes.*  
**Álex Terradillos Guillén**  
Màster Enginyeria Química.  
Facultat de Química, Universitat de Barcelona  
Supervisor/s: Alexandra Plesu Popescu, Joan Llorens Llacuna.  
Abril 2019.
3. *CFD study of NOx emissions decreases by flame additives.*  
**Hector Joel López Molina**  
Màster: Enginyeria Química.  
Facultat de Química, Universitat de Barcelona  
Supervisor/s: Alexandra Plesu Popescu, Jordi Bonet i Ruiz.  
Abril 2019.
4. *Optimization of ethanol and ethyl acetate separation by pressure swing distillation.*  
**Víctor Manso Álvarez**  
Màster: Enginyeria Química.  
Facultat de Química, Universitat de Barcelona  
Supervisor/s: Alexandra Plesu Popescu, David Curcó Cantarell.  
Abril 2019.
5. *Insights on Mo activity in deoxygenation reactions.*  
**Biel Martínez Díaz**  
Màster: Química Teòrica i Modelització Computacional.  
Facultat de Química, Universitat de Barcelona  
Supervisor/s: Francesc Viñes.  
Juny 2019.
6. *A novel intensified process for bioethanol dehydration and blending.*  
**José Luis Pellín Moreno**  
Màster: Enginyeria Química.  
Facultat de Química, Universitat de Barcelona  
Supervisor/s: Alexandra Plesu Popescu, Manuel Vicente Buil.  
Juny 2019.

7. *CFD Modelling with MFIX® of liquid-solid fluidized beds of polydisperse struvite crystals.*  
**Ricardo Moya Chamizo**  
Màster: Enginyeria Química.  
Facultat de Química, Universitat de Barcelona.  
Supervisor/s: Alexandra Plesu Popescu, Ricard Torres Castillo.  
Juny 2019.
8. *Water cycle management and indicators: a review.*  
**Aitor Barroso Roig**  
Màster: Enginyeria Ambiental.  
Facultat de Química, Universitat de Barcelona.  
Supervisor/s: Alexandra Plesu Popescu, Jordi Bonet i Ruiz.  
Juny 2019.
9. *Surrogate model for chemical absorbents mixtures for CO<sub>2</sub> capture.*  
**Enric Selfa Martínez**  
Màster: Enginyeria Ambiental.  
Facultat de Química, Universitat de Barcelona.  
Supervisor/s: Alexandra Plesu Popescu, Jordi Bonet i Ruiz.  
Juny 2019.
10. *ANSYS Fluent simulation of a conventional chimney.*  
**Roger Pitarch Gres**  
Màster: Enginyeria Ambiental.  
Facultat de Química, Universitat de Barcelona.  
Supervisor/s: Alexandra Plesu Popescu, Ricard Torres Castillo.  
Juny 2019.
11. *Comprehensive study of carbon dioxide hydrogenation over Ni (111) surface: reverse Water-Gas Shift reaction vs. Sabatier reaction.*  
**Pablo Lozano-Reis**  
Màster: Química Teòrica i Modelització Computacional.  
Facultat de Química, Universitat de Barcelona.  
Supervisor/s: Pablo Gamallo, Ramón Sayós.  
Juliol 2019.
12. *Unravelling calmodulin conformational ensemble from combined molecular dynamics and FRET simulations.*  
**Daniel Gonzalo Palao**  
Màster: Enginyeria Ambiental.  
Facultat de Farmàcia i Ciències de l'Alimentació, Universitat de Barcelona.  
Supervisor/s: Carles E. Cuturchet.  
Juliol 2019.
13. *Study of the transglycosylation complex of  $\beta$ -galactosidase using molecular dynamics.*  
**Iker Zapiráin Gysling**  
Màster: Química Teòrica i Modelització Computacional.  
Facultat de Química, Universitat de Barcelona.  
Supervisor/s: Carme Rovira.  
Juliol 2019.

14. *Theoretical insight into the active site dynamics of fucosyltransferases.*  
**Beatriz Piniello Castillo**  
Màster: Modelització Computacional Atomística i Multiescala en Física, Química i Bioquímica.  
Facultat de Química, Universitat de Barcelona.  
Supervisor/s: Carme Rovira.  
Juliol 2019.
15. *Disociación de CO<sub>2</sub> catalizada por MXenes.*  
**Raul Morales Salvador**  
Màster: Modelització Computacional Atomística i Multiescala en Física, Química i Bioquímica.  
Facultat de Química, Universitat de Barcelona.  
Supervisor/s: Àngel Morales-García, Francesc Viñes.  
Juliol 2019.
16. *First-principles evaluation of the initial oxidation of transition metal surfaces.*  
**Anabel Jurado Mañas**  
Màster: Química de Materials Avançats.  
Facultat de Química, Universitat de Barcelona.  
Supervisor/s: Francesc Viñes.  
Juliol 2019.
17. *Relacions estructura/propietats magnètiques a la unitat [Dy<sub>2</sub>(RCOO)<sub>4</sub>].*  
**Alba Palacios Requena**  
Màster: Química Teòrica i Modelització Computacional.  
Facultat de Química, Universitat de Barcelona.  
Supervisor/s: Jordi Cirera.  
Juliol 2019.
18. *Desenvolupament d'un camp de forces per primers principis per a gàbies metal·lo-orgàniques de [Fe<sub>4</sub>].*  
**Laia Navarro Maestro**  
Màster: Modelització Computacional Atomística i Multiescala en Física, Química i Bioquímica.  
Facultat de Química, Universitat de Barcelona.  
Supervisor/s: Jordi Cirera.  
Juliol 2019.
19. *Quantum chemical examination of the influence of substituents on the spin crossover temperature of manganocenes.*  
**Florian Matz**  
Facultat de Química, Universitat de Barcelona & Institut für Physikalische Chemie und Elektrochemie (Hannover, Alemanya).  
Supervisor/s: Jordi Cirera.  
Juliol 2019.

