

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

Memòria d'activitats 2008-2009

CONTINGUTS DE LA MEMÒRIA

I. Descripció de l'IQTUB	3
I.1. Equip directiu	5
I.2. Equip tècnic	5
I.3. Equipaments	6
I.4. Grups de recerca	12
I.5. Membres permanents i no permanents	13
II. Activitats de l'IQTCUB	17
II.1. Activitats de tipus general	19
II.2. Seminaris i conferències de l'IQTCUB	20
II.3. Investigadors convidats per l'IQTCUB	22
II.4. Congressos i activitats de promoció científica de l'IQTCUB	23
III. Activitat científica dels membres de l'IQCTUB	25
III.1. Descripció de les línies de recerca	27
III.2. Activitats en cada línia de recerca	29
III.3. Resultats més rellevants	56
III.4. Llista de publicacions	79
Articles	79
Capítols de llibres i <i>proceedings</i>	101
III.5. Altres activitats	103
Tesis doctorals	103
Màsters oficials	104
Participació a congressos	105
Estades en centres de prestigi	121
Participació en projectes d'investigació	124

I. Descripció de l'IQTCUB

La creació de l'Institut de Química Teòrica i Computacional de la Universitat de Barcelona (IQTCUB), va ser aprovat pel Consell de Govern de la UB del 27 de novembre del 2007. Els objectius principals d'aquest institut es centren en potenciar la recerca en els àmbits de la Química Teòrica i Computacional al sí de la UB mitjançant la vertebració de l'activitat científica dels 14 grups de recerca que en formen part i afavorir, així mateix, les activitats interdisciplinàries que permetin abordar nous reptes en aquesta disciplina.

I.1. Equip directiu

Prof. Francesc Illas Riera	<i>Director</i>
Dr. Pere Alemany Cahner	<i>Secretari</i>
Prof. Josep Maria Bofill Villà	<i>Vocal</i>

I.2. Equip tècnic

Jordi Inglés Camats	<i>Responsable de sistemes</i>
Joan Francesc Masanas Mustienes	<i>Tècnic informàtic</i>
Raul Porcel Martínez	<i>Tècnic informàtic</i>

I.3. Equipaments

Actualment el IQTCUB disposa de 4 clústers de càlcul distribuïts en dues sales dins de la facultat de Física i Química.

La primera sala és la sala VAX que es troba al soterrani (planta 0) la qual encabeix els clústers d'ordinadors DELL **hades** i **cerqt** i té dos aires condicionats amb la potència suficient per a refrigerar els dos clústers més petits del centre:

cerqt (valor aproximat 50.000 euros)

<i>Tipus de màquina</i>	Clúster DELL (2 armaris).
<i>Sistema Operatiu</i>	Debian 3.0.
<i>Serveis</i>	Clúster de càlcul i servidor DNS. Servidor DHCP intern.
<i>Estructura</i>	Màster + 15 nodes en clúster
<i>Comentaris</i>	Clúster accessible per tots els grups en torns mensuals (6 mesos per grup). Conté una pantalla+teclat-mouse per gestionar totes les màquines.
<i>Especificacions</i>	
MASTER	
CPU	Intel Pentium XEON 2GHz
RAM	512 MB
HD	2 discos de 120 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).
NODES	
CPU	Intel Pentium 4 1.8GHz
RAM	1 GB
HD	Un disc de 80 GB
Xarxa	1 tarja 100/1000 (xarxa interna)

hades (valor aproximat 50.000 euros)

<i>Tipus de màquina</i>	Clúster DELL (2 armaris).
<i>Sistema Operatiu</i>	Debian 3.0.
<i>Serveis</i>	Clúster de càlcul. Servidor DHCP intern.
<i>Estructura</i>	Màster + 15 nodes en clúster
<i>Comentaris</i>	Clúster idèntic a cerqt pertanyent al grup 4 (Francesc Illas). Conté una pantalla+teclat-mouse per gestionar totes les màquines.
<i>Especificacions</i>	
MASTER	
CPU	Intel Pentium XEON 2GHz
RAM	512 MB
HD	2 discos de 120 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).

NODES

CPU	Intel Pentium 4 1.8GHz
RAM	1 GB
HD	Un disc de 80 GB
Xarxa	1 targeta 100/1000 (xarxa interna)

La resta de clústers estan a la sala situada al soterrani de l'edifici de les facultats de Química i Física, al costat de la zona d'aparcament, actualment refrigerada per una màquina d'aire de 40K frigories.

cerqt2 (valor aproximat 400.000euros)

<i>Tipus de màquina</i>	Clúster SUN (4 armaris).
<i>Sistema Operatiu</i>	Red Hat Enterprise Server 2.1 i en els nodes de 64 bits Suse 9.2.
<i>Serveis</i>	Clúster de càlcul i servidor de discos (raid amb master fent un total de 1.5TB). Servidor DHCP intern.
<i>Estructura</i>	Màster + 112 nodes en clúster.
<i>Comentaris</i>	Accessible des del 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 tret de les del armari 4 que necessiten ser gestionades amb cable allargador de pantalla cap a recursos.

Especificacions:

MASTER

CPU	Xeon Dual a 3.06GHz (32bits)
RAM	4GB
HD	4 discos en raid formant 817GB
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 3.06GHz SUN V60X

CPU	Xeon Dual a 3.06GHz (32 bits)
RAM	3GB
HD	1 disc de 72GB
Xarxa	2 targetes 100/1000 (xarxa interna) + 2 targetes lom 100 (administració interna entre nodes).

92 NODES 32 bits a 2.80GHz SUN V60X

CPU	Xeon Dual a 2.80GHz (32 bits)
RAM	6 nodes a 4GB, 86 nodes a 3GB
HD	2 discos de 36GB
Xarxa	2 targetes 100/1000 (xarxa interna) + 2 targetes lom 100 (administració interna entre nodes).

12 NODES 64 bits a 1.80GHz SUN V25Z

CPU	Operton Dual a 1.80GHz (64 bits)
RAM:	10 nodes a 8GB, 2 nodes a 16GB
HD	10 nodes de 2 discos de 72GB, 2 nodes de 2 discos 72Gb i 300GB respectivament.

Xarxa	2 targetes 100/1000 (xarxa interna) + 2 targetes lom 100 (administració interna entre nodes)
1 NODE 64 bits a 2.20GHz SUN V25Z:	
CPU	Opteron Dual a 2.20GHz (64 bits)
RAM	16GB
HD	2 discos de 144GB
Xarxa:	2 targetes 100/1000 (xarxa interna) + 2 targetes lom 100 (administració interna entre nodes).

iqtc1 (valor aproximat 500.000euros)

<i>Tipus de màquina</i>	Clúster HP
<i>Sistema Operatiu</i>	Debian Stable.
<i>Serveis</i>	Clúster de càlcul i servidor de discos (raid amb màster fent un total de 3TB). Servidor DHCP intern.
<i>Estructura</i>	Màster + 92 nodes en clúster
<i>Comentaris</i>	Sala nova (soterrani del pàrquing). Conté un servidor de discos. Cada grup és propietari d'alguns nodes. Hi ha 11 nodes intel xeon amb 8 processadors, la resta són amd opteron amb 4 processadors. Tots els processadors són de 64 bits

Especificacions

MASTER Proilant DL-385:

CPU	2 AMD Opteron 275 Dualcore a 2.2GHz
RAM	4GB
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).

81 NODES AMD Proilant DL-145:

CPU	2 AMD Opteron 275 Dualcore a 2.2GHz
RAM	8GB
HD	2 discos de 80GB
Xarxa	2 targetes 100/1000 (xarxa interna)
Xarxa d'administració ILO	

11 NODES INTEL Proilant DL-140:

CPU	2 Intel Xeon E5345 Quadcore a 2.3GHz
RAM	16GB
HD	2 discos de 80GB
Xarxa	2 targetes 100/1000 (xarxa interna)
Xarxa d'administració ILO	

26 NODES INTEL Proilant DL-160:

CPU:	2 Xeon QuadCore 2,5Ghz
RAM	16-32GB
HD	2-4 discos de 250GB
Xarxa	2 targetes 100/1000 (xarxa interna)
Xarxa d'administració ILO	

Servidor de discos glusterfs (valor aproximat: 25.000 euros)

<i>Tipus de màquina</i>	Clúster DELL
<i>Sistema Operatiu</i>	SuSE server 10.2.
<i>Serveis</i>	Clúster de discos formant 15TB de disc per exportar mitjançant GlusterFS les dades d'usuari a tots els clústers.
<i>Estructura</i>	5 nodes en clúster
<i>Comentaris</i>	Servei crític amb un sai dedicat i fonts redundants.
<i>Especificacions</i>	
	Node PowerEdge 2950:
	CPU 2 QuadXeon E5540
	RAM 8GB
	HD: 1 disc 80GB (Sistema operatiu) + 4 discs 1TB (raid 5)
	Xarxa 2 targetes 100/1000 xarxa interna

Servidors d'entrada portals (valor aproximat 1200 euros)

<i>Tipus de màquina</i>	2 màquines redundants HP Proilant DL-120
<i>Sistema Operatiu</i>	Debian stable
<i>Serveis</i>	SGE Execution Host, Heartbeat, ssh server
<i>Estructura</i>	2 nodes redundants
<i>Comentaris</i>	Portals d'entrada dels usuaris per enviar càlculs i accedir a les dades.
<i>Especificacions</i>	
	Node HP Proilant DL-120:
	CPU 1 Dual Core 2.33GHz
	RAM 2GB
	HD 2 disc 80GB (Sistema operatiu) (raid0)
	Xarxa 2 targetes 100/1000 xarxa interna

Servidors de vitalització (valor aproximat 1200euros)

<i>Tipus de màquina:</i>	2 màquines redundants HP Proilant DL-120
<i>Sistema Operatiu</i>	Debian stable
<i>Serveis</i>	Xenha i tots els serveis virtuals ofertats al IQTCUB
<i>Estructura</i>	2 nodes redundants
<i>Comentaris</i>	Màquina que encabeix les màquines virtuals de l'IQTCUB (SGE, dhcp, servidor llicències etc.). Suportada per un sai conjuntament amb portals
<i>Especificacions:</i>	
	Node HP Proilant DL-120:
	CPU 1 Dual Core 2.33GHz
	RAM 8GB
	HD 2 disc 160GB (Sistema operatiu) (raid0)
	Xarxa 2 targetes 100/1000 xarxa interna

Altres (valor aproximat 26.000 euros)

A part dels serveis anteriors tenim altres màquines (PCs a mode de servidors temporals) i maquinari de computació per donar xarxa a tot el conjunt dels serveis de l'IQCTUB:

- Màquina Backup ACER Altos G35 (màquina de backup amb 5TB de disc i un sai de suport).
- Màquina d'administració (pc amb 3 targetes de xarxa per suport a incidències crítiques)
- Màquina proxy (servidor que dona sortida a la xarxa publica des de la xarxa de l'IQCTUB)
- Switch Layer 3 HP Proilant de 48 ports (dóna cobertura a tota la infraestructura dels CPD del IQCTUB).
- 8 Switchs Layer 3 Dlink de 48 ports (xarxa interna clústers)
- Switch modulable HP (8 mòduls per xarxa interna clúster iqtc1)
- Màquina Cintes HP (48TB per a backup)

Potència de càlcul

TOTAL CPU'S: 890 CPU's

TOTAL MEMÒRIA= 1037 GB RAM

TOTAL DISC CàLCUL = 43.2 TB de disc

TOTAL DADES USUARI = 20 TB de disc

Valor aproximat total

Consumibles (cablejat de xarxa, etc.)	1.053.400 euros
Condicionament sala màquines 2006	50.000 euros
Aire Condicionat 2006	30.000 euros
Cablejat sala elèctrica 2008	45.308 euros
Aire Condicionat Liebert 2009	47.466 euros

Valor aproximat final **1.226.174 euros**



I.4. Grups de l'IQCTUB

A l'Institut de Química Teòrica i Computacional de la Universitat de Barcelona (IQCTUB) hi participen catorze grups de recerca. A continuació es presenta la relació de grups amb els corresponents responsables.

Grup d'Estructura Electrònica (EE)

Dr. Eliseo Ruiz, Química Inorgànica (UB).

Grup d'Estructura de Materials Moleculars (GEM2)

Prof. Juan José Novoa Vide, Química Física (UB).

Simulació computacional de dinàmica de reaccions en superfície

Dr. Ramon Sayós Ortega, Química Física (UB).

Laboratori de Ciència de Materials Computacional / Computational Materials Science Laboratory (CMSL)

Prof. Francesc Illas Riera, Química Física (UB).

Dinàmica de Reaccions Atmosfèriques i Sistemes Complexos (DRASC)

Prof. Miguel González Pérez, Química Física (UB).

Modelización de Sistemas Biológicos y Diseño de Fármacos

Prof. Jaime Rubio Martínez, Química Física (UB).

Química Teòrica i Computacional

Dr. Albert Solé Sabaté, Química Física (UB).

Electronic Structure and Symmetry (ESS)

Dr. Pere Alemany i Cahner, Química Física (UB).

Estructura i Dinàmica de Sistemes Moleculars Complexes

Prof. Josep Maria Bofill Villà, Química Orgànica (UB).

Grup de Dinàmica de Reaccions Químiques

Prof. Antonio Aguilar Navarro, Química Física (UB).

Simulació Quàntica de Processos Biològics

Dr. Carme Rovira Virgili, Parc Científic de Barcelona.

Dinàmica de Reaccions en Sistemes Poliatòmics (RDPOLSYS)

Dr. Fermín Huarte Larrañaga, Química Física (UB).

Biofísicoquímica de Macromolècules i Col·loides

Prof. Francesc Mas Pujadas, Química Física (UB).

Self-Organized Complexity & Self-assembling Materials (SOC&SAM)

Dr. Ramon Reigada Sanz, Química Física (UB).

I.5. Membres de l'IQTCUB

L'IQTCUB està constituït per un total de 77 docents/investigadors. A continuació es mostra la llista completa de membres segons la seva categoria acadèmica.

Cognoms	Nom	Departament/Unitat
<i>Catedràtics</i>		
Aguilar Navarro	Antonio	Química Física
Alvarez Reverter	Santiago	Química Inorgànica
Bofill Villà	Josep Maria	Química Orgànica
Gonzalez Perez	Miguel	Química Física
Illas Riera	Francesc	Química Física
Mas Pujadas	Francesc	Química Física
Novoa Vide	Juan José	Química Física
Rubio Martínez	Jaime	Química Física
<i>Professors titulars</i>		
Albertí Wirsing	Margarita	Química Física
Alemaný Cahner	Pere	Química Física
Costa Sala	Ramón	Química Inorgànica
De Andrés Llopis	Jaime	Química Física
de Pinho Ribeiro Moreira	Ibério	Química Física
Garcia Bach	Maria Àngels	Física Fonamental
Giménez Font	Xavier	Química Física
Llunell Marí	Miquel	Química Física
Lucas Alcorta	Josep Maria	Química Física,
Mota Valeri	Fernando	Química Física
Ruiz Sabín	Eliseo	Química Inorgànica
Sayós Ortega	Ramón	Química Física
Solé Sabaté	Albert	Química Física
Sousa Romero	Carme	Química Física
Vilaseca Font	Eudald	Química Física

Professors Agregats i Lectors

Aullón López	Gabriel	Química Inorgànica
Deumal Solé	Mercè	Química Física
Huarte Larrañaga	Fermín	Química Física
Madurga Díez	Sergio	Química Física
Reigada Sanz	Ramon	Química Física

Professors Associats

Gamallo Belmonte	Pablo	Química Física
Mayneris Perxachs	Jordi	Química Física
Rodríguez García	Alejandro	Química Física
Tercero Mohedano	Javier	Química Inorgànica

Investigadors ICREA

Bromley	Stephan	Química Física
Neyman	Konstantin M.	Química Física
Rovira Virgili	Carme	Parc Científic de Barcelona

Investigadors Postdoctorals

Casanova Casas	David	IQTCUB
Clarke	Caroline Sarah	Química Física
Feria	Leticia	Química Física
Gómez Lara	Isabel	Química Física
Migani	Annapaola	Química Física
Pastor del Campo	Isabel	Química Física
Radilla	Juan	Química Física
Serrano Pérez	Juan José	Química Física
Vidossich	Pietro	Parc Científic de Barcelona
Zwijnenburg	Martijn	Química Física

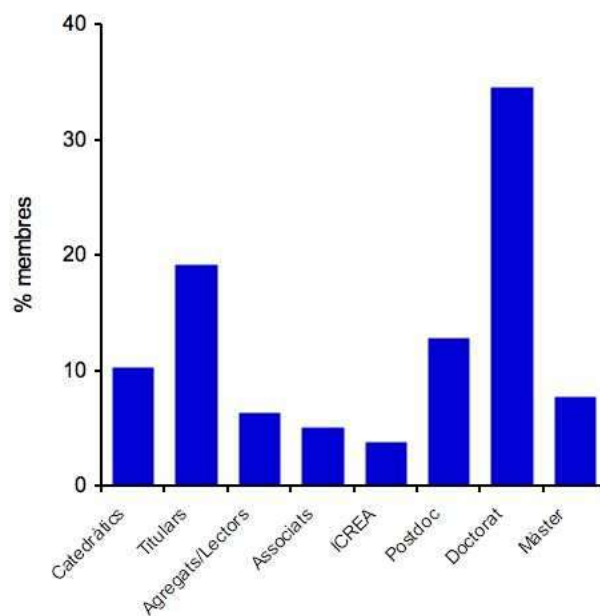
Estudiants de Doctorat

Aguilar Fargas	Javier	Química Física
Aguilar Mogas	Antoni	Química Orgànica
Alfonso Prieto	Mercedes	Parc Científic de Barcelona
Ardevol Grau	Albert	Parc Científic de Barcelona
Bruix Fusté	Albert	Química Física
Caballero Puig	Marc	Química Física
Capdevila Cortada	Marçal	Química Física
Carreras Conill	Abel	Química Física
Cremades Martí	Eduard	Química Inorgànica
D'Oria	Emiliana	Química Física
Delgado Soler	Laura	Química Física
Echeverría López	Jorge	Química Inorgànica
García Yoldi	Iñigo	Química Física

Gómez Coca	Sílvia	Química Inorgànica
Gomez Llobregat	Jordi	Química Física
Jornet Somoza	Joaquim	Química Física
Martinez-Seara Monne	Hector	Química Física
Merchán Fernández	Norma	Química Física
Moix Teixidor	Marc	Química Física
Morón Tejero	Víctor	Química Física
Obiol Pardo	Cristian	Química Física
Peigné	Benjamin	Química Inorgànica
Rivero	Pablo	Química Física
Roldán	Alberto	Química Física
Ruiz Martínez	Antonio	Química Inorgànica
Tur Tur	David	Química Física
Vela Llausi	Sergi	Química Física

Estudiants de Màster

Asara	Gian Giacomo	Química Física
Charneco Rosales	Cristina	Química Física
López Marne	Estefanía	Química Física
Martínez Suárez	Luis	Química Física
Simón Ampurdanès	Anna	Química Física
Stradi	Danielle	Química Física



Percentatge d'investigadors de l'IQCTUB segons categoria acadèmica.

II. Activitats de l'IQTCUB

II.1. Activitats de tipus general

Durant el curs 2008-2009, i fins a la data, el Consell de direcció s'ha reunit en 3 ocasions (12 de febrer de 2008, 29 de febrer de 2008, 21 de desembre de 2009). En aquests consells el director ha informat els membres del consell sobre la planificació, el desenvolupament i/o l'execució de les diferents activitats promocionals, divulgatives, científiques i relacionades amb l'adquisició d'infraestructura.

A continuació es detallen les accions i activitats ja portades a terme o encara en curs amb un termini d'execució no superior a finals de 2009.

- a. Construcció de la pàgina web de l'Institut: en col·laboració amb el responsable de sistemes informàtics Sr. Jordi Inglés Camats i el webmaster Professor Dr. Miquel González Pérez.

Despesa associada: 5.220 €

- b. El 30 de novembre de 2009 finalitza el primer contracte anual de la gestora de l'Institut i es renova l'esmentat contracte programa per un segon any, per dur a terme les tasques administratives relacionades amb la gestió científica de l'Institut (gestió de despeses associades al contracte programa, manteniment de la pàgina web, suport a l'organització de reunions, seminaris i congressos, elaboració de la memòria d'activitats, manteniment del cens, etc.) i com a promotor científic de projectes de recerca. Aquesta segona faceta implica la gestió dels projectes de recerca obtinguts a través del propi l'Institut, estar al dia i informar als grups de les característiques de les diverses convocatòries de projectes, donar suport als investigadors en les feines de preparació de nous projectes, organització de jornades de coordinació i preparació dels informes de seguiment i d'avaluació.

Despesa associada: 41.134,00 €

- c. Durant el curs 2008-2009, s'implementa la *Proposta d'Adequació de Programes de Doctorat de l'EEES per al Curs 2008/2009*. El programa de doctorat en Química Teòrica i Computacional es planteja com una eina fonamental per formar nous investigadors en aquest camp de recerca, i com a continuació natural del màster en Química Teòrica i Computacional per aquells alumnes que vulguin completar la seva formació amb un doctorat. És de destacar que el programa de doctorat en Química Teòrica i Computacional va obtenir la menció de qualitat del Ministeri d'Educació l'any 2007. La

Universitat de Barcelona va homologar aquest màster l'any 2008. Durant el curs 2008-2009 els següents professors de l'Institut van impartir docència en aquest programa: Dr. Juan José Novoa, Dr. Juan Carlos Paniagua i el Dr. Eudald Vilaseca, ho van fer en el primer semestre, mentre que la Dra. Mercè Deumal i els Drs. Francesc Illas, Ibério de P. R. Moreira i Jaime Rubio ho van fer en el segon semestre.

II.2. Seminaris i conferències de l'IQTCUB

D'ençà del setembre de 2008 i fins a la data, l'IQTCUB ha organitzat 15 seminaris i conferències:

- 1. Ángel S. Sanz, (CSIC Madrid)**
Mecánica Bohmiana: el concepto de trayectoria frente a la mecánica cuántica tradicional.
30 de setembre de 2008
- 2. Emilio Martínez-Núñez, (Dept. Química Física, Univ. Santiago de Compostela)**
Simulación de procesos "Soft-landing" entre gases y superficies orgánicas monocapa autoensambladas.
6 de novembre de 2008
- 3. Carles Bo, (ICIQ Tarragona)**
Títol: *Polioxometalats gegants: estructura dinàmica de clústers d'aigua encapsulada.*
3 de desembre de 2008
- 4. Stephen K. Gray, (Chemical Sciences and Engineering Division, Argonne National Laboratory, Argonne)**
Quantum dynamics of gas phase and nano-confined systems.
12 de desembre de 2008
- 5. Oriol Vendrell, (Physicalisch-Chemisches Institut, Univ. Heidelberg)**
MCTDH simulations of the infrared spectroscopy and dynamics of the protonated water-dimer.
8 de gener de 2009
- 6. Philippe Sautet, (Institute of Chemistry, Université de Lyon)**
Insights in heterogeneous catalysis mechanisms from DFT calculations.
14 de gener de 2009
- 7. Andrey Belyaev, (Dept. Theoretical Physics, Herzen State University, Russia).**
The generalized diatomics-in-molecules method for polyatomics.
14 de gener de 2009

- 8. Ramon Crehuet, (IQAC-CSIC Barcelona)**
Interacció entre catàlisi i dinàmica en els enzims. El cas de les aldolases de classe II i altres reptes computacionals.
11 de febrer de 2009
- 9. Víctor Guallar, (Barcelona Supercomputing Center, Barcelona)**
QM/MM methods: an electronic and atomic view of nature.
11 de març de 2009
- 10. Wilfred T. Tysoe, (University of Wisconsin-Milwaukee)**
Probing reaction pathways on model catalyst surfaces: vinyl acetate synthesis on Palladium and Gold/Platinum alloys.
27 de març de 2009
- 11. Francesc Illas, (Dept. Química Física, Univ. Barcelona)**
Tuning the catalytic activity of Gold nanoparticles: role of the support.
13 de maig de 2009
- 12. Miguel Paniagua, (Dept. Química Física Aplicada, Univ. Autònoma Madrid)**
Quimisorción de H₂ en nanoobjetos de oro.
20 de maig de 2009
- 13. David Casanova, (IQTCUB, Univ. Barcelona)**
Ground and excited electronic states with spin-flip methods: radicals, magnetic couplings, avoided crossings, conical intersections and more.
16 de setembre de 2009
- 14. Stefan Bromley, (Dept. Química Física, Univ. Barcelona)**
New materials and novel properties: predictions from nanocluster assembly.
28 d'octubre de 2009
- 15. Santiago Schnell, (Univ. of Michigan, Ann Arbor, MI)**
Modelling Reactions Inside the Cells.
10 de desembre de 2009

II.3. Investigadors convidats per l'IQTCUB

D'ençà del Setembre de 2008 i fins a la data, l'IQTCUB ha tingut els següents visitants:

16. Dr. José Daniel Sierra

Departamento de Química, Universidad de La Rioja (Espanya).

Inici 21 de setembre de 2008

Final 27 de setembre de 2008

17. Dr. Rodrigo Martínez

Departamento de Química, Universidad de La Rioja (Espanya).

Inici 21 de setembre de 2008

Final 27 de setembre de 2008

18. Sr. José Ángel Martínez

Departamento de Química, Universidad de La Rioja (Espanya).

Inici 21 de setembre de 2008

Final 27 de setembre de 2008

19. Prof. Miguel Paniagua

Departamento de Química Física Aplicada, Universidad Autónoma de Madrid (Espanya).

Inici 13 de novembre de 2008

Final 14 de novembre de 2008

20. Prof. Stephen K. Gray

Chemical Sciences and Engineering División, Argonne National Laboratory, Argonne, Illinois, (EUA).

Inici 7 de desembre de 2008

Final 12 de desembre de 2008

21. Prof. Andrej Belyaev

Herzen State University of Russia (Rússia).

Inici 12 de gener de 2009

Final 17 de gener de 2009

22. Prof. Miguel Paniagua

Departamento de Química Física Aplicada, Universidad Autónoma de Madrid (Espanya).