20. *Setting up a methodology to decipher cryptic pockets.*  
**Pol Costas Viñas**  
Màster: Química Teòrica i Modelització Computacional.  
Facultat de Ciències, Universitat Autònoma de Madrid.  
Supervisor/s: Jaime Rubio Martínez.  
Juliol 2019.
21. *Selective allosteric inhibition of TKTL1 protein.*  
**Kassiani Motaki**  
Màster: Química Teòrica i Modelització Computacional.  
Facultat de Química, Universitat de Barcelona.  
Supervisor/s: Jaime Rubio Martínez.  
Juliol 2019.
22. *Quest for compounds that selectively activate the pro-apoptotic Bax protein.*  
**Natàlia de Moya Valenzuela**  
Màster: Química Teòrica i Modelització Computacional.  
Facultat de Química, Universitat de Barcelona.  
Supervisor/s: Jaime Rubio Martínez.  
Juliol 2019.
23. *Chemical ordering in Ag-Pt nanoalloys: structures and spectra.*  
**Sofia Olobardi**  
Màster: Química.  
Dipartimento di Scienze Chimiche e Farmaceutiche, Università di Trieste, Itàlia.  
Supervisor/s: Mauro Stener, Konstantin Neyman.  
Juliol 2019.
24. *New computational strategies to obtain kinetic data of enzymatic processes in crowded media.*  
**Raquel Agraso Riobó**  
Màster: Modelització Computacional Atomística i Multiescala en Física, Química i Bioquímica.  
Facultat de Química, Universitat de Barcelona.  
Juliol 2019.
25. *How to accurately model the IR spectra of cosmic nanosilicate dust grains.*  
**Joan Mariñoso Guiu**  
Màster: Química Teòrica i Modelització Computacional.  
Facultat de Química, Universitat de Barcelona.  
Supervisor/s: Stefan T. Bromley.  
Juliol 2019.
26. *Modelling lacto-n-biosidase from Bifidobacterium bifidum by means of molecular dynamics.*  
**Irene Cuxart Sánchez**  
Màster: Bioenginyeria.  
Institut Químic de Sarrià, Universitat Ramon Llull.  
Supervisor/s: Carme Rovira.  
Setembre 2019.

## PARTICIPACIÓ A CONGRESSOS 2019

---

### **Scientific Advisory Board Meeting of the MPSD**

Hamburg (Alemanya) 9 Gener 2019

*Trajectory Approaches for Nonequilibrium Quantum Dynamics in Light-Matter Systems (pòster)*

G. Albareda, A. Kelly, H. Appel, S. Sato, K. Lively, C. Schaffer, N. Hoffmann, A. Rubio

### **10th Symposium on Computing $\pi$ -Conjugated Compounds**

València (Espanya) 31 Gener – 2 Febrer 2019

*Understanding spectral variability in cryptophyte antenna complexes from multiscale simulations (comunicació oral)*

C. Curutchet

### **Chemistry Today for Tomorrow (Science and Education for Smart Growth)**

Sofia (Bulgària) 1 Febrer 2019

*New descriptions for proteins: separation of allergenic from non-allergenic proteins (comunicació oral)*

S. Madurga, M. Nedyalkova, F. Mas, V. Simeonov

*Modelling polyelectrolytes; coupling of conformational and ionization equilibria in solution (comunicació oral)*

F. Mas, P. M. Blanco, S. Madurga, J. L. Garcés

*Theoretical modeling of the transition temperature in spin-crossover molecules (comunicació oral)*

J. Cirera

*Spin transition in dithiazolyl based switchable materials (comunicació oral)*

J. Ribas

*Influence of charge regulation on conformational, ionization and stretching properties of polyelectrolytes (comunicació oral)*

F. Mas, P. M. Blanco, S. Madurga, J. L. Garcés

*Polymer-Borate hybrids films - Theoretical and experimental determination of the structure (pòster)*

H. Hristov, M. Nedyalkova, S. Madurga

*Borosilicate hybrid materials and nanocomposites: synthetic, structural and statistical approach (pòster)*

H. Hristov, M. Nedyalkova, S. Madurga, V. Simeonov

*Predicting partition coefficients by first principles calculations of organic solvents with implicit solvent model (pòster)*

M. Nedyalkova, S. Madurga, M. Tobiszewski, V. Simeonov

### **Presentació de l'Any Internacional de la Taula Periòdica**

Barcelona (Espanya) 5 Febrer 2019

*Presentació de peces musicals a l'Institut del Teatre (conferència convidada)*

S. Alvarez

### **GrapheneforUS International Conference**

Nova York (EUA) 14-15 Febrer 2019

*CO<sub>2</sub> Chemical Trapping on Two-Dimensional MXenes (comunicació oral)*

Á. Morales-García, F. Viñes, R. Morales-Salvador, F. Illas

### **Les mil cares de la taula periòdica (cicle de conferències de la Biblioteca de la Vila de Gràcia)**

Barcelona (Espanya) 18 Febrer 2019

*La taula periòdica com a referent cultural (conferència convidada)*

S. Alvarez

### **APS Spring Meeting**

Boston (EUA) 4-8 Març 2019

*Room Temperature Magnetoresistance in Single-Molecule Device (conferència convidada)*

E. Ruiz

### **Molecular Dynamics Today (MD2d)**

Bolonya (Itàlia) 14-15 Març 2019

*Toward a comprehensive understanding of the mechanisms of biological activity with molecular simulations (comunicació oral)*

F. J. Luque

**6th Computationally Driven Drug Discovery (CDDD) Meeting**

Roma (Itàlia) 28-29 Març 2019

*On the usage of Novel Hydrophobic Molecular Fields for CADD (comunicació oral)*

A. DePlano, O. Rey, J. Vázquez, A. Herrero, E. Gibert, E. Herrero, F. J. Luque

**ACS National Meetings**

Orlando (EUA) 31 Març – 2 Abril 2019

*Morphology Dependence of Stability and Properties of Stoichiometric TiO<sub>2</sub> Nanoparticles (comunicació oral)*

À. Morales-García, A. Macià, S. T. Bromley, F. Illas

**CECAM School on Hybrid Quantum Mechanics / Molecular Mechanics (QM/MM) Approaches to Biochemistry and beyond**

Lausanne (Suïssa) 8-12 Abril 2019

C. Rovira (organització)

**CECAM School on Kinetics and Dynamics of Chemical Reactions**

Saragossa (Espanya) 8-12 Abril 2019

P. Gamallo (organització)

*Kinetic Monte Carlo Simulations (seminari)*

P. Gamallo

*Molecular Dynamics (seminari)*

X. Giménez

*Calculating kinetic coefficients of chemical reactions using quantum dynamics (seminari)*

F. Huarte-Larrañaga

*Wave-packet quantum Dynamics: overview and Applications to chemical reactions (seminari)*

P. Gamallo

**International Astronomical Union: S350 Laboratory Astrophysics**

Cambridge (Regne Unit) 14 Abril 2019

*Using Atomistically Detailed Simulations to Understand the Formation, Structure and Composition of Astrophysical Silicate Dust Grains (comunicació oral)*

S. T. Bromley

**Centre in Green Chemistry and Catalysis (CGCC) 10th Annual Symposium**

Montreal (Canadà) 11 Maig 2019

*Insights in Mo<sub>2</sub>C activity in deoxygenation reactions (pòster)*

B. Martínez, F. Viñes, P. McBreen, F. Illas

**25th Topical Meeting of the International Society of Electrochemistry**

Toledo (Espanya) 12-15 Maig 2019

*Why breaking scaling relations does not necessarily lead to better electrocatalysts (comunicació oral)*

Federico Calle-Vallejo

**FOTOFUEL Workshop on Solar Fuels**

Madrid (Espanya) 13-14 Maig 2019

*Unbiased Analysis of the Interplay between Size, Morphology and Energy Gap in Realistic TiO<sub>2</sub> Nanoparticles (conferència convidada)*

Á. Morales-García

**13th Carbohydrate Bioengineering Meeting (CBM13)**

Tolosa de Lengadoc (França) 19 Maig 2019

*Early stages of glycogen biosynthesis: mechanism of action of glycogenin (comunicació oral)*

C. Rovira

*Oxazoline or oxazolinium ion? The reaction mechanism of GH18 chitinases (comunicació oral)*

J. Coines, M. Alfonso-Prieto, X. Biarnés, A. Planas, C. Rovira



**World Chemistry Forum 2019**

Barcelona (Espanya) 22-24 Maig 2019

*Novel catalysts for methane activation at room temperature (conferència keynote)*

F. Illas

*Effects of oxide supports on reactivity of metal particles in catalysis and energy technologies (conferència convidada)*

K. M. Neyman

**XXXVII Reunión Bienal de la Real Sociedad Española de Química**

Donostia (Espanya) 26-30 Maig 2019

*Multiscale modeling of light harvesting in cryptophyte photosynthesis (comunicació oral)*

C. Curutchet

*Games with the Periodic Table to increase public awareness of science (comunicació oral)*

J. Poater, S. Simon, M. Miquel Solà, M. Duran

**New Trends in Statistical Physics: 50 years of the Sitges Conference**

Sitges (Espanya) 27-31 Maig 2019

*Weak Polyelectrolyte Modelling: Coupling Charge Regulation and Conformational Equilibria vis LEIP Methodology (pòster)*

J. L. Garcés, P. M. Blanco, S. Madurga, F. Mas

*A New Model for Macromolecular Diffusion in Crowded Media: the Chain Entanglement Soft Potential (pòster)*

P. M. Blanco, S. Madurga, J. L. Garcés, F. Mas

**MasterQuímica XV**

Barcelona (Espanya) 28-30 Maig 2019

*Noves estartègies computacionals per obtenir dades cinètiques dels processos enzimàtics en medi aglomerat (pòster)*

R. Agraso, P. M. Blanco, S. Madurga, F. Mas

**Theoretical Chemistry and Computational Modelling: 20 years promoting Excellence in Science (20TCCM)**

Donostia (Espanya) 30 Maig – 1 Juny 2019

*Magnetic and Conductive properties in multifunctional bisdithiazoly-based materials (comunicació oral)*

C. Roncero

*Bifunctional catalysts at work: unravelling synergic effects by kinetic Monte Carlo simulations (pòster)*

R. Sayós, H. Prats, S. Posada-Pérez, J. A. Rodríguez, F. Illas

**X Symposium IQTC-UB**

Barcelona (Espanya) 31 Maig 2019

Jordi Cirera (organització)

*A Computational View on Astronomical Silicate Nanoclusters (conferència convidada)*

A. Macià

*Mechanistic insights into substrate-assisted glycoside hydrolases (conferència convidada)*

Joan Coines

*Rotational relaxation in superfluid helium nanodroplets (pòster)*

M. Blancafort, A. Vilà, M. González

*Vibrational relaxation in superfluid helium nanodroplets (pòster)*

M. Blancafort, A. Vilà, M. González

*Unravelling Calmodulin conformational ensemble from combined Molecular Dynamics and FRET simulations (pòster)*

D. Gonzalo, C. Curutchet

*Correcting Flaws in the Assignment of Nitrogen Chemical Environments in N-Doped Graphene (pòster)*

M. Figueras, I. J. Villar-Garcia, F. Viñes, C. Sousa, V. A. de la Peña O'Shea, F. Illas

*Insights on Mo<sub>2</sub>C Activity in Deoxygenation Reactions (pòster)*

B. Martínez, F. Viñes, P. McBreen, F. Illas

*Carbon Dioxide Hydrogenation over Nickel Catalysts: DFT and Kinetic Monte Carlo (pòster)*

P. Lozano, H. Prats, P. Gamallo, F. Illas, R. Sayós

*Accuracy of the Topological Approach for Nanoalloys: Case Study of PtCu Nanoparticles (pòster)*

L. Vega, F. Viñes, K. M. Neyman

*How to accurately model IR spectra of silicate granes (pòster)*

J. Mariñoso, A. Macià, S. T. Bromley

*Weak Polyelectrolyte Modelling: Coupling Charge Regulation and Conformational Equilibria vis LEIP Methodology (pòster)*

J. L. Garcés, P. M. Blanco, S. Madurga, F. Mas

*A New Model for Macromolecular Diffusion in Crowded Media: the Chain Entanglement Soft Potential (pòster)*

P. M. Blanco, S. Madurga, J. L. Garcés, F. Mas

*Analysis of the supramolecular structure of helicobacter pyloriurease extracellular at different pHs by molecular dynamics simulation (pòster)*

H. L. Barazorda-Ccahuana, B. Gómez, F. Mas, S. Madurga

*New computational strategies to obtain kinetic data of enzymatic processes in crowded media (pòster)*

R. Agraso, P. M. Blanco, S. Madurga, F. Mas

*Prediction of partition coefficients by ab initio calculations (pòster)*

L. Saranjan, M. Nedyalkova, V. Simeonov, F. Mas, S. Madurga

*Theoretical insight into the active site Dynamics of O-fucosyltransferase 1(pòster)*

Beatriz Piniello, C. Rovira

*Selective hydrogenation from alkynes into alkenes on transition metal carbide surfaces: C<sub>2</sub>H<sub>2</sub> activation (pòster)*

Carlos Andrés Jimenez-Orozco, Elizabeth Florez, Jose Rodríguez

*Alzheimer's disease: What can lipophilicity teach us? (pòster)*

William J. Zamora, J. M. Campanera, K. P. Kepp, F. J. Luque

*Framework electron count and estructural trends in [Li<sub>2</sub>X<sub>2</sub>] rings (pòster)*

Juan Diego Velasquez, J. Echeverria, S. Alvarez

### **An introductory workshop in biomedical glycoscience**

Donostia (Espanya) 3 Juny 2019

*Modeling catalytic mechanisms in carbohydrate-active enzymes (conferència convidada)*

C. Rovira

**Delegació del CSIC**

Barcelona (Espanya) 3 Juny 2019

*La taula periòdica com a icona cultural (conferència convidada)*

S. Alvarez

**International Meeting on Nanoalloys 2019 (IMN 2019)**

Gènova (Itàlia) 4-7 Juny 2019

*Accuracy of the Topological Approach for nanoalloys: Case study of PtCu nanoparticles (pòster)*

L. Vega, F. Viñes, K. M. Neyman

*Atomic ordering in large bimetallic particles from DFT+Topological calculations (comunicació oral)*

K. M. Neyman

**Exploring Complex Free Energy Landscapes: Structure/Function Formation, Multiscales, and Long-timescales**

Mainz (Alemanya) 5 Juny 2019

*How does nature make glycosidic bonds. Insight from enhanced-sampling QM/MM simulations (conferència convidada)*

C. Rovira

**Nordic Polymer Days 2019**

Trondheim (Noruega) 5-7 Juny 2019

*Exploring mechanically-induced charge regulation in weak polyelectrolytes by computer modelling (comunicació oral)*