Inici 18 de maig de 2009

Final 23 de maig de 2009

23. Prof. Adriana Isovrana

University of West Timisoara, Timisoara (Romania).

Inici 5 de setembre de 2009

Final 12 de setembre de 2009

24. Dr. Laura Pitulice

University of West Timisoara, Timisoara (Romania).

Inici 5 de setembre de 2009

Final 12 de setembre de 2009

25. Dr. Dario Defazio

CNR-IMIP a Monterotondo Scalo, Roma (Itàlia).

Inici 22 d'octubre de 2009

Final 3 de desembre de 2009

26. Dra. Noelia Faginas Lago

Dip. Chimica, Università di Perugia (Itàlia).

Inici 19 d'octubre de 2009

Final 30 d'octubre de 2009

27. Dr. Santiago Schnell

Univ. of Michigan, Ann Arbor, MI (EUA).

Inici 9 de desembre de 2009

Final 13 de desembre de 2009

II.4. Congressos i activitats de promoció científica de l'IQTCUB

En el marc de l'escola d'estiu de Química Teòrica i Computacional de Catalunya (Xarxa de Química Teòrica i Computacional de Catalunya), de la qual el Dr. Pere Alemany Cahner n'és el director, diversos membres de l'IQTCUB han participat en l'organització dels cursos següents:

Nanoporus Materials (coordinador Stefan Bromley, del 16 al 20 de juny 2008).

Introduction to Solid State Chemistry using CRYSTAL (coordinadors Ibério de P.R. Moreira i Miquel Llunell Marí, del 6 al 10 de juliol de 2009)

Atmospheric Chemistry (coordinador Josep Maria Anglada Rull, del 6 al 10 de juliol de 2009)

El passat 29 de juny a 3 de juliol va tenir lloc en el marc de les reunions de Químics Teòrics de Catalunya la 25^a trobada que es va dedicar també a homenatjar a un dels seus iniciadors, el Professor Dr. Santiago Olivella Nello del CSIC. El comitè organitzador va estar format pels següents membres del Institut, Dr. Francesc Illas Riera, Dr. Albert Solé Sabaté, Dr. Josep Maria Bofill Villà, i el Dr. Ibério de Pinho Ribeiro Moreira.

III. Activitat científica dels membres de l'IQTCUB

III.1. Descripció de les línies de recerca

L'activitat científica de l'institut s'estructura en set àrees de recerca diferenciada descrites a continuació.

L1. Mètodes teòrics i algorismes

El desenvolupament de mètodes teòrics i algorismes està orientat a la resolució de problemes d'interès en diverses àrees de recerca, des de l'estudi de l'estructura (mesures contínues de simetria, polimorfisme, estructura electrònica d'estats excitats i magnetisme molecular), a la dinàmica (mètodes dinàmics basats en el camí de reacció, dinàmica quàntica de reaccions poliatòmiques i engranatges moleculars) l'espectroscòpia (ressonància magnètica nuclear) i la mecànica estadística (processos de complexació i reacció-difusió).

L2. Dinàmica i cinètica de reaccions, estats excitats i espectroscòpia

Les reaccions químiques tenen lloc a través d'una sèrie d'etapes elementals que constitueixen el que es coneix com a mecanisme de reacció. Generalment l'eficiència d'una reacció ve determinada per la que s'anomena etapa limitant. Qualsevol intent de comprensió detallada d'un procés químic, o bé de la millora de la seva eficiència, ha de partir d'un estudi acurat d'aquesta etapa limitant. L'estudi de les reaccions químiques a nivell fonamental es pot dur a terme des d'una perspectiva experimental o bé teòrica. Una de les tècniques experimentals que permet aconseguir un aprofundiment més gran sobre les reaccions químiques (condicions de col·lisió senzilla) és la tècnica dels feixos moleculars. Pel que fa a la vessant teòrica de l'estudi, cal distingir diverses etapes: la caracterització químic-quàntica dels punts estacionaris al llarg del camí de reacció de la superfície d'energia potencial (SEP), l'obtenció d'una representació de la SEP i la realització de l'estudi pròpiament dinàmic i/o cinètic de la reacció. Els estudis dinàmics i cinètics es poden realitzar emprant eines de la mecànica quàntica o la mecànica clàssica, i en el cas dels estudis cinètics també es poden utilitzar mètodes estadístics basats en la teoria de l'estat de transició. Utilitzant aquesta sèrie de tècniques, en l'institut s'estudien, p. ex., reaccions característiques de la química atmosfèrica i combustió, i processos en interfases gas-superfície. Relacionats amb els estudis anteriors estan els estudis de dinàmica molecular en clústers i sistemes solvatats, la fisorció de gasos en sistemes nanoestructurats. També s'estudien els engranatges i motors moleculars i molècules en estats excitats, així com la seva fotoquímica i el seu fotomagnetisme.

L3. Estructura molecular i química quàntica

La recerca sobre estructura molecular i química quàntica, inclou estudis sobre aplicacions de les mesures de forma i simetria a problemes de química estructural, estructura electrònica i enllaç en compostos inorgànics, enllaços intermoleculars en sòlids d'interès tecnològic, i el càlcul ab initio de superfícies de energia potencial per l'estudi de la dinàmica de reaccions.

L4. Matèria tova, macromolècules, col·loides i membranes

La recerca sobre matèria tova, macromolècules, col·loides i membranes, inclou l'estudi de la complexació macromolecular en sistemes col·loïdals i la seva aplicació a l'especiació de metalls pesants i a la caracterització de biopolímers, així com l'estudi de fenòmens d'agregació supramolecular que donen lloc a monocapes i bicapes lipídiques.

L5. Físicoquímica de biosistemes i disseny de fàrmacs

Aquesta recerca inclou, d'una banda, la modelització de mecanismes de reacció enzimàtica a nivell atòmic mitjançant dinàmica molecular ab initio i tècniques QM/MM. D'altra banda, també es considera l'estudi de processos de reacció-difusió en medis molt densos (gels i medis intracel·lulars), la simulació de processos de difusió anòmala i aplicació de tècniques instrumentals (espectroscòpia de correlació de fluorescència, FRAP, etc.) per a la seva caracterització, i l'estudi dels mecanismes de catàlisi enzimàtica que es produeixen in vivo. Aquesta línia de recerca també inclou el disseny de fàrmacs, mitjançant modelització molecular de les interaccions proteïna-proteïna i proteïna-ligand, així com el desenvolupament de noves eines computacionals (docking flexible).

L6. Nanoestructures, superfícies, interfases i catàlisi

La recerca sobre nanoestructures, superfícies, interfases i catàlisis, inclou l'estudi, principalment a nivell DFT, de nanoclústers inorgànics i la seva reactivitat, així com l'estudi de l'adsorció, reacció i propietats catalítiques de superfícies metàl·liques. En aquest punt, també es considera l'estudi químic-quàntic de propietats magnètiques de metalls de transició connectats mitjançant nanotubs funcionalitzats combinat amb l'estudi experimental dels sistemes més prometedors, i estudis d'estructura electrònica d'interfases gas-superfície sòlida adreçats a l'estudi de la dinàmica clàssica dels processos implicats.

L7. Propietats elèctriques i magnètiques de molècules, clústers i sòlids

La recerca sobre propietats elèctriques i magnètiques de molècules, clústers i sòlids, inclou, d'una banda, l'estudi químic-quàntic de propietats elèctriques de materials fortament correlacionats, principalment òxids i de sòlids inorgànics. D'altra banda, pel que fa a les propietats magnètiques, s'estudien els mecanismes d'interacció magnètica en materials moleculars magnètics, l'anàlisi dels paràmetres magnètics en materials fortament correlacionats del tipus abans esmentat, i les propietats de compostos polinuclears i sòlids de metalls de transició.

III.2. Activitats en cada línia de recerca

A continuació es descriu l'activitat realitzada pels 14 grups de recerca que constitueixen l'IQCTUB dins cadascuna de les línies de recerca descrites al punt III.1.

L1. MÈTODES TEÒRICS I ALGORISMES

Estructura Electrònica (EE)

Eliseo Ruiz Sabín (UB).

A. Activitat dins la línia de recerca

La nostra recerca en aquesta àrea es centra en el desenvolupament tant del formalisme com dels algorismes necessaris per al càlcul de mesures contínues de simetria (CSM), que permetin quantificar el contingut de simetria ja sigui d'una estructura molecular definida per la posició dels nuclis atòmics com de la seva densitat electrònica.

B. Pla de treball

Durant aquest període, s'ha treballat principalment en el desenvolupament del càlcul analític de les mesures contínues de simetria i en la seva aplicació a gran varietat de compostos inorgànics. S'han definit les mesures d'operació, que indiquen per a cada operació de simetria que forma part d'un grup en quin grau són realment operacions de simetria per a una estructura donada. A partir de les operacions de simetria, ha estat possible definir les mesures contínues de simetria per a grups puntuals. Tant les mesures d'operació com de grup s'han utilitzat com a eines rutinàries en l'estudi de compostos inorgànics.

C. Objectius assolits

L'aplicació de les eines desenvolupades ha permès l'estudi de diferent tant en compostos de coordinació de metalls de transició com en clústers inorgànics. Com a resultat s'han publicat un nombre considerable de treballs en revistes d'impacte internacional (veure més endavant), mostrant la utilitat i el potencial d'aquestes mesures en estudis estructurals.

Grup d'Estructura de Materials Moleculars (GEM2)

Juan José Novoa Vide, Química Física (UB).

A. Activitat dins la línia de recerca

Dins el marc de la línia de mètodes teòrics i algorismes el grup està desenvolupant un programa per a la predicció i optimització de cristalls moleculars. La predicció de cristalls moleculars es basa en crear un seguit d'estructures inicials a partir de les operacions de simetria del grup espacial sobre el que es fa la predicció basant-se en les energies obtingudes segons els potencials atòmics UNI. Aquestes estructures pateixen un procés de refinament optimitzant-les i comparant-les per a descartar les que es consideren iguals entre elles segons uns valors llindars. El programa d'optimització final, per altra banda, es basa en un algorisme Steepest descent segons uns potencials de tercera generació, els coneguts com a e-pixels, els quals es basen en concentrar la densitat electrònica, ab initio prèviament obtinguda, en un volum donat.

B. Pla de treball

En el desenvolupament de l'algorisme del programa PIXCRYPAR s'han emprat els llenguatges de programació FORTRAN77 i FORTRAN90 i les subrutines de paral·lelització MPI.

C. Objectius assolits

El codi de predicció de polimorfs PIXCRYPAR ha estat àmpliament modificat i millorada la seva convergència i eficiència. El codi ha estat refinat millorant la comunicació entre subrutines, sent paral·lelitzat i augmentant la precisió en el càlcul dels gradients.

Dinàmica de Reaccions Atmosfèriques i Sistemes Complexos (DRASC)

Miguel González Pérez, Química Física (UB).

A. Activitat dins la línia de recerca

Implementació de mètodes de dinàmica quàntica eficients (paquets d'ona reals) per descriure reaccions poliatòmiques. Fins ara hem centrat els esforços en reaccions a quatre àtoms, que és un salt de dificultat molt gran partint de reaccions triatòmiques. També s'estan desenvolupant estratègies per intentar solucionar a nivell pràctic el greu problema de la violació de la energia de punt zero que es produeix en el cas d'estudis de dinàmica clàssica (mètode QCT) de la reactivitat química per sistemes de més de tres àtoms, fent èmfasi en les reaccions amb superfícies d'energia potencial que presenten mínims profunds entre reactius i productes.

B. Pla de treball

Durant l'any 2008 s'han completat la verificació de la correcta adaptació que hem realitzat del mètode de propagació de paquets d'ona reals a l'estudi de la dinàmica de reaccions tetraatòmiques del tipus $ABC + D \rightarrow AB + CD$, en el context del mètode CS (*Centrifugal Sudden*). També s'ha comprovat el correcte funcionament del programa informàtic

corresponent. D'altra banda, durant l'any 2009 s'han analitzant diverses reaccions tetratòmiques amb la idea de proposar estratègies orientades a solucionar a nivell pràctic el greu problema de la violació de la ZPE, tot això principalment en el cas de la dinàmica clàssica de sistemes tetratòmics amb presència de mínims profunds a la superfície d'energia potencial. Aquest estudi es troba en fase de finalització.

C. Objectius assolits

Adaptació del mètode de propagació de paquets d'ona reals a l'estudi de la dinàmica de reaccions tetratòmiques del tipus $ABC + D \rightarrow AB + CD$, en el context del mètode CS i desenvolupament del programa informàtic corresponent, que ja es troba a disposició de la comunitat científica. També s'estan desenvolupant estratègies per intentar solucionar a nivell pràctic el greu problema de la violació de la ZPE en els estudis de dinàmica clàssica de sistemes tetratòmics amb presència de mínims profunds a la superfície de potencial (estudi en fase final de realització).

Electronic Structure and Symmetry (ESS)

Pere Alemany i Cahner, Química Física (UB).

A. Activitat dins la línia de recerca

Mesures Continues de Simetria. La recerca del nostre grup en aquest àmbit es centra en el desenvolupament tant del formalisme com dels algorismes necessaris per al càlcul de mesures contínues de simetria (CSM), que permetin quantificar el contingut de simetria ja sigui d'una estructura molecular definida per la posició dels nuclis atòmics com de la seva densitat electrònica.