P. M. Blanco, J. L. Garcés, F. Mas, S. Madurga

**XIIth International School on Organometallic Chemistry “Marcial Moreno Mañas”**

Castelló de la Plana (Espanya) 12-14 Juny 2019

*DFT studies on copper-catalyzed hydroboration/C–C bond formation reactions (comunicació oral)*

J. Jover, E. Ruiz

**3rd International Congress of Chemical Engineering (ANQUE-ICCE)**

Santander (Espanya) 17-18 Juny 2019

P. Gamallo (*moderador sessió científica*)

*Molecular modelling applied to post-combustion CO<sub>2</sub> capture and separation (comunicació oral)*

G. Alonso, H. Prats, X. Giménez, F. Llovell, R. Sayós, P. Gamallo

**1st Congreso Iberoamericano de Ingeniería Química (CIBIQ)**

Santander (Espanya) 19-21 Juny 2019

*New materials from computational simulations (comunicació oral)*

S. Kamalinahad, F. Viñes, P. Gamallo

*Modelling of phosphonium-based ILs for gas separation from the combination of the soft-SAFT equation of state and COSMO-RS techniques (comunicació oral)*

G. Alonso, P. Gamallo, R. Sayós, F. Llovell

**Bioheterocycles 2019. XVIII International Conference on Heterocycles in Biorganic Chemistry**

Gant (Bèlgica) 20 Juny 2019

*Biradical formation by deprotonation in conjugate 2-amino/imino thiazolew derivatives (pòster)*

C. Heras, A. San Juan, D. Reta, R. Valero, G. Albareda, N. F. Chilton, A. Fielding, Ibério de P. R. Moreira, J. M. Bofill, F. López-Calahorra

**Milestones in Molecular Simulations**

Londres (Regne Unit) 21 Juny 2019

*How carbohydrate-active enzymes work. Insight from enhanced-sampling QM/MM simulations (conferència convidada)*

C. Rovira

**5th EUChemS Inorganic Chemistry Conference (EICC-5)**

Moscú (Rússia) 24-28 Juny 2019

*Computational Modeling of Transition Temperatures in Spin-Crossover Systems (comunicació oral)*

J. Cirera

*Computational study of NO single-site disproportionation on Fe<sup>II</sup>(MOF-5) (comunicació oral)*

J. Jover, C. K. Brozek, M. Dincă, N. López

**9è Curs d'Introducció a la Química Computacional (IQTCUB)**

Barcelona (Espanya) 25-28 Juny 2019

G. Aullón (coordinador)

**Universidade Nova de Lisboa**

Caparica (Portugal) 26 Juny 2019

*The Periodic Table as a Cultural Icon (conferència convidada)*

S. Alvarez

**26th Thermodynamics Conference**

Punta Umbria (Espanya) 26-28 Juny 2019

*Assessing salt-surfactant synergistic effects on interfacial tension from molecular dynamics simulations (comunicació oral)*

G. Alonso, P. Gamallo, A. Mejía, R. Sayós

*Interfacial properties of the water + hexane mixture along three-phase line (comunicació oral)*

G. Alonso, M. Cartes, A. Mejía, E. A. Müller

**Universidade do Minho**

Braga (Portugal) 28 Juny 2019

*Photographers of Chemistry: Art and Documentation (conferència convidada)*

S. Alvarez

**20th European Carbohydrate Symposium (EUROCARB)**

Leiden (Països Baixos) 30 Juny – 4 Juliol 2019

*How carbohydrate-active enzymes work. Insight from computer simulation (conferència plenària)*

C. Rovira

*Oxazoline Or Oxazolinium Ion? The Protonation State and Conformation of the Reaction Intermediate of Chitinase Enzymes (comunicació oral)*

J. Coines, M. Alfonso-Prieto, X. Biarnés, A. Planas, C. Rovira

*Catalytic mechanism of  $\beta$  - galactosidases (pòster)*

A. Nin-Hill, L. Raich, C. Rovira

*The Sweet Gateway of Pseudomonads: Sugar Transport Across the OprB Porin (pòster)*

J. Coines, S. Acosta-Gutiérrez, I. Bodrenko, C. Rovira, M. Ceccarelli

*Unveiling the molecular mechanism of a novel oligoxylanase (comunicació oral i pòster)*

M. A. B. Morais, J. Coines, M. N. Domingues, R. A. S. Pirolla, C. Rovira, M. T. Murakami

### **MQM 2019 9th Molecular Quantum Mechanics Conference**

Heidelberg (Alemanya) 5 Juliol 2019

*The gentlest ascent dynamics method with conjugate directions: a new and efficient algorithm to locate transition states (pòster)*

J. M. Bofill, J. Ribas-Ariño, R. Valero, I. de P. R. Moreira, G. Albareda, W. Quapp

*Quantum equilibration in a model system porphine (pòster)*

J. M. Bofill, G. Albareda, I. de P. R. Moreira

*Valence tautomerism in organic and organometallic compounds generates unexpected biradical species: a valence bond interpretation (pòster)*

I. de P. R. Moreira, J. M. Bofill, R. Valero, G. Albareda

*The Frenkel-Kontorova Chain (pòster)*

W. Quapp, J. M. Bofill

### **19th Meeting of the Spanish Society of Medicinal Chemistry**

Vitòria (Espanya) 8-11 Juliol 2019

*On the bioactive species of azocine-based AChE inhibitors: Interplay between activity and tautomerism (comunicació oral)*

A. Viayna, S. Antermite, C. Altomare, F. J. Luque

### **XXXVII Reunión bienal Real Sociedad Española de Física**

Saragossa (Espanya) 15-19 Juliol 2019

*Quantum dynamics of  $H_2$  in SWCNTs: Eigenstates, diffusion and surface coupling (comunicació oral)*

F. Huarte-Larrañaga

**CECAM Workshop on Recent developments in quantum dynamics**

Lió (França) 17 Juliol 2019

*Approaches to nonadiabatic quantum dynamics without potential-energy surfaces (conferència convidada)*

G. Albareda

**35<sup>a</sup> Reunió Anual de la XRQTC**

Barcelona (Espanya) 18 Juliol 2019

Francesc Illas, Silvia Chellini (co-organització)

*Towards a comprehensive understanding of Pt-based electrocatalysts (conferència convidada)*

Federico Calle-Vallejo

*N-Benzyl 4,4-disubstituted piperidines as a potent class of influenza H1N1 virus inhibitors showing a novel mechanism of hemagglutinin fusion peptide interaction (conferència convidada)*

Tiziana Ginex

*Vibrational relaxation of diatomic molecules in superfluid helium nanodroplets. Influence of the interaction potential, vibrational energy separation and nanodroplet size (pòster)*

M. Blancafort, A. Vilà, M. González

*A quantum dynamics approach to the rotational relaxation of diatomic molecules inside superfluid helium nanodroplets. Application to some isotope variants of H<sub>2</sub> (pòster)*

M. Blancafort, A. Vilà, M. González

*Unravelling Calmodulin conformational ensemble from combined Molecular Dynamics and FRET simulations (pòster)*

D. Gonzalo, C. Curutchet

*Analysis of the supramolecular structure of helicobacter pyloriurease extracellular at different pHs by molecular dynamics simulation (pòster)*

H. L. Barazorda-Ccahuana, B. Gómez, F. Mas, S. Madurga

*New computational strategies to obtain kinetic data of enzymatic processes in crowded media (pòster)*

R. Agraso, P. M. Blanco, S. J.L. Garcés, Madurga, F. Mas

*Quantum Equilibration in a Model System Porphine (pòster)*

J. M. Bofill, G. Albareda, I. de P. R. Moreira, R. Valero

*Carbon dioxide hydrogenation over the Ni (111) surface: reverse Water-Gas Shift reaction vs Sabatier reaction (pòster)*

P. Lozano, H. Prats, P. Gamallo, F. Illas, R. Sayós



**The 18th International Symposium on Novel Aromatic Compounds (ISNA-18)**

Sapporo (Japó) 21 Juliol 2019

*Hückel's rule categorizes aromatic closo-boron hydride clusters (comunicació oral)*

J. Poater

**Horizon 2020 Project "Materials Networking" Advanced Materials Workshop**

Varna (Bulgària) 21-25 Juliol 2019

*Stability or Photoactivity? Properties of Realistic TiO<sub>2</sub> Nanoparticles (comunicació oral)*

Á. Morales-García, A. Macià, S. T. Bromley, F. Illas

*Two Dimensional Transition Metal Carbides/Nitrides (MXenes) as Potential Catalysts for CO<sub>2</sub> Conversion to CO (comunicació oral)*

R. Morales-Salvador, D. Gouveia, Á. Morales-García, F. Viñes, José R. B. Gomes, F. Illas

*Correcting Flaws in the Assignment of Nitrogen Chemical Environments in N-doped Graphene (comunicació oral)*

M. Figueras, I. J. Villar-García, F. Viñes, C. Sousa, V. de la Peña O'Shea, F. Illas

*First Principles Evaluation of the Initial Oxidation of Transition Metal Surfaces (comunicació oral)*

A. Jurado-Mañas, F. Viñes

*Multiscale modeling of spin-crossover phenomena in molecular materials (comunicació oral)*

J. Cirera

**XXVI Encontro Nacional de SPQ**

Porto (Portugal) 24-26 Juliol 2019

*A computational study on the water splitting reaction by MXenes (comunicació oral)*

D. Gouveia, Á. Morales-García, F. Viñes, F. Illas, J. R. B. Gomes

**XXVIII International Materials Research Congress**

Cancun (Mèxic) 18-23 Agost 2019

K. M. Neyman (co-organització, moderador sessió científica)

*Improving accuracy of the topological approach for nanoalloys: Case study of PtCu nanoparticles (pòster)*

L. Vega, F. Viñes, K. M. Neyman

*Accuracy of the topological approach for nanoalloys: Case study of PtCu nanoparticles (pòster)*

L. Vega, F. Viñes, K. M. Neyman

*Metal/metal-oxide interface effects in catalytic nanomaterials: Theory versus experiment (conferència convidada)*

K. M. Neyman

*Atomic ordering in large bimetallic particles from DFT+Topological calculations (conferència convidada)*

K. M. Neyman

### **MCARE 2019**

Jeju Island (Corea del Sud) 19-23 Agost 2019

*Designing water splitting catalysts using heuristic rules: advantages, dangers and alternatives (conferència convidada)*

Federico Calle-Vallejo

### **258th American Chemical Society National Meeting and Exposition**

San Diego (EUA) 25-29 Agost 2019

*Computational modelling of ceria-based nanocomposite materials for catalysis (conferència convidada)*

K. M. Neyman

*Interface effects with oxide supports on the structure and reactivity of metal particles relevant for catalysis (conferència convidada).*

K. M. Neyman

### **Light & Life - 2019 ESP-IUPB World Congress**

**(17th International Congress on Photobiology & 18th Congress of the European Society for Photobiology)**

Barcelona (Espanya) 25-30 Agost 2019

*Multiscale modeling of light harvesting in cryptophyte photosynthesis (comunicació oral)*

C. Curutchet

**CECAM/Psi-K School on Density-functional theory and beyond – high-throughput screening and big-data analytics, towards exascale computational materials science**  
Barcelona (Espanya) 26 Agost – 5 Setembre 2019

E. Ruiz (organització)

**Hands-on-DFT 2019**

Barcelona (Espanya) 26 Agost – 6 Setembre 2019

*Unraveling Morphological and Topological Key Aspects of Pd Nanoparticles (pòster)*  
L. Vega, F. Viñes, K. M. Neyman

*Subsurface Carbon: A General Feature of Noble Metals (pòster)*  
O. Piqué, I. Z. Koleva, F. Viñes, H. A. Aleksandrov, G. N. Vayssilov, F. Illas

*Morphology Dependence of Stability and Properties of Stoichiometric TiO<sub>2</sub> Nanoparticles (pòster)*  
A. Morales-García, A. Macià, S. T. Bromley, F. Illas

*CO<sub>2</sub> methanation reaction on the Ni (111) surface: first-principles (pòster)*  
P. Lozano, H. Prats, P. Gamallo, F. Illas, R. Sayós

**12th European Conference on Computational and Theoretical Chemistry (EUCC-CTC)**

Perúgia (Itàlia) 1-5 Setembre 2019

*First-principles-based kinetic Monte Carlo simulations in heterogeneous catalysis: Application to water-gas shift reaction with several catalysts (conferència keynote)*  
R. Sayós, H. Prats, S. Posada-Pérez, J. A. Rodríguez, F. Illas

**1st International Conference on Noncovalent Interactions (ICNI2019)**

Lisboa (Portugal) 2-6 Setembre 2019

*Carbonyl-carbonyl interactions in transition metal complexes (conferència convidada)*  
J. Echeverría

**Computation and Understanding in Quantum Molecular Science**

Tolosa de Llenguadoc (França), 3-6 Setembre 2019

*Continuity and Discontinuity in the Periodic Table (conferència convidada)*

S. Alvarez

**8th IAPC Metting**

Split (Croàcia) 9-11 Setembre 2019

*The influence of the background salt in the n-octanol/water distribution coefficient of ionizable drugs (pòster)*

C. Ràfols, M. Rosés, W. J. Zamora, F. J. Luque

**Faraday Discussion: Quantum effects in complex systems**

Coventry (Regne Unit) 11-13 Setembre 2019

*Kinetic Quantum Sieving of Hydrogen Isotopologues in Carbon Nanotubes: Competition of ZPE effects and Resonance Enhanced Tunneling (pòster)*

M. Mondelo-Martell, F. Huarte-Larrañaga

**7th European Conference on Molecular Magnetism (ECMM 2019)**

Florència (Itàlia) 15-19 Setembre 2019

*Magnetism and electronic transport in Bisdithiazolyl-based multifunctional materials: a computational study (pòster)*