Desenvolupament de nous mètodes per a l'estudi de l'estructura electrònica d'estats excitats. En aquesta línia es treballa en la formulació i el desenvolupament de nous mètodes i algorismes de baix cost computacional per al càlcul d'excitacions electròniques dobles, caracterització d'estats excitats foscos (dark states), obtenció d'estats amb caràcter bi- o multiradical i l'anàlisi de creuaments evitats i d'interseccions còniques.

Esterodinàmica d'Engranatges Moleculars. El treball del nostre grup en aquest àmbit està dirigit al desenvolupament de models basats en la dinàmica molecular restringida als graus de moviment rellevants per al funcionament d'engranatges moleculars, per poder estudiar d'aquesta manera la influència que tenen diversos paràmetres, com ara la rigidesa estructural o les interaccions amb molècules de dissolvent, en l'eficiència de la transmissió del moviment al llarg de l'engranatge.

B. Pla de treball

Mesures Continues de Simetria. Durant aquest període, s'ha treballat principalment en el desenvolupament del càlcul analític de les mesures contínues de simetria. Per a això, s'han definit les mesures d'operació, que indiquen per a cada operació de simetria que forma part d'un grup en quin grau són realment operacions de simetria per a una estructura donada. A partir de les operacions de simetria, ha estat possible definir les mesures contínues de simetria per a grups puntuals.

Desenvolupament de nous mètodes per a l'estudi de l'estructura electrònica d'estats excitats. S'ha treballat en el desenvolupament i programació de d'un nou mètode per

l'estudi de l'estructura electrònica, el *Restricted Active Space Spin-Flip* (RAS-SF). La implementació computacional dels algorismes desenvolupats s'ha realitzat dins el marc del programa de química quàntica Q-Chem, del qual en David Casanova n'és desenvolupador. *Estereodinàmica d'Engranatges Moleculars*. En aquest àmbit s'ha treballat majoritàriament en l'aclariment del comportament estereodinàmic dels anomenats "torniquets" de Kelly. El treball s'ha centrat en l'estudi de la superfície d'energia potencial per al moviment de torniquet, que implica la rotació del fragment triptílic sense que tingui lloc l'enantiomerització del fragment helicè.

C. Objectius assolits

Mesures Continues de Simetria. Els objectius assolits a nivell analític són la definició de les mesures d'operació i la seva utilització en una formulació alternativa de les mesures contínues de simetria, per a la qual s'ha demostrat que condueix a resultats equivalents als que s'obtenen en formulacions numèriques proposades anteriorment per al càlcul de les mesures contínues de simetria. S'ha escrit un programa utilitzant els algorismes desenvolupats, per tal de calcular les mesures per a qualsevol operació de simetria puntual i les mesures de simetria per als grups puntuals amb estructures més simples.

Desenvolupament de nous mètodes per a l'estudi de l'estructura electrònica d'estats excitats. El treball realitzat en aquesta àrea ha cristal·litzat en la publicació d'un article a la revista científica "Physical Chemistry Chemical Physics" (*Phys. Chem. Chem. Phys.*, 11, (2009) 9779), en què es presenta una nova formulació dels mètodes de spin-flip (SF) per l'estudi de l'estructura electrònica molecular tant pel que fa a l'estat fonamental com als estats excitats. En aquest estudi es mostren els aspectes més rellevants del mètode i la seva implementació a nivell computacional. També es remarquen les seves propietats, exemplificades en nombrosos i variats exemples de la seva aplicació.

Estereodinàmica d'Engranatges Moleculars. Per als compostos anomenats "torniquets" de Kelly s'ha trobat una superfície de potencial complexa que implica que qualsevol model simplificat de la seva estereodinàmica hagi de ser descrit emprant una superfície de potencial de com a mínim dues variables: la rotació del fragment triptílic i l'enantiomerització del fragment helicè. L'acoblament d'aquests dos tipus de moviment és a l'origen de l'inesperat comportament estereodinàmic en aquests compostos.

Estructura i Dinàmica de Sistemes Moleculars Complexes

Josep Maria Bofill Villà, Química Orgànica (UB).

A. Pla de treball i objectius assolits

L'activitat del Grup de Recerca "Estructura i Dinàmica de Sistemes Moleculars Complexes" abasta amplis camps de la Química Teòrica i Computacional, tot i que l'èmfasi principal és en la vessant metodològica (L1. Mètodes Teòrics i Algorismes). L'activitat més representativa duta a terme durant els últims dos anys, es pot classificar en cinc subprojectes, que són: Estructura Electrònica, el concepte de Camí de Reacció i la seva connexió amb la Dinàmica Clàssica, models pel càlcul de Constants de Velocitat de Reaccions Químiques, el model Mecano-Quàntic basat en els paquets d'ona i la mecànica de Madelung - de Broglie - Bohm.

B. Pla de treball

Durant aquest període s'ha portat a terme en estructura electrònica la implementació, en diferents paquets de programes, d'algorismes multirreferencials basats en la construcció de la funció d'ona a partir d'àlgebres de Lie. Pel que respecte als camins de reacció, es va desenvolupar la metodologia en la que es demostra que es pot expressar qualsevol corba en funció de l'energia potencial. També es va proposar investigar nous algorismes d'integració. En el subprojecte de dinàmica, es pretenia analitzar certs efectes quàntics mitjançant la mecànica de Madelung - de Broglie - Bohm, així com també les possibles relacions amb la dinàmica clàssica i el model de camins de reacció i acabar de formular el Hamiltonià quàntic de camí de reacció per estudiar els efectes quàntics en les reaccions químiques.

C. Objectius assolits

L'ús de funcions d'ona multirreferencials va permetre estudiar compostos organometàl·lics de Ti(IV) i va posar de manifest que aquests compostos tenen un caràcter birradicalari de multiplicitat triplet. Els nous algorismes d'integració de camins de reacció s'han introduït en el paquet de programes GAMESS. Finalment, s'ha aconseguit programar i utilitzar el Hamiltonià quàntic de camí de reacció en reaccions on l'efecte túnel és molt important. Dins del mateix context del subprojecte dinàmica, s'ha demostrat que els diagrames de Caratheodory són útils per connectar de forma interpretativa la dinàmica quàntica amb la dinàmica clàssica i el model de camins de reacció.

Grup de Dinàmica de Reaccions Químiques

Antonio Aguilar Navarro, Química Física (UB).

A. Pla de treball i objectius assolits

Pel que fa a la recerca en el camp de la Dinàmica Molecular, el treball s'ha centrat fonamentalment en dos aspectes. El primer d'ells està relacionat amb el desenvolupament d'algorismes per descriure principalment interaccions febles, la qual cosa ha portat al desenvolupament d'una nova funció de potencial que és una funció de Lennard-Jones millorada (ILJ). Inicialment, es va aplicar a l'estudi dels clústers que els gasos nobles (Rg) formen amb hidrocarburs (alifàtics i aromàtics) i, més tard, a l'estudi de sistemes que contenen aigua, primer als clústers Rg-H₂O, on pràcticament tota la interacció és deguda a forces de dispersió més una petita contribució de la inducció, i després a clústers on tant la inducció com la component electrostàtica juguen un paper important, com són els petits clústers d'aigua, (H₂O)_n i els que les molècules d'aigua formen amb els ions alcalins, M⁺-H₂O (M=Li, Na, K, Rb, Cs). El model ILJ s'adapta mol bé amb diferents entorns electrostàtics i la seva idoneïtat per descriure diferents sistemes es va comprovar duent a terme un estudi *ab initio* dels clústers que els ions halogenur formen amb el benzè. L'estudi ha prosseguit considerant sistemes més complexos, com són el de l'aigua líquida i els dels clústers de benzè que contenen un anió i un catió. Tots els sistemes, primer analitzats des d'un punt de vista estructural, s'han investigat mitjançant mètodes de la dinàmica molecular. També dintre de la línia L1 s'emmarca la recerca de dinàmica de reaccions químiques per mètodes de dinàmica quàntica utilitzant l'algorisme de la hiperquantització en coordenades hiperesfèriques, que permet estudiar de manera exacta reaccions elementals a tres àtoms.

Amb aquest nou algorisme, implementat en els darrers anys pel grup amb estreta col·laboració amb el grup de Perugia, s'han estudiat reaccions elementals prototípiques dintre de la química, de les quals en alguns casos, es disposa d'informació suficient per confrontar els resultats calculats amb les dades experimentals. Aquesta comparació no tan sols permet entendre els efectes sobre la reactivitat a nivell molecular explicant els resultats experimentals sinó que a més permet contrastar la validesa de les interaccions entre els reactius participants reflectides en la superfície d'energia potencial emprada per l'estudi de la dinàmica. Amb aquesta metodologia s'han estudiat recentment efectes derivats dels isòtops H i D en les molècules d'hidrogen. Dintre de la línia L1 cal incloure també el desenvolupament i la implementació de la metodologia anomenada hemiquàntica, en la qual alguns graus de llibertat del sistema reaccionant són tractats per mètodes de dinàmica clàssica mentre que la resta són descrits quànticament. De manera molt concreta s'ha considerat l'estudi de processos de col·lisió no adiabàtics tenint en compte els corresponents acoblaments no adiabàtics entre els diversos estats electrònics dels sistemes considerats i calculats a nivell *ab initio*. Amb aquest procediment s'han realitzat estudis dinàmics de processos de transferència de càrrega amb excitació i de processos d'excitació atòmica directa de sistemes ió alcalí – àtom de magnesi, processos que experimentalment, han estat també estudiats en el propi grup de recerca emprant la tècnica de feixos moleculars creuats.

Dinàmica de Reaccions en Sistemes Poliatòmics (RDPOLSYS)

Fermín Huarte Larrañaga, Química Física (UB).

A. Activitat dins la línia de recerca

Una part important de la recerca del grup consisteix en el desenvolupament d'eines orientades cap a l'estudi mecano-quàntic de la dinàmica de reaccions. Avui en dia existeix un conjunt de codis computacionals que permeten dur a terme aquest tipus d'estudi per a la majoria de reaccions. Aquests es poden classificar de manera general segons el marc en el que resolen l'equació de Schrödinger nuclear: mètodes dependents i independents del temps. En el grup de recerca disposem d'aquest tipus d'eines, algunes desenvolupades per nosaltres mateixos. Tanmateix, algunes particularitats dels estudis de dinàmica de reaccions (como ara la dificultat en l'elecció d'un sistema de coordenades) fa que aquests mètodes siguin difícilment utilitzables com una "caixa negra" i calgui fent contribucions metodològiques per tal d'estudiar nous tipus de reaccions. En els darrers dos anys hem dedicat part important dels nostres esforços al desenvolupament d'un mètode que permeti el càlcul mecano-quàntic aproximat de probabilitats de reacció en reaccions d'inserció.

B. Pla de treball

Hem dedicat part important dels nostres esforços al desenvolupament d'un mètode que permeti el càlcul mecano-quàntic aproximat de probabilitats de reacció en reaccions d'inserció. Aquest tipus de reaccions presenten una complexitat molt més elevada, pel que fa a l'estudi computacional de la seva dinàmica, respecte les reaccions d'abstracció. Generalment aquesta complexitat deriva de l'existència del complex d'inserció que complica enormement el tractament mecano-quàntic acurat. Tasques que s'han realitzat en el bienni 2008-2009:

- a. Implementació numèrica d'un codi per al càlcul de probabilitats de reacció estat a estat en base al model estadístic de captura.
- b. Desenvolupament d'un mètode combinat captura-mctdh. Implementació per a $J=0$.
- c. Extensió del model desenvolupat per valors de moment angular total diferent de zero (en curs).

C. Objectius assolits

Desenvolupament d'un codi computacional per al càlcul mecano-quàntic (aproximat) de probabilitats de reacció estat a estat en reaccions d'inserció mitjançant la combinació d'un model estadístic de captura i l'esquema MCTDH per a la funció d'ona nuclear. El model desenvolupat té per el moment la limitació de no poder considerar valors del moment angular total més grans que un.

Biofísicoquímica de Macromolècules i Col·loides

Francesc Mas Pujadas, Química Física (UB).

A. Activitat dins la línia de recerca

Desenvolupament de models fisicoquímics per a l'estudi de la complexació macromolecular. Desenvolupament de mètodes mecano-estadístics i de simulació Monte Carlo i de Dinàmica Molecular per a l'estudi de l'efecte polielectrolític en la complexació macromolecular; Desenvolupament de metodologies basades en models de simulació, Monte Carlo i per dinàmica browniana, que tinguin en compte els processos de difusió restringida, com els que ocorren en l'interior de les cèl·lules (crowding macromolecular).

B. Pla de treball

Desenvolupament d'un programa de simulació Monte Carlo, dintre del formalisme semi gran canònic, que tingui en compte, tant el binding específic (formalisme canònic) com l'efecte de l'electròlit inert (formalisme canònic). per a estudiar l'efecte de les correlacions iòniques, i comparació posterior dels resultats amb teories de camp mig. Desenvolupament d'algorismes per a l'estudi de la difusió en medis restringits, tant 2D com 3D, per a estudiar la dependència temporal del coeficient de difusió anòmal amb els paràmetres rellevants del sistema (grandària de les molècules, concentració d'obstacles, etc.).

C. Objectius assolits

Seguint amb el tractament de la complexació mitjançant les espècies formals, s'ha generalitzat el formalisme de la funció d'equilibri promig (K_c), amb una descripció jeràrquica, des del nivell més microscòpic fins a nivells d'agregació supramolecular. Això permet descompondre aquesta funció en termes de la funció d'equilibri promig per a cada subsistema, amb la interpretació que a cada moment és l'afinitat mitja dels llocs lliures que

queden en cada subsistema, el que permet una millor caracterització de la complexació en sistemes molt estructurats, com per exemple els enzimàtics

S'ha desenvolupat un procediment per obtenir un valor aproximat de les constants estequiomètriques per a un sistema de complexació amb un gran nombre de llocs d'unió. Aquest mètode s'ha generalitzat pel cas de complexació competitiva amb dos ions. Mitjançant la suposició d'un model de complexació (monodentat o bidentat) es pot descompondre la constant estequiomètrica en una part entròpica i altra intrínseca, i mitjançant models de camp mig per a l'efecte polielectrolític, es pot finalment obtenir l'afinitat intrínseca lliure de contribució electrostàtica. Aquest procediment s'ha aplicat a l'estudi dels sistemes $\text{Ca}^{2+}/\text{H}^+/\text{PAA}$ i $\text{Cd}^{2+}/\text{H}^+/\text{PAA}$, obtenint-ne tant les constants de complexació estequiomètriques com les microscòpiques, comprovant-se el caràcter no heterogeni de l'enllaç específic per a aquest cas de polielectròlit homofuncional.

S'ha comprovat el caràcter fractal (cinètica no clàssica) d'un mecanisme típic de cinètica enzimàtica: el mecanisme de Michaelis-Menten. Aquests estudis s'han desenvolupat tant en 2 dimensions (per exemple, models de difusió en membranes cel·lulars), com en 3 dimensions (models de difusió en l'interior cel·lular). També s'han tingut en compte la diferència de grandàries del substrat i producte de la reacció amb el dels enzims i obstacles del medi, així com la diferència de mobilitat entre ells. Els resultats indiquen que en aquestes condicions les lleis cinètiques clàssiques no són aplicables. S'ha comprovat que el coeficient de difusió ara ja no és una constant, sinó que segueix una llei temporal associat al crowding macromolecular del medi.

Self-Organized Complexity & Self-assembling Materials (SOC&SAM)

Ramon Reigada Sanz, Química Física (UB).

A. Activitat dins la línia de recerca

En el nostre grup treballem amb diferents mètodes de modelització que comprenen des de l'utilització de Dinàmica Molecular, passant per models discrets tipus Monte Carlo fins a esquemes de simulació mesoscòpics basats en descripcions contínues de l'energia lliure del sistema. Pel que fa als treballs amb Dinàmica Molecular utilitzem el paquet de simulació GROMACS, si bé hem aportat contribucions a la millora de determinats force fields per simular lípids en membranes. Pel que fa a les simulacions Monte Carlo i les mesoscòpiques, som nosaltres els que desenvolupem en la seva totalitat els models i la seva programació per la seva resolució numèrica.

B. Pla de treball

- a. Estudi de l'efecte de la posició del doble enllaç en fosfolípids insaturats formant membranes. Rol del colesterol en aquest efecte.
- b. Estudi de l'efecte d'asimetria en la insaturació de les cadenes de fosfolípids formant membranes. Rol del colesterol en aquest efecte.
- c. Millora del *force field* de GROMACS per la descripció del doble enllaç entre carbonis. Aplicació a membranes amb DOPC.
- d. Efecte organitzatiu a nivell nanoscòpic del colesterol en bicapes de DOPC i DSPC

C. Objectius assolits

S'ha comprovat com la posició del doble enllaç en fosfolípids formant membranes és molt important a l'hora de determinar les seves propietats. Concretament, si el doble enllaç està situat al centre de les cadenes alifàtiques dels fosfolípids, les membranes resultants són les més fluides i desordenades. Aquest efecte es veu extremadament més accentuat si el colesterol és present a les membranes. Aquests resultats suposen una possible explicació a la preferència de lípids insaturats al mig de la cadena en membranes cel·lulars.

S'han evidenciat lleugeres diferències estructurals i dinàmiques en membranes formades per lípids amb la cadena sn1 insaturada respecte als que tenen només la cadena sn2 insaturada. Aquestes efectes han estat quantificats i s'ha comprovat com la diferència augmenta per l'efecte de la presència del colesterol.

S'ha realitzat una millora en la parametrització del doble enllaç del force field de Gromacs que pot ser d'utilitat de cara a simular lípids insaturats en membranes.

S'ha caracteritzat les propietats del colesterol a l'hora d'organitzar posicionalment i orientacionalment els lípids d'una membrana. Com a resultat rellevant s'ha trobat una ordenació amb simetria triangular al voltant de les molècules de colesterol que està relacionada amb l'estructura particular del colesterol i que li confereix una propietat d'empaquetament lateral excepcionals.

L2. DINÀMICA I CINÈTICA DE REACCIONS, ESTATS EXCITATS I ESPECTROSCÒPIA

Simulació Computacional de Dinàmica de Reaccions en Superfície

Ramon Sayós Ortega, Química Física (UB).

A. Activitat dins la línia de recerca

Estudis de la dinàmica de processos d'adsorció atòmica, de adsorció molecular dissociativa o de reaccions de recombinació atòmica heterogènia tipus Eley-Rideal mitjançant el mètode de trajectòries quasi clàssiques, emprant SEPs analítiques o interpolades basades en les dades DFT.

B. Pla de treball

Hem realitzat estudis dinàmics amb trajectòries quasi clàssiques dels processos: $O + \beta$ -cristobalita, $O_2 + \beta$ -cristobalita i $O + O$ - β -cristobalita (reacció Eley-Rideal) usant dues PESs construïdes en base a les nostres dades DFT, emprant el mètode d'Interpolació *Corrugation Reducing Procedure (CRP)*. Els càlculs han estat fets amb el programa QCTSURF desenvolupat en el nostre grup. Hem considerat condicions tèrmiques o estat específiques dels reactius per poder comparar amb les dades experimentals publicades.

També hem treballat en el desenvolupament del mètode d'interpolació de Shepard per construir les SEPs dels sistemes O /grafit i O_2 /grafit, emprant coordenades cartesianes.

C. Objectius assolits

L'ús del mètode d'interpolació CRP ha mostrat que calia desenvolupar altres mètodes més flexibles i generals per a la construcció de SEPs interpolades en sistemes gas-superfície sòlida. Per això s'ha iniciat el desenvolupament del mètode de Shepard.

Els càlculs de trajectòries quasi clàssiques ha demostrat que es possible obtenir, des de primers principis, dades d'interès en les simulacions CFD que es fan en la indústria aeroespacial, per exemple, el coeficient de recombinació atòmica ($\gamma(T)$) d'oxigen sobre sílice o altres materials.

Dinàmica de Reaccions Atmosfèriques i Sistemes Complexos (DRASC)

Miguel González Pérez, Química Física (UB).

A. Activitat dins la línia de recerca

Dinàmica i cinètica de reaccions químiques en fase gasosa utilitzant mètodes dinàmics clàssics i quàntics sobre superfícies de potencial basades en càlculs *ab initio* d'elevat nivell, considerant reaccions atmosfèriques, de combustió, ió-molècula i sistemes *benchmark*. Entre les reaccions d'interès en combustió podem destacar, p. ex., les reaccions $OH + H_2$ i $CH + H_2$, així com les seves inverses. Pel que fa a les reaccions ió-molècula i relacionades, tenim, p. ex., les reaccions $Ne + H_2^+$, $O + H_2^+$, $O^+ + H_2$, així com les reaccions $OH^+ + H_2$ i

$\text{NH}^+ + \text{H}_2$, i les seves reaccions inverses (on hi participa el ió molecular H_3^+), essent aquests darrers sistemes molt rellevants en Astroquímica. També ens interessen des de fa temps les reaccions atmosfèriques, entre les quals podem destacar les reaccions $\text{N} + \text{O}_2$ i $\text{N} + \text{NO}$, així com reaccions amb presència d'espècies atòmiques excitades [$\text{O}(^1\text{D})$ i $\text{N}(^2\text{D})$ principalment]. Bona part dels sistemes reactius indicats amb una elevada proporció d'àtoms d'hidrogen, a més a més del seu interès específic, es poden considerar com a sistemes *benchmark*, doncs possibiliten una interacció molt forta entre teoria i experiment.

B. Pla de treball

Durant els anys 2008 i 2009 s'ha dut a terme l'estudi de la dinàmica i cinètica de varies reaccions químiques en fase gasosa d'interès en química atmosfèrica, processos de combustió i sistemes ió-molècula, utilitzant mètodes dinàmics clàssics i quàntics sobre superfícies de potencial d'elevat nivell.

C. Objectius assolits

L'estudi quasi clàssic de la dinàmica de la reacció $\text{OH} + \text{D}_2 \rightarrow \text{HOD} + \text{D}$ ha posat de manifest de manera clara (i en certa forma bastant sorprenent) les grans dificultats amb les quals es pot trobar el mètode QCT, fins i tot a l'hora de descriure la distribució d'energia translacional de productes d'una reacció poliatòmica "senzilla". En la base del problema s'hi troba la importància dels efectes quàntics en aquest sistema. A nivell QCT també s'ha completat l'estudi de la reacció atmosfèrica $\text{N} + \text{NO} \rightarrow \text{N}_2 + \text{O}$. La investigació sobre l'efecte de la excitació vibracional en la reactivitat química s'ha dut a terme clàssica i quànticament sobre les reaccions $\text{K} + \text{HF}(v=0-2, j=0) \rightarrow \text{KF} + \text{H}$, $\text{Ne} + \text{H}_2^+(v=0-4) \rightarrow \text{NeH}^+ + \text{H}$ i $\text{Ne} + \text{H}_2^+(v=0-9)$ and $\text{D}_2^+(v=0-12)$, amb resultats particularment notables en el cas de les reaccions de transferència de protó. A nivell quàntic exacte s'han estudiat les reaccions $\text{C}(^1\text{D}) + \text{HD}, \text{D}_2$. També d'interès són els primers estudis dinàmics quàntics exactes duts a terme sobre l'efecte Renner-Teller que es produeix en les reaccions $\text{N}(^2\text{D}) + \text{H}_2$ i $\text{N}(^2\text{D}) + \text{HD}$, on a diferència de les reaccions anteriors són necessàries dos SEP (acoblades pel moviment nuclear) per descriure els sistemes. Altres estudis clàssics i quàntics es troben en fase final de realització (p. ex., $\text{O} + \text{H}_2^+ \rightarrow \text{OH}^+ + \text{H}$, $\text{OH} + \text{H}^+$ i $\text{CH} + \text{H}_2 \rightarrow \text{CH}_2 + \text{H}$).

Química Teòrica i Computacional

Albert Solé Sabaté, Química Física (UB).

A. Activitat dins la línia de recerca

L'objectiu principal d'aquesta línia d'investigació és l'estudi computacional de l'estructura electrònica dels estats electrònics fonamental i/o excitats de menor energia de diverses molècules orgàniques per a poder predir la seva reactivitat i elucidar els mecanismes de les reaccions adiabàtiques i no adiabàtiques que poden tenir lloc en les superfícies d'energia potencial associades a aquests estats. La majoria de les reaccions investigades són de gran interès en el camp de la Química Atmosfèrica.

B. Pla de treball

Emprant mètodes mecanco-quàntics d'alt nivell de teoria (CASSCF, CASPT2, QCISD(T) i CCSD(T)), primer es du a terme per a cada reacció l'exploració de les superfícies d'energia potencial dels estats electrònics fonamental i/o excitats de menor energia per localitzar els punts estacionaris (estructures d'equilibri i estructures de transició) per a poder determinar els camins de reacció de mínima energia que connecten els reactius amb els productes de la reacció. En segon lloc, emprant la teoria convencional de l'Estat de Transició, s'avaluen les constants de velocitat de les reaccions adiabàtiques més rellevants.

C. Objectius assolits

a. S'ha aconseguit demostrar, primer computacionalment i després experimentalment, que la transposició fotoquímica dels cicloadductes de Pauson-Khand del norbornadiè a triciclo[5.2.1.0]deca-3,8-dien-10-ones, una nova fotoreacció d'enones (*Angew. Chem., Int. Ed.*, **2007**, 46, 5943), té lloc a través de l'estat excitat $^3(\pi\pi^*)$ de l'enona (*J. Am. Chem. Soc.*, **2008**, 130, 16898).

b. S'han esbrinat els camins de reacció involucrats en l'oxidació de l'acroleïna pel radical HO \cdot en condicions troposfèriques. En bon acord amb resultats experimentals, s'ha trobat que el 74,5% de la reacció té lloc a través de l'abstracció de l'àtom d'hidrogen aldehídic, el 24,2% per addició a l'àtom de carboni terminal del doble enllaç C=C i el 1,3% per addició a l'àtom de carboni central del doble enllaç. (*J. Chem. Theory Comput.*, **2008**, 4, 941).

c. S'han esbrinat els camins de reacció que intervenen competitivament en l'oxidació del radical hidroxiciclohexadienil per l'oxigen molecular, una reacció que és fonamental en les primeres etapes del procés de degradació del benzè en condicions troposfèriques. Els resultats obtinguts han permès determinar les constants de velocitat relatives de la formació dels isòmers cis i trans del radical peroxil produït en l'addició de l'oxigen molecular a la posició 2 de l'anell de benzè del radical hidroxiciclohexadienil. (*J. Chem. Theory Comput.*, **2009**, 5, 1607).

Electronic Structure and Symmetry (ESS)

Pere Alemany i Cahner, Química Física (UB).

A. Activitat dins la línia de recerca

En aquesta línia es treballa en la caracterització de la naturalesa i les propietats dels estats excitats de molècules potencialment eficaces en la fotosensibilització de les cel·les solars de Grätzel, així com en l'estudi de processos fotoquímics amb presència d'interseccions còniques a partir de mètodes spin-flip.

B. Pla de treball

S'ha iniciat un estudi a nivell teòric i computacional d'una família concreta de cromòfors orgànics candidats per a ser emprats com a sensibilitzadors en cel·les solars. Aquest treball s'està duent a terme en col·laboració amb el grup del Prof. Grätzel (Ecole Polytechnique de Lausanne) el qual té una llarga experiència en l'estudi d'aquest tipus de sistemes tant a nivell experimental (principalment) com computacional.

C. Objectius assolits

Els estudis realitzats estan permetent entendre millor el procés d'absorció de les molècules estudiades, així com les característiques necessàries perquè aquestes presentin les condicions necessàries per actuar com a fotosensibilitzadors de cel·les solars.

Grup de Dinàmica de Reaccions Químiques

Antonio Aguilar Navarro, Química Física (UB).

A. Activitat dins la línia de recerca

Una activitat important de recerca del grup que comporta també una dificultat afegida en el seu desenvolupament, és la realitzada en l'àmbit experimental de la dinàmica de reaccions, en particular en quant al desenvolupament de l'equipament experimental i les seves millores posteriors, recerca que cal incloure també dintre de la línia L2.

B. Pla de treball i objectius assolits.

En aquesta recerca s'ha procedit a la instal·lació en el laboratori del grup d'un equipament experimental, de disseny propi, destinat a l'estudi de reaccions ió-molècula, tot detectant els productes iònics per espectrometria de massa. Cal assenyalar que tant el muntatge del sistema de guia de ions per radiofreqüència (RF-GIB) com de l'espectròmetre de massa quadrupolar, així com també el seu control informatitzat, ha estat completament realitzat pels membres del grup, tot tenint present les exigències pròpies dels experiments a realitzar. En la configuració actualment disponible de l'equip experimental, es poden estudiar les reaccions entre ions alcalins i diferents molècules en fase gas, que poden donar lloc a diversos tipus de reaccions (deshidratació, deshidrohalogenació, transferència de càrrega, formació d'adductes ió-molècula,...).

Dinàmica de Reaccions en Sistemes Poliatòmics (RDPOLSYS)

Fermín Huarte Larrañaga, Química Física (UB).

A. Activitat dins la línia de recerca

Els estudis moleculars de les reaccions ens proporcionen un coneixement més profund d'aquests processos i la possibilitat de controlar-ne la reactivitat, per exemple, disposant l'energia de la manera més efectiva, per exemple mitjançant l'ús de làsers. Avui en dia resulta possible simular de manera acurada, tot partint de primers principis, la reactivitat de sistemes triatòmics i alguns sistemes tetraatòmics. Tanmateix, la majoria de processos químics d'interès més enllà de l'acadèmic estan encara lluny de l'abast de la majoria de mètodes. Actualment, una de les línies de treball del nostre grup de recerca és l'aplicació de mètodes mecano-quàntics el més acurats possibles a l'estudi de reaccions poliatòmiques.

B. Pla de treball

Al llarg de l'any 2008 i 2009 hem dut a terme estudis extensiu per al càlcul mecano-quàntic de la constant de reacció $N + N_2$. Aquesta és una reacció que té la seva importància en la

modelització aeroespacial i la física de plasmes. Actualment s'està estudiant la mateixa reacció sobre una superfície de potencial millorada. Un altre sistema que s'ha estudiat i encara s'estudia al grup es el procés de adsorció dissociativa: $\text{CH}_4 + \text{Ni}(111) \rightarrow \text{CH}_3(\text{ad}) + \text{H}(\text{ad})$. S'ha partit d'un model tridimensional aproximat sobre el que s'ha realitzat un estudi detallat de la dinàmica del sistema.

En els darrers anys el grup de recerca ha endegat una línia d'investigació sobre la dinàmica de gasos en sistemes nanoestructurats. Seguint els anteriors treballs d'estudi de la fisissorció de H_2 i O_2/N_2 en nanotubs de Carboni, hem realitzat un estudi de la adsorció de metà en aquest tipus de materials, emprant mètodes de la dinàmica molecular.

C. Objectius assolits

- a. Càlcul mecano-quàntic exacte de la constant de velocitat per a la reacció $\text{N} + \text{N}_2$, emprant la superfície d'energia potencial LAG3. Aquesta SEP presenta la millora, respecte les seves antecessores, d'una geometria angular de l'estat de transició.
- b. Comparació sistemàtica de la fiabilitat y eficiència de mètodes semi-clàssics per al càlcul de constants cinètiques de reaccions simètriques. Aquesta comparació s'ha dut a terme en els sistemes $\text{H} + \text{H}_2$ i $\text{N} + \text{N}_2$. Aquesta part de la recerca es duu a terme en col·laboració amb la Dra. Noelia Faginas de la Universitat di Perugia (Itàlia).
- c. En col·laboració amb la Dra. Albertí de la Universitat de Barcelona i del mateix IQTCUB s'ha estudiat la adaptabilitat dels potencials improved Lennard Jones per a representar diferents tipus d'interaccions intermoleculares i, en particular, el seu us en simulacions de dinàmica molecular de l'aigua.
- d. S'ha estudiat el procés d'adsorció dissociativa del metà sobre una superfície metàl·lica de Níquel. Tot i que el resultat obtingut ha estat satisfactori, els requisits computacionals emprats ens fan pensar que la metodologia emprada no és la idònia per aquest tipus de sistemes.
- e. S'ha estudiat la fisissorció de mescleres de nitrogen i oxigen sobre agregats de nanotubs de carboni d'una sola paret, emprant simulacions de dinàmica molecular.
- f. Aquests darrers estudis s'han estès a la fisissorció de metà sobre el mateix tipus de material.

L3. ESTRUCTURA MOLECULAR I QUÍMICA QUÀNTICA

Estructura Electrònica (EE)

Eliseo Ruiz Sabín (UB).

A. Activitat dins la línia de recerca

L'interès principal en aquesta àrea es centre en l'estudi estructural i electrònic de compostos inorgànics i bioinorgànics. El nostre interès també se centre en l'estudi de l'enllaç químic en compostos inorgànics, especialment en la química de coordinació, en l'estudi d'enllaços metall-metall i en la presència d'interaccions formalment no enllaçants.

B. Objectius assolits

El nostre treball en aquest camp ha resultat en diferents articles d'interès. A destacar el treball realitzat per la doctora R. Carrasco G. Aullón i S. Alvarez (*Chem. Eur. J.*, **15**, 536-546 (2009)), en què es realitza un estudi teòric i computacional de complexos trinuclears del tipus M_3X_2 .

Grup d'Estructura de Materials Moleculars (GEM2)

Juan José Novoa Vide, Química Física (UB).

A. Activitat dins la línia de recerca

Seguint la línia d'estructura electrònica molecular s'estudien diversos tipus d'interaccions intermoleculares, algunes d'elles comportant enllaços a llarga distància (i.e. enllaços amb les mateixes propietats d'un enllaç covalent però amb una energia inferior i a una distància força superior, encara que inferior a la distància de van der Waals). L'objectiu és caracteritzar la naturalesa d'aquests interaccions a partir de les eines que ofereix la química quàntica.

B. Pla de treball

Per a l'estudi d'interaccions intermoleculares, enllaços a llarga distància i estats excitats es realitzen càlculs *ab initio* amb diferents paquets de programes, com ara Gaussian, GAMESS o MOLCAS. També són usats programes d'anàlisi de la funció d'ona com el ProAIMs i les teories IMPT o SAPT d'anàlisi de les diferents contribucions de l'energia d'interacció.

C. Objectius assolits

En els càlculs d'interaccions intermoleculares s'ha caracteritzat la naturalesa d'enllaços a llarga distància entre dímers cations-radicals (tetratiàfulvalè i tertiofè) i anions-radicals (tetracianoquinodimetà, tetracianopirazidina, cianil i fenalenil), així com la naturalesa de les interaccions C-H \cdots F. També ha estat analitzat a fons que les interaccions intermoleculares són fonamentals en l'empaquetament cristal·lí de cristalls moleculars.

Dinàmica de Reaccions Atmosfèriques i Sistemes Complexos (DRASC)

Miguel González Pérez, Química Física (UB).

A. Activitat dins la línia de recerca

Càlcul *ab initio* de elevat nivell (MRCI principalment) de superfícies d'energia potencial (SEP) per l'estudi de la dinàmica i cinètica de reaccions químiques triatòmiques i tetratòmiques considerant principalment reaccions atmosfèriques i ió-molècula. En aquesta línia de recerca, que en el cas del nostre grup està fortament relacionada amb la línia L2, també s'inclou la obtenció de representacions analítiques de les SEP calculades, que siguin adients per la seva utilització en els estudis dinàmics i cinètics. Per això utilitzem sobretot funcions analítiques dependents de les distàncies internuclears basades en expansions en sèrie a molts cossos.

B. Pla de treball

Durant part de l'any 2008 i en el 2009 s'ha completat l'estudi *ab initio* MRCI de les superfícies d'energia potencial (SEP) de més baixa energia del sistema triatòmic H_2O^+ i s'ha obtingut la representació analítica (expansions en sèrie a molts cossos) de les dos SEP més importants, per la seva utilització en estudis dinàmics i cinètics. Així mateix, s'està realitzant el càlcul MRCI de les SEP de més baixa energia del sistema tetratòmic H_3O^+ .

C. Objectius assolits

Estudi *ab initio* MRCI de les superfícies d'energia potencial (SEP) de més baixa energia del sistema triatòmic H_2O^+ i representacions analítiques corresponents de les dos SEP més importants, per la seva utilització en estudis dinàmics i cinètics, que com ja s'ha indicat estan en curs de realització (reaccions $\text{O} + \text{H}_2^+ \rightarrow \text{OH}^+ + \text{H}$, $\text{OH} + \text{H}^+$). D'altra banda, el càlcul MRCI de les SEP de més baixa energia del sistema tetratòmic H_3O^+ (sistema de particular interès en Astroquímica) està bastant avançat i convé indicar que les SEP obtingudes pel sistema H_2O^+ també seran d'utilitat pel sistema H_3O^+ a l'hora d'obtenir una representació analítica per les seves SEP.

Electronic Structure and Symmetry (ESS)

Pere Alemany i Cahner, Química Física (UB).

A. Activitat dins la línia de recerca

En aquesta línia es treballa en l'aplicació de les mesures contínues de simetria per tal d'establir relacions entre les característiques estructurals de compostos, tant orgànics com inorgànics, amb les propietats fisicoquímiques que exhibeixen.

B. Pla de treball

El treball en aquesta línia s'ha centrat en l'aplicació de les mesures contínues de simetria per a la caracterització d'estructures complexes en què hi apareixen simultàniament fragments amb simetries aparentment incompatibles.

C. Objectius assolits

S'han estudiat les relacions de simetria en estructures cristal·lines amb empaquetaments cúbics de fragments icosaèdrics, descobrint, mitjançant l'aplicació de les mesures contínues de simetria, que, malgrat que els eixos d'ordre cinc dels fragments icosaèdrics són incompatibles amb la simetria del grup espacial corresponent a l'empaquetament, aquests eixos d'ordre cinc es mantenen pràcticament intactes en els fragments, jugant un important paper com a simetries locals en les propietats físiques d'aquests compostos.

Grup de Dinàmica de Reaccions Químiques

Antonio Aguilar Navarro, Química Física (UB).

A. Activitat dins la línia de recerca

Encara que l'activitat de recerca del grup no es centra en la línia L3, no és menys cert que de manera quasi habitual es fan estudis d'estructura molecular i de química quàntica. Aquests càlculs estan, en la majoria del casos, enfocats a obtenir informació *ab initio* sobre els sistemes dels quals es realitza un estudi dinàmic, sigui tant a nivell de dinàmica molecular, de dinàmica de reacció o de determinacions experimentals. Aquests estudis estan fonamentalment dirigits a obtenir la millor informació possible sobre les característiques i el comportament de les superfícies d'energia potencial que controlen els diferents processos estudiats.

L4. MATÈRIA TOVA, MACROMOLÈCULES, COL·LOIDES I MEMBRANES

Biofísicoquímica de Macromolècules i Col·loides

Francesc Mas Pujadas, Química Física (UB).

A. Activitat dins la línia de recerca

Estudi de l'efecte de la heterogeneïtat i de la competició entre contraions en la complexació macromolecular. Aplicació a l'especiació de metalls pesants en medis aquàtics naturals; Estudi de l'efecte polielectrolític en sistemes d'interès mediambiental.