C. Roncero

*Revising the common understanding of metamagnetism in the molecule-based bisdithiazolyl BDTMe compound (pòster)*

M. Deumal

*Encapsulating Mononuclear Single Molecule Magnets (comunicació oral)*

S. Gómez-Coca, M. Amoza, L. Maxwell, E. Ruiz

**European Materials Research Symposium Fall Meeting 2019 – Symposium Q**

Varsòvia (Polònia) 16 Setembre 2019

*Breaking scaling relations does not always lead to enhanced OER electrocatalysts (conferència convidada)*

Federico Calle-Vallejo

*Tracking the Properties of Oxides from Nanoparticle to Bulk (comunicació oral)*

S. T. Bromley

*Understanding the Interplay between Size, Morphology and Energy Gap in Photoactive TiO<sub>2</sub> Nanoparticles (comunicació oral)*

S. T. Bromley

*Interplay between Size, Morphology and Energy Gap in Realistic TiO<sub>2</sub> Nanoparticles (comunicació oral)*

À. Morales-García, A. Macià, S. T. Bromley, F. Illas

**The 23rd International conference on “Horizons in Hydrogen Bond Research” (HBOND2019)**

Amsterdam (Països Baixos) 23 Setembre 2019

*Non-terran biosolvents model structure, stability and replication of B-DNA (conferència convidada)*

J. Poater, T.A. Hamlin, C. Fonseca Guerra, F.M. Bickelhaupt

**XI International Conference on Mechanisms of Catalytic Reactions**

Sochi (Rússia) 7 – 11 Octubre 2019

K. M. Neyman (comitè científic i moderador sessió científica)

*Metal/metal-oxide interface effects in catalytic materials: Theory versus experiment (comunicació oral)*

K. M. Neyman

**Blas Cabrera 2019 Physics Seminar**

Tenerife (Espanya) 16 Octubre 2019

*Tailoring Low-Dimensional Materials with Impact on the Activation of CO<sub>2</sub> and on Photocatalysis (conferència convidada)*

À. Morales-García

**22nd Conference on Process Integration for Energy Saving and Pollution Reduction - PRES'19**

Creta (Grècia) 20-23 Octubre 2019

*Integrated Reaction-Separation Processes Sequencing and Screening at Early Stages of Design (conferència convidada)*

K. Marin, J. Bonet-Ruiz, A. E. Plesu Popescu, V. Plesu, P. Iancu, J. Llorens

*Hydration of Cyclohexene to Cyclohexanol In A Hybrid Reactive Distillation with A Side Decanter (pòster)*

I. Marçante, A. E. Plesu Popescu, V. Plesu, J. Bonet-Ruiz, P. Iancu, J. Llorens

*Energy Consumption in Sharp and Non-Sharp Splits of Ideal Ternary Mixtures (pòster)*

S. Exposito, V. Plesu, J. Bonet-Ruiz, A. E. Plesu Popescu, P. Iancu, J. Llorens

**Symposium "Advances in cluster beam deposition"**

Okinawa (Japó) 20-25 Novembre 2019

*Metal/metal-oxide interface effects in catalytic nanomaterials: Theory versus experiment (comunicació oral)*

K. M. Neyman

**The 3rd Sustainable Process Integration Laboratory Scientific Conference: Energy, Water, Emission & Waste in Industry and Cities**

Brno (República Txeca) 21-22 Novembre 2019

*Bioethanol dehydration process in a gasoline-mixing process (pòster)*

J. L. Pellín, A.E. Plesu, J. Bonet, J. Llorens

*Concentration of orthophosphate and ammonium via forward osmosis to precipitate them as struvite (pòster)*

J. Labanda, J. Llorens, A. E. Plesu, J. Bonet

**SancaMedChem2019 - The Sao Carlos Special Medicinal Chemistry Meeting**

Sao Carlos (Brasil) 25-27 Novembre 2019

*Disclosing the molecular determinants of bioactive compounds: From chemical structure to mechanisms of drug action (comunicació oral)*

F. J. Luque

**Advances in Computational Biology (AdvCompBio 2019)**

Barcelona (Espanya) 28-29 Novembre 2019

*Model-driven discovery of metabolic reprogramming associated to metastatic cancer and cisplatin resistance (pòster)*

M. Cascante, C. Balcells, C. Foguet, M. Tarrado, O. Camacho, P. de Atauri, T. Thomson, F. Mas, S. Marin

**Scientific Advisory Board Meeting of the IQTC-UB**

Barcelona (Espanya) 29 Novembre 2019

*Unravelling Calmodulin conformational ensemble from combined Molecular Dynamics and FRET simulations (pòster)*

D. Gonzalo, C. Curutchet

*Dual classical/quantum MD strategy for the determination of site energies in photosynthetic complexes: Application to the PC645 antenna (pòster)*

B. Ozaydin, M. Corbella, C. Curutchet

*First-Principles Evaluation of the Initial Oxidation of Transition Metal Surfaces (pòster)*

A. Jurado-Mañas, F. Viñes, F. Illas

*Morphology Dependence of Stability and Properties of Stoichiometric TiO<sub>2</sub> Nanoparticles (pòster)*

À. Morales-García, A. Macià, S. T. Bromley, F. Illas

*H<sub>2</sub> Dissociation on Transition Metal Carbide Surfaces (pòster)*

J. J. Piñero, P. J. Ramírez, S. T. Bromley, F. Illas, F. Viñes, J. A. Rodríguez

*Unraveling Morphological and Topological Key Aspects of Pd Nanoparticles (pòster)*

L. Vega, F. Viñes, K. M. Neyman

*Accuracy of the Topological Approach for Nanoalloys: Case Study of PtCu Nanoparticles (pòster)*

L. Vega, F. Viñes, K. M. Neyman

*X-Ray Photoelectron Spectroscopy: Theoretical Approach (pòster)*

M. Figueras, I. J. V. García, F. Viñes, C. Sousa, V. A. de la Peña O'Shea, F. Illas

*Tuning Activity of Transition Metal Carbides by Surface Metal Alloying: Case of Study of CO<sub>2</sub> Capture (pòster)*

M. López, L. Broderick, J. Carey, F. Viñes, M. Nolan, F. Illas

*Subsurface Carbon: A General Feature of Noble Metals (pòster)*

O. Piqué, I. Z. Koleva, F. Viñes, H. A. Aleksandrov, G. N. Vayssilov, F. Illas

*Grazynes: A New Family of Carbon-Based Materials from IQTCUB (pòster)*

P. Gamallo, F. Viñes

*CO<sub>2</sub> Methanation Reaction on the Ni(111) Surface: First-Principles Kinetic Monte Carlo Study (pòster)*

P. Lozano, H. Prats, P. Gamallo, F. Illas, R. Sayós

*Weak Polyelectrolyte Modelling: Coupling Charge Regulation and Conformational Equilibria vis LEIP Methodology (pòster)*

J. L. Garcés, P. M. Blanco, S. Madurga, F. Mas

*A New Model for Macromolecular Diffusion in Crowded Media: the Chain Entanglement Soft Potential (pòster)*

P. M. Blanco, S. Madurga, J. L. Garcés, F. Mas

*Effect of pH on conformational behaviour in peptides. Simulation of polyaspartic acid (pòster)*

C. Privat, S. Madurga, F. Mas, J. Rubio.

*Analysis of the supramolecular structure of helicobacter pyloriurease extracellular at different pHs by molecular dynamics simulation (pòster)*

H. L. Barazorda-Ccahuana, B. Gómez, F. Mas, S. Madurga

*Prediction of partition coefficients by ab initio calculations (pòster)*

L. Saranjan, M. Nedyalkova, V. Simeonov, F. Mas, S. Madurga

### **3rd International Caparica Christmas Conference on Translational Chemistry 2019**

Lisboa (Portugal) 2 Desembre 2019

*Open-shell Jellium aromaticity in metal clústers (conferència convidada)*

J. Poater, M. Solà

### **3rd International Caparica Christmas Conference on Translational Chemistry (IC3TC)**

Caparica (Portugal) 2-5 Desembre 2019

*Molecular Magnetism: Tailoring Mononuclear Single Molecule Magnets behaviour of First-Row Transition Metal Complexes (comunicació oral)*

S. Gómez-Coca, E. Ruiz



## ESTADES EN CENTRES EXTERNS

---

- Alemany, P.      **Universidad Católica del Norte (Xile)**  
Investigador visitant UB convidat per Jaime Llanos.  
Maig 2019
- Alemany, P.      **Donostia International Physics Center, Donostia (Espanya)**  
Investigador visitant UB convidat per Abel Carreras.  
Desembre 2019
- Bernuz, E.      **Donostia International Physics Center, Donostia (Espanya)**  
Investigador visitant UB convidat per Abel Carreras.  
Desembre 2019
- Curutchet, C.      **Universitat Federal d'ABC, Santo André (Brasil)**  
Estada de Recerca amb Prof. Paula Homem-de-Mello.  
Setembre 2019
- Ginex, T.      **University of Bristol, Bristol (Regne Unit)**  
Estada de Recerca amb Prof. Prof. Adrian Mulholland.  
Febrer 2019
- López Berbel, M.      **Tyndall National Institut, Cork (Irlanda)**  
Estada de Recerca amb Prof. Michael Nolan.  
Juny-Agost 2019
- Llunell, M.      **Donostia International Physics Center, Donostia (Espanya)**  
Investigador visitant UB convidat per Abel Carreras.  
Desembre 2019
- Neyman, K. M.      **University of Sofia, Sofia (Bulgària)**  
Investigador visitant convidat.  
Maig 2019
- Nin-Hill, A.      **University of York, York (Regne Unit)**  
Estada de Recerca amb Prof. Gideon J. Davies.  
Abril-Juny 2019
- Rovira, C.      **University of York, York (Regne Unit)**  
Estada de Recerca amb Prof. Gideon J. Davies.  
Maig-October 2019

## PARTICIPACIÓ EN PROJECTES D'INVESTIGACIÓ \_\_\_\_\_

*Institute of Theoretical and Computational Chemistry, (Excellence Unit "María de Maeztu").*

E. Ruiz, Universitat de Barcelona

**MdM-2017-0767**, 2018-2021

Ministerio de Economía y Competitividad (MINECO)

Import: 2.000.000 EUR

*Estructura Electrónica y Propiedades en Moléculas y Sólidos Inorgánicos.*

E. Ruiz, Universitat de Barcelona

**PGC2018-093863-B-C21**, 2019-2021

Ministerio de Economía y Competitividad (MINECO)

Import: 210.000 EUR

*Estructura electrónica y propiedades de moléculas y sólidos inorgánicos.*

P. Alemany, K. Neyman, Universitat de Barcelona

**PGC2018-093863-B-C22**, 2019 – 2021

Ministerio de Economía y Competitividad (MINECO)

Import: 121.000€

*Diseño Racional de Nuevos Catalizadores Heterogeneos, Electrocatalizadores y Fotocatalizadores Para la Produccion de Energia Limpia Sostenible a Traves de la Conversion de H<sub>2</sub>.*

F. Illas, Universitat de Barcelona

**RTI2018-095460-B-I00/AEI/FEDER**, 2019 – 2021

Ministerio de Economía y Competitividad (MINECO)

Import: 229.900 EUR

*Química Computacional Aplicada para la captura, separación y conversión de CO<sub>2</sub> en combustibles ligeros.*

R. Sayós, P. Gamallo, Universitat de Barcelona

**RTI2018-094757-B-I00/AEI/FEDER**, 2019 – 2021

Ministerio de Economía y Competitividad (MINECO)

Import: 85.426 EUR

*Modeling and Simulation of reactive processes in enzymes by means of ab initio molecular dynamics and QM/MM methods.*

C. Rovira, Universitat de Barcelona

**CTQ2017-85496-P/AEI/FEDER**, 2018-2020

Ministerio de Economía y Competitividad (MINECO)

*Diseño racional desde una perspectiva computacional de materiales basados en radicales orgánicos con propiedades de interés tecnológico.*

M. Deumal, J. J. Novoa, Universitat de Barcelona

**CTQ2017-87773-P/AEI/FEDER**, 2018-2020

Ministerio de Economía y Competitividad (MINECO)

*Structure-based modeling of the role of the environment in photosynthetic light harvesting and protein fluorescence.*

C. Curutchet, Universitat de Barcelona

**CTQ2017-89924-P/AEI/FEDER**, 2018-2020

Ministerio de Economía y Competitividad (MINECO)

Import: 65.340 EUR

*Estudio Computacional del Control Mecanoquímico de Reacciones de Interés en Química Biorgánica.*

J. M. Bofill, I. de P. R. Moreira, Universitat de Barcelona

**CTQ2016-76423-P/AEI/FEDER**, 2017-2019

Ministerio de Economía y Competitividad (MINECO)

Import: 36.300 EUR

*Diseño computacional de pares de bases de ADN artificiales que pueden ser replicados.*

J. Poater, Universitat de Barcelona

**CTQ2016-77558-R/AEI/FEDER**, 2016-2019

Ministerio de Economía y Competitividad (MINECO)

*Producción de bio-plásticos a partir de la fracción orgánica de residuos municipales.*

J. Mata, J. Llorens, Universitat de Barcelona

**CTM2016-76275-R**, 2016-2020

Ministerio de Economía y Competitividad (MINECO)

Import: 139.150 EUR

*Understanding, controlling and optimizing heterogeneous catalysts and photocatalysts at the nanoscale. Application to carbon dioxide conversion and hydrogen production.*

F. Illas, S. T. Bromley, Universitat de Barcelona

**CTQ2015-64618-R/AEI/FEDER**, 2016-2019

Ministerio de Economía y Competitividad (MINECO)