B. Pla de treball

S'ha introduït el concepte d'espectre d'afinitat condicional (CAS), per a així poder reduir el problema de la competició al d'un sistema monocomponent, i l'obtenció de paràmetres de complexació condicionals.

S'han desenvolupat programes de simulació Monte Carlo per estudiar l'efecte de les correlacions iòniques i la grandària dels ions en la distribució d'ions al voltant de superfícies carregades, com primer pas per a estudiar l'efecte polielectrolític en macromolècules d'interès ambiental.

C. Objectius assolits

El formalisme de simulació Monte Carlo, desenvolupant dintre del formalisme semi gran canònic, s'ha aplicat a l'estudi del binding de protons, al cas de superfícies de làtex en presència de NaCl, en funció de la força iònica i a diferents models de descripció dels grups funcionals ionitzables de la superfície del làtex. S'ha estudiat el rang d'aplicació de les teories de camp mig, tipus Poisson-Boltzmann.

Self-Organized Complexity & Self-assembling Materials (SOC&SAM)

Ramon Reigada Sanz, Química Física, (UB).

A. Activitat dins la línia de recerca

Són objecte d'estudi sistemes de matèria tova com són les bicapes lipídiques. L'interès de les bicapes lipídiques rau en dos aspectes. Des del punt de vista químic-físic, són sistemes bidimensionals on es poden estudiar fenòmens de formació d'estructures espaciotemporals, processos no lineals de dinàmica complexa, etc. que tenen interès des d'un punt de vista formal. Des del punt de vista biològic, les membranes lipídiques constitueixen sistemes senzills on estudiar fenòmens que tenen lloc a la membrana cel·lular.

B. Pla de treball

Simulacions Monte Carlo amb membranes multicomponents:

- a. Separació de fases en sistemes ternaris (lípid saturats, insaturats i colesterol). Connexió entre models discrets i continus.

- b. Estudi estructural i cinètic de la formació de nanoestructures en membranes lipídiques i proteïnes inserides.

C. Objectius assolits

- a. S'ha establert una connexió entre modelitzacions discretes i contínues per tal de simular fenòmens de separació de fase a bicapes ternàries a diferents escales d'espai i temps.
- b. S'ha caracteritzat l'estructura i temps de vida de les petites fluctuacions que es generen espontàniament en una bicapa ternària quan aquesta es troba a prop de la temperatura de separació de fases. S'han trobat analogies entre les escales d'espai i temps capturades en les simulacions i les trobades experimentalment en 'rafts' a membranes cel·lulars.

L5. FISICOQUÍMICA DE BIOSISTEMES I DISSENY DE FÀRMACS

Dinàmica de Reaccions Atmosfèriques i Sistemes Complexos (DRASC)

Miguel González Pérez, Química Física (UB).

A. Activitat dins la línia de recerca

Estudi teòric a nivell QM/MM (Quantum Mechanics/Molecular Mechanics) del mecanisme de reacció de reaccions enzimàtiques d'interès biomèdic. Fins ara el nostre grup ha centrat tots els esforços en les reaccions principals de la proteasa NS3/NS4A del virus de la hepatitis C, amb l'objectiu d'entendre les diferències entre els mecanismes de reacció dels tres substrats implicats així com el paper que juguen els residus d'aquest enzim víric, que és una proteasa de la serina, en el cicle catalític. Tot això amb la idea última d'ajudar en el disseny de nous inhibidors. El tractament de la part QM del subsistema s'ha realitzat a diversos nivells [AM1/MM, DFT-B/MM i versions millorades d'aquests mètodes incorporant tant mètodes ab initio (MP2) com DFT (B3LYP)].

B. Pla de treball

Durant l'any 2008 i en el 2009 s'ha completat l'estudi QM/MM del mecanisme de reaccions principals de la reacció de la proteasa NS3/NS4A del virus de la hepatitis C. Això ha suposat el càlcul a nivell MP2c AM1/MM (i en ocasions DFT-B/MM) de la superfície d'energia potencial, superfície d'energia lliure i anàlisi del paper que juguen els residus enzimàtics (en ocasions amb l'ajut de l'anàlisi de mutacions d'alanina) per les reaccions amb el tres substrats naturals d'aquest enzim (substrats procedents de la poliproteïna vírica). També s'han dut a terme alguns anàlisis sobre *varis missing residues* de l'enzim que, per suposat, es troben lluny del centre actiu.

C. Objectius assolits

L'estudi QM/MM, principalment a nivell MP2c AM1/MM, del mecanisme de reacció [estructura i dinàmica (clàssica)] de les reaccions principals de la proteasa NS3/NS4A del virus de la hepatitis C ha posat de manifest que la primera etapa de reacció (procés d'acilació) és correspon a la etapa limitant de la velocitat, jugant la segona etapa (trencament de l'enllaç peptídic) un paper clarament menor en relació a la cerca de nous inhibidors de l'enzim. També s'ha clarificat el paper singular que juga el residu Arg-155, que permet entendre la aparició de subtipus del virus de l'hepatitis C on l'Arg-155 apareix mutada amb un altre aminoàcid voluminos.

Simulació Quàntica de Processos Biològics

M. Carme Rovira Virgili, Parc Científic de Barcelona.

A. Activitat dins la línia de recerca

Dins de la línia 5 (Fisicoquímica de biosistemes i disseny de fàrmacs) el grup investiga els mecanismes de catàlisi enzimàtica en hemoproteïnes (en particular, peroxidases, catalases

i enzims híbrids catalasa-peroxidasa, implicats en la resistència a la tuberculosi) i glicosil hidrolases (enzims que degraden els carbohidrats) mitjançant tècniques de modelització molecular (clàssica i ab initio). Un dels principals objectius és ajudar en la recerca de nous inhibidors que es puguin emprar com a nous fàrmacs, així com en el disseny d'enzims més eficients.

B. Pla de treball

Durant els anys 2008-09 ens hem centrat en clarificar aspectes dels mecanismes enzimàtics de certes hemoproteïnes (catalases i peroxidases) i enzims que degraden carbohidrats (glicosil hidrolases). Mitjançant càlculs de dinàmica molecular ab initio, hem seguit els canvis electrònics que tenen lloc quan el peròxid d'hidrogen (H_2O_2) entra al centre actiu de la catalasa i reacciona amb el grup hemo. Els càlculs demostren que el mecanisme és de dos camins (Alfonso Prieto i col. *J. Am. Chem. Soc.* 2009), la qual cosa explica els resultats d'experiments cinètics. També hem resolt la paradoxa sobre l'estat electrònic (singlet o triplet) de l'oxigen que s'allibera en la reacció (Alfonso Prieto i col. *J. Phys. Chem. A* 2008). Per altra banda, la simulació del mecanisme de degradació de la cel·lulosa per part de l'enzim endoglucanasa (Petersen i col. *J. Phys. Chem B* 2009), ha permès identificar els aminoàcids implicats en la catàlisi, la qual cosa pot tenir implicacions en el disseny d'enzims modificats més eficients per al seu ús en el procés de producció del bioetanol.

C. Objectius assolits

- S'ha desxifrat els mecanismes catalítics dels enzims endoglucanasa de *Clostridium thermocellum* (Petersen i col. *J. Phys. Chem B* 2009) i catalasa (Alfonso Prieto i col. *J. Phys. Chem. A* 2008; *J. Am. Chem. Soc.* 2009).
- S'ha demostrat que l'aminoàcid "histidina proximal" de peroxidases humanes es troba en estat aniònic i no en estat neutre com s'havia suposat fins ara (Carpena i col. *J. Biol. Chem.* 2009).
- S'ha determinat els mecanismes de reconeixement de substrat de la aldo-keto reductasa AKRB10 (F. X. Ruiz i col. *Chem.-Biol. Interact.* 2009), un enzim que només es detecta en quantitats elevades en casos de càncer de pulmó.

Biofísicoquímica de Macromolècules i Col·loides

Francesc Mas Pujadas, Química Física (UB).

A. Activitat dins la línia de recerca

Desenvolupament de tècniques experimentals, principalment basades en fluorescència, *FRAP* (recuperació de la fluorescència després del fotoblanqueig), *etc.*, les quals ens permeten obtenir informació sobre la cinètica i la termodinàmica dels processos de reacció-difusió en situacions de crowding macromolecular, que mimetitzen els processos enzimàtics que tenen lloc en l'interior de les cèl·lules.

B. Pla de treball

Estudi de les condicions experimentals més adients, simulant l'ambient del citoplasma cel·lular, per a l'estudi dels processos de reacció-difusió de proteïnes en situacions de crowding macromolecular utilitzant *FRAP*.

Realització de càlculs de docking molecular i dinàmica molecular de sistemes d'interès bioquímic.

C. Objectius assolits

S'han utilitzat tècniques de Fluorescència (FRAP) per a l'estudi de la difusió de proteïnes en medis restringits (in vitro) que simulin situacions de crowding macromolecular, com les que ocorren en l'interior del citoplasma cel·lular, i a la seva posterior generalització a l'estudi de processos de reacció-difusió. En particular, s'ha estudiat la dependència temporal del coeficient de difusió de l'alfa-quimiotripsina en situacions de crowding macromolecular.-

Realització de càlculs de docking de sistemes peptídics.

L6. NANOESTRUCTURES, SUPERFÍCIES, INTERFASES I CATÀLISI

Simulació computacional de dinàmica de reaccions en superfície

Ramon Sayós Ortega, Química Física (UB).

A. Activitat dins la línia de recerca

Estudis mitjançant la Teoria del Funcional de la Densitat (DFT) de les superfícies d'energia potencial (SEP) de processos elementals reactius amb N, O, N₂, O₂, CO,...sobre algunes superfícies sòlides (sílice, alumina, grafit, ZrB₂,...), base de materials ceràmics usats en la indústria aeroespacial.

B. Pla de treball

S'ha aplicat el mètode DFT (programa VASP) a nivell GGA amb diferents funcionals (p.ex., RPBE, PBE, PW91,...) per caracteritzar els punts estacionaris (mínims i estats de transició) i els camins de mínima energia de les SEPs fonamentals dels sistemes O/O₂/grafit, O/O₂/SiO₂ i O/O₂/ZrB₂. S'han determinat les freqüències vibracionals harmòniques i s'han estimat les constants de velocitat tèrmiques en un ample interval de temperatures, emprant la Teoria de l'Estat de Transició.

C. Objectius assolits

Els estudis DFT realitzats han permès determinar els llocs d'adsorció més importants sobre la cel·la del sòlid i clarificar quins processos elementals seran més importants sobre cada material ceràmic. Això ha permès escollir els processos que cal considerar en les posteriors simulacions dinàmiques i en els models cinètics que estem emprant; per exemple, per entendre millor la interacció d'aire dissociat a altes temperatures sobre sílice.

Laboratori de Ciència de Materials Computacional (CMSL)

Francesc Illas Riera, Química Física (UB).

A. Activitat dins la línia de recerca

Dins d'aquesta línia d'investigació s'estan estudiant reaccions catalitzades per superfícies i en particular emprant nanopartícules com a models que representen adequadament els sistemes catalítics reals. S'elaboren models de nanopartícules de diferents materials, tant metalls com òxids i les seves combinacions. S'estudien reaccions en superfícies de cristalls de carburs, òxids, metalls i combinacions d'aquests. També s'estudien nous materials amb aplicacions tecnològiques basats en agrupacions d'unitats estructurals no convencionals. Dintre de les reaccions objecte d'estudi destaca la conversió efectiva del CO₂ i CH₄ en compostos químics útils, que es troba entre els processos clau en les futures tecnologies per a la producció d'energia "neta" i per a una producció química respectuosa amb el medi ambient.

B. Pla de treball

Per a l'estudi dels mecanismes de reaccions catalitzades s'han emprat essencialment models periòdics que representen la superfície dels catalitzadors i s'ha avançat en la utilització de models de nanopartícules tant de metalls de transició com d'òxids nanoestructurats. L'estructura electrònica i reactivitat d'aquest tipus de models s'ha estudiat a partir de mètodes basats en la teoria del funcional de la densitat. S'han explorat les superfícies de potencial per a diverses reaccions d'importància tecnològica i/o pel medi ambient caracteritzant els corresponents punts estacionaris determinant així els mecanismes de reacció a nivell molecular.

C. Objectius assolits

S'ha mostrat que nanopartícules d'Au suportades sobre TiC tenen una activitat catalítica especial el que representa el descobriment d'una nova família de catalitzadors basats en metalls suportats en carburs. En un estudi conjunt amb el grup experimental del laboratori de Brookhaven als EEUU s'ha posat de manifest la important activitat catalítica del sistema Au/TiC front a la dissociació de SO₂ i de tiofè. S'ha mostrat la importància de la grandària de la partícula en la dissociació d'oxigen molecular catalitzada per nanopartícules d'Au. S'ha completat també l'estudi de l'efecte dels halògens com a promotors de la epoxidació selectiva d'etilè catalitzada per superfícies de Ag.

L7. PROPIETATS ELÈCTRIQUES I MAGNÈTIQUES DE MOLÈCULES, CLÚSTERS I SÒLIDS

Estructura Electrònica (EE)

Eliseo Ruiz Sabín (UB).

A. Activitat dins la línia de recerca

La nostra recerca en aquesta línia bàsicament se centre en l'estudi de propietats magnètiques de complexos polinuclears amb un elevat nombre d'àtoms. L'ús de mètodes teòrics és bastant important, ja que ens permet obtenir una descripció detallada de les interaccions magnètiques presents en aquest tipus de complexos. Experimentalment, ni les mesures de susceptibilitat magnètica ni l'scattering inelàstic de neutrons són possibles a l'hora de determinar el tipus d'interaccions entre parelles de centres magnètics. Per aquest motiu, les eines computacionals, basades en la teoria del funcional de la densitat (DFT), són essencials per entendre la naturalesa d'aquestes propietats magnètiques, així com per la seva racionalització de cara al disseny de nous compostos amb propietats magnètiques millorades.

Els nostres esforços també s'han centrat en l'estudi de l'anisotropia magnètica com a segon factor clau en l'obtenció de molècules que puguin actuar com a magnets de form individual (*single-molecule magnets*).

B. Objectius assolits

Un dels resultats més interessants obtinguts en el nostre grup dins aquest àmbit està sintetitzat en l'article dedicat al complexo Mn₁₉ (J Am Chem Soc 2008, 130, 7420), la molècula amb l'spin més gran. Aquest estudi pot ser de gran ajuda per aquells químics experimentals en la seva cerca per obtenir molècules amb spins cada vegada majors.

Els treballs dins l'estudi de l'anisotropia magnètica han resultat en la publicació de dos articles amb col·laboració amb el professor J. Kortus (Freiberg University) (Chem. Eur. J. 2009, 15, 4078 and Chem. Comm. 2008, 52). En aquest es mostren algunes "receptes" per tal de racionalitzar l'elecció de lligands orgànics i metalls de transició per a l'obtenció anisotropies magnètiques negatives i amb valors absoluts grans.

Grup d'Estructura de Materials Moleculars (GEM2)

Juan José Novoa Vide, Química Física (UB).

A. Activitat dins la línia de recerca

El grup investiga dins del camp de materials moleculars, les propietats magnètiques que presenten aquest tipus de cristalls. D'aquesta manera s'intenta assolir un major coneixement de les interaccions magnètiques, aconseguir fer una base de dades suficient i intentar trobar relacions magento-estructurals per tal d'aconseguir un disseny controlat de materials magnètics amb les propietats desitjades.

B. Pla de treball

El procediment es basa en simular les propietats macroscòpiques dels cristalls partint del càlcul de les propietats microscòpiques. Amb aquest objectiu es calculen a nivell ab initio de les interaccions magnètiques entre parells de radicals fent ús de les tècniques de la química quàntica i a través de la definició de la topologia magnètica fer la simulació de les propietats macroscòpiques fent servir les eines de la mecànica estadística.

C. Objectius assolits

Determinació del mecanisme d'interacció magnètica en l'estudi de transicions magnètiques 1D-3D i de spin-canting. Determinació del mecanisme d'interacció magnètica en el cristall $\text{Fe}(\text{Cp}^*)_2\text{-TCNE}$. Establiment de l'existència d'interaccions magnètiques als enllaços intermoleculares $\text{Br}\cdots\text{Br}$ en cristalls que contenen anions de $\text{Cu}(\text{II})\text{Br}_4(-)$.

Laboratori de Ciència de Materials Computacional (CMSL)

Francesc Illas Riera, Química Física (UB).

A. Activitat dins la línia de recerca

En aquesta línia d'investigació s'estudia la relació entre l'estructura electrònica i les propietats magnètiques de sòlids fortament correlacionats. En particular els cuprats derivats de La_2CuO_4 i sistemes similars que convenientment dopats originen els superconductors d'alta temperatura crítica. Recentment aquesta línia s'interessa també en els nous superconductors basats en pnictur tipus LaOAsFe .

B. Pla de treball

Per a l'estudi de l'estructura electrònica de sòlids fortament correlacionats s'han combinat models periòdics i de *clúster* i aplicat els mètodes més avançats de la teoria del funcional de la densitat i de funcions d'ona multiconfiguracionals que inclouen de forma explícita la correlació electrònica. Un aspecte d'especial rellevància ha estat el corresponent a la inclusió dels requeriments d'espín i simetria als càlculs basats en la teoria del funcional de la densitat.

C. Objectius assolits

S'ha demostrat una relació entre la magnitud de la constant d'acoblament magnètic en les estructures "mare" (cuprats) i la temperatura crítica de transició a la fase superconductora a dopatge òptim. S'han explorat els nous funcionals híbrids meta GGA de la família M06 i els funcionals amb separació de rang. S'han mostrat les similituds entre cuprats i pnicturs que es fa palesa només quan s'empren funcionals que inclouen explícitament una part de bescanvi Fock.

Electronic Structure and Symmetry (ESS)

Pere Alemany i Cahner, Química Física (UB).

A. Activitat dins la línia de recerca

Estructura Electrònica i Propietats de Transport en Sòlids Inorgànics. En aquesta línia s'estudia l'estructura electrònica de sòlids inorgànics mitjançant mètodes *ab initio* periòdics per tal de correlacionar les propietats de transport electrònic amb l'estructura atòmica dels materials. En concret, estem interessats tant en metalls de baixa dimensionalitat com en les fases de Zintl amb propietats elèctriques anòmales.

B. Pla de treball

Estructura Electrònica i Propietats de Transport en Sòlids Inorgànics. En aquesta línia s'usen càlculs basats en la teoria del funcional de la densitat emprant bases atòmiques amb pseudopotencials i condicions periòdiques de contorn (programa SIESTA) per tal d'estudiar l'estructura electrònica de sòlids inorgànics complexos, amb l'interès centrat en les seves propietats de transport elèctric o les propietats magnètiques.

C. Objectius assolits

Estructura Electrònica i Propietats de Transport en Sòlids Inorgànics. En aquesta línia s'ha estudiat l'estructura electrònica de diversos sòlids, com ara la família de fases amb estequiometria $(\text{Ca}_7\text{N}_4)[\text{M}_x]$ ($M = \text{Ag}, \text{Ga}, \text{In}$) per a les quals s'havien destacat certes incongruències aparents entre l'estructura cristal·lina i les propietats de transport mesurades. Amb el càlcul detallat de l'estructura electrònica realitzat al nostre estudi, s'han pogut aclarir aquestes discrepàncies, detallant les condicions en les quals es dona una fragmentació de la cadena M_x que dona lloc a canvis importants en les propietats conductores d'aquests compostos. S'ha demostrat també que la fragmentació no està associada a una distorsió de Peierls, tal com s'havia suggerit en la literatura anteriorment. S'han estudiat també compostos amb estructures magnètiques complexes, com ara el vanadat nanotubular $\text{Na}_2\text{V}_3\text{O}_7$, per al qual la determinació de totes les constants d'acoblament magnètic a la cel·la primitiva ha mostrat que la majoria de models proposats per explicar el comportament magnètic en aquest compost no són realistes, ja que en ells es menyspreen alguns acoblaments antiferromagnètics significatius.

III.3. Resultats més rellevants

A continuació es resumeixen algunes de les publicacions més rellevants de membres de l'IQCTUB classificades en cadascuna de les línies de recerca de l'institut.

L1. MÈTODES TEÒRICS I ALGORISMES

Conformational Analysis of Molecular Machines: Internal Rotation and Enantiomerization in Triptycyl[3]helicene.

M. Lluell, P. Alemany, J.M. Bofill, *ChemPhysChem.*, 9, (2008) 1117-1119.

Per als compostos anomenats “torniquets” de Kelly s’ha trobat una superfície de potencial complexa que implica que qualsevol model simplificat de la seva estereodinàmica hagi de ser descrit emprant una superfície de potencial de com a mínim dues variables: la rotació del fragment triptílic i l’enantiomerització del fragment helicè. L’acoblament d’aquests dos tipus de moviment és a l’origen de l’inesperat comportament estereodinàmic en aquests compostos.

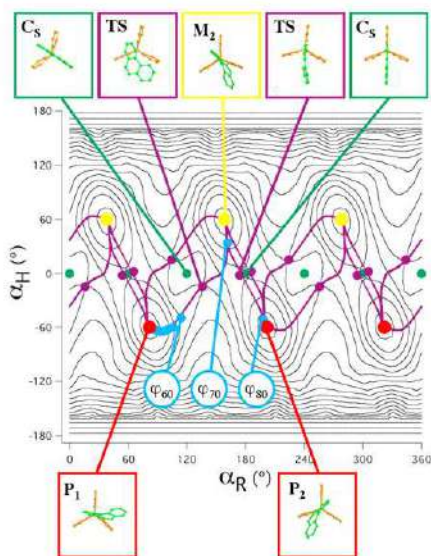


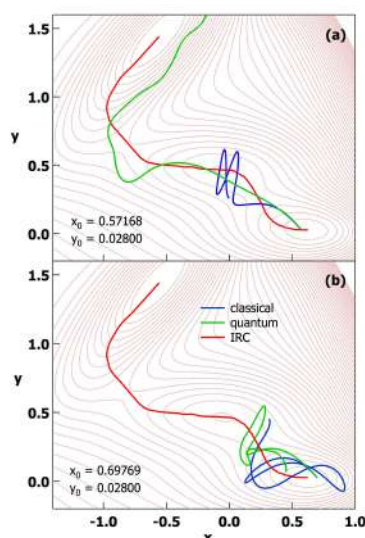
Figura. Superfície de potencial per als moviments concertats de rotació i enantiomerització del triptílic[3]helicè mostrant la localització dels camins de mínima energia (en violeta), els mínims corresponents a les diferents conformacions enantiomèriques ($P_{sub i}$ i $M_{sub i}$), els estats de transició (TS), i les conformacions aquirals ($C_{sub s}$).

Understanding Chemical Reactions within a Generalized Hamilton-Jacobi Framework.

A. S. Sanz, X. Giménez, J. M. Bofill, S. Miret-Artés, *Chem. Phys. Lett.*, 478, (2009) 89-96.

S'utilitza el marc proporcionat per la formulació de Hamilton–Jacobi, per a estudiar amb detall les diferències entre la dinàmica clàssica i la dinàmica quàntica i, a més, entre les formulacions dinàmica i estàtica dels processos químics. Fruit de l'estudi és la possibilitat de construir els diagrames de Caratheodory, que informen topològicament sobre la concordança entre el camí de reacció i les trajectòries dinàmiques, així com l'estudi, en funció del temps, de la desviació entre una trajectòria clàssica i una trajectòria quàntica.

Aquest últim estudi proporciona una anàlisi, a nivell de trajectòria simple, dels efectes quàntics. El diagrama mostra una tal comparació entre els dos tipus de trajectòries.



A study to improve the van der Waals component of the interaction in water clusters

M. Albertí, A. Aguilar, D. Cappelletti, M. Bartolomei, A. Laganà, J. M. Lucas F. Pirani., *Phys. Scr.*, 78, 058108.

Millora de la descripció de la interacció de van der Waals, tant pel que fa a la part repulsiva (curt abast) com de l'atractiva (llarg abast), la qual cosa s'aconsegueix substituint la potència de -12 de la distància per una funció de la distància que a més conté un paràmetre que permet adaptar-la a l'estudi d'interaccions molt diverses, com poden ser interaccions ió-neutre, formació d'enllaços d'hidrogen, etc. L'adequació de la funció es comprova amb una comparació dels resultats estimats amb els experimentals del coeficient del virial del dímer de l'aigua en funció de la temperatura i de les funcions de distribució radial de l'aigua líquida.

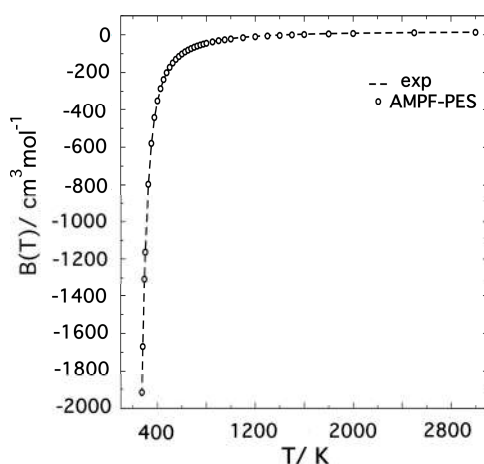


Figura 1. Valors del segon coeficient del virial ($B(T)$), calculats (línia discontinua) i mesurats [A. H. Harvey, E. W. Lemmon, *J. Phys. Chem.*, 33, (2004) 369.] (rodones) en funció de la temperatura.

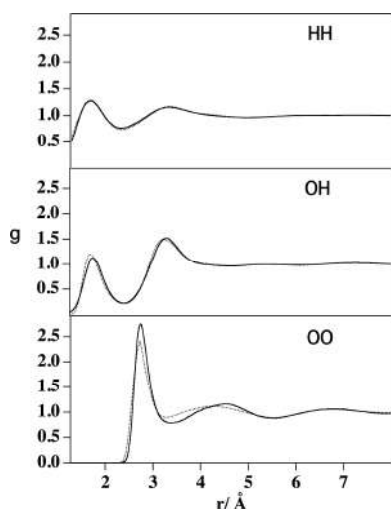