*Computational Materials Science Laboratory.*

F. Illas, Universitat de Barcelona

**2017 SGR 13**, 2018-2021

Agència de Gestió d'Ajuts Universitaris i de Recerca (AGAUR)

Import: 68.000 EUR

*Modelització i Disseny de Sistemes Químics Radicalaris.*

J. M. Bofill, Universitat de Barcelona

**2017 SGR 348**, 2018-2020

Agència de Gestió d'Ajuts Universitaris i de Recerca (AGAUR)

Import: 20.000 EUR

*Grup de Bioinformàtica Integrativa.*

M. Cascante, Universitat de Barcelona

**2017 SGR 1033**, 2017-2020

Agència de Gestió d'Ajuts Universitaris i de Recerca (AGAUR)

*Grup de recerca consolidat: Estructura i funció en macromolècules.*

C. Rovira, Universitat de Barcelona

**2017 SGR 1189**, 2017-2020

Agència de Gestió d'Ajuts Universitaris i de Recerca (AGAUR)

*Grup d'Estructura Electrònica.*

S. Alvarez, Universitat de Barcelona

**2017 SGR 1289**, 2017-2019

Agència de Gestió d'Ajuts Universitaris i de Recerca (AGAUR)

Import: 44.480 EUR

*Biologia Computacional i Disseny de Fàrmacs.*

F. J. Luque, Universitat de Barcelona

**2017 SGR 1746**, 2017-2020

Agència de Gestió d'Ajuts Universitaris i de Recerca (AGAUR)

*Theoretical study on the receptor-cannabinoid affinities and dynamics.*

C. Curutchet, Universitat de Barcelona

**2018 DI 043**, 2019-2021

Generalitat de Catalunya (GENCAT)

Import: 21.600 EUR

*Beca Postdoctoral Beatriu de Pinós.*

Silvia Gómez-Coca, Universitat de Barcelona

**2017 BP 00080**, 2018-2020

Generalitat de Catalunya (GENCAT)

Import: 90.000 EUR

*Captura de CO<sub>2</sub> emitido por vehiculo basados en motores de combustión, mediante absorció en sólidos porosos.*

X. Gimenez, P. Gamallo, Universitat de Barcelona

**IDI-20190124**, 2019-2021

Centro para el Desarrollo Tecnológico Industrial (CDTI), Recam Laser S.L.

Import: 146.000 EUR

*Deciphering the Metabolism of Haematological Cancers (HaemMetabolome).*

M. Cascante, Universitat de Barcelona

**8P1MCA - H2020. PILLAR 1-EXCELLENT SCIENCE. MCA. Marie Sklodowska-Curie Actions, 675790**, 2015-2019

Unió Europea

*Tuning Tubulin Dynamics and Interactions to Face Neurotoxicity: a Multidisciplinary Approach for Training and Research (TubInTrain).*

M. Cascante, Universitat de Barcelona

**860070** – H2020-MSCA-ITN-2019, 2019- 2023

Unió Europea

*Instituto Nacional de Bioinformática.*

M. Cascante, Universitat de Barcelona

Ayudas para proyectos de investigación del área de Ciencias de la Salud (FIS), 2018-2020

Ministerio de Economía y Competitividad (MINECO)

*Training interdisciplinary glycoscientists to get a molecular-level grip on glycocodes at the human mucosa–microbiota interface.*

C. Rovira, Universitat de Barcelona

**814102-SWEET CROSSTALK**, 2019-2022

Programa Europeu H2020

*Recuperació i valorització de recursos de digestats urbans en el marc de l'economía circular (DIGESTAKE).*

J. F. Garcia, Universitat de Barcelona

**COMRDI16-1-0061-01**, 2017 – 2020

Acció, Agència de Suport a l'Empresa Catalana

Import: 117.934 EUR

*Energy and charge transfer by non-orthogonal configuration interaction*

C. Sousa, M. Llunell, Universitat de Barcelona

**CHM154**, 2019-2020

Oak Ridge Leadership Computing Facility (EUA)

*Mecanismos moleculares implicados en la inhibición de dianas para tratamientos anti-influenza: canal de protones M2 y hemaglutinina.*

F. J. Luque, Universitat de Barcelona

**SAF-2017-88107-R**, 2018-2020

Ministry of Economy and Competitiveness (MINECO)

Import: 90.750 EUR

*Identificación, síntesis y evaluación toxicológica de molécula propia antidetonante.*

F. J. Luque, Universitat de Barcelona

**FBG-309799**, 2018-2019

REPSOL-YPF, SA

Import: 98.780 EUR

*Enhancing the scientific capacity of the Faculty of Chemistry and Pharmacy at Sofia University as leading regional research and innovation centre in the area of advanced functional materials (Materials Networking).*

K. Neyman, Universitat de Barcelona

**8SEWP - H2020. SEWP. Spreading Excellence and Widening Participation**, 2016-2019

Unió Europea

*QUIFIEXP - Química Física Experimental.*

J. Iñes, Universitat de Barcelona

**GINDO-UB/112**, 2016-2019

PPID – Projectes d'Innovació Docent (UB)

*ICREA Acadèmia.*

F. Illas, Universitat de Barcelona

2016-2020

Institut Català de Recerca Avançada (ICREA, Generalitat de Catalunya)

*Synthesis and characterization of the structural modifications of  $Y_2WO_6:RE/TiO_2$  core/shell nanoparticles ( $RE^{3+} = Eu, Sm$  and  $Gd, Er$  and the couple  $Er/Yb$ ) and their use as photoelectrodes for the improvement of the efficiency of red and NIR sunlight harvesting in DSSCs.*

J. Llanos, North Catholic University, Antofagasta (Xile), P. Alemany, Universitat de Barcelona

**Fondecyt, 1181302**, 2018-2021

CONICYT

*COST Action CA18234 – Computational materials sciences for efficient water splitting with nanocrystals from abundant elements*

M. Caspary Toroker, TECHNION, Haifa, Israel

**European Commission**, 2019-2023

European Cooperation in Science and Technology Program

*Estudi de laboratori i planta pilot per la recuperació d'amoni dels purins.*

J. Mata Álvarez, F. Mas, Universitat de Barcelona

Contracte Empresa, 2017-2019

INDUKERN (Veterinary division)

*Reactivity of lattice oxygen in nanostructured CeO<sub>2</sub> doped by Pt and Pd.*

K. Neyman, Universitat de Barcelona

**QCM-2018-3-0018**, 2018-2019

Red Española de Supercomputación (RES)

*Atomic ordering in bimetallic nanoparticles of fcc-type: Pt-Ni.*

K. Neyman, Universitat de Barcelona

**QCM-2019-1-0032, QS-2019-2-0022**, 2019

Red Española de Supercomputación (RES)

*Striking chemical orderings in bimetallic nanoparticles with silver and gold atomic shells.*

K. Neyman, Universitat de Barcelona

**QS-2019-3-0023**, 2019-2020

Red Española de Supercomputación (RES)



**Institut de Química Teòrica  
i Computacional**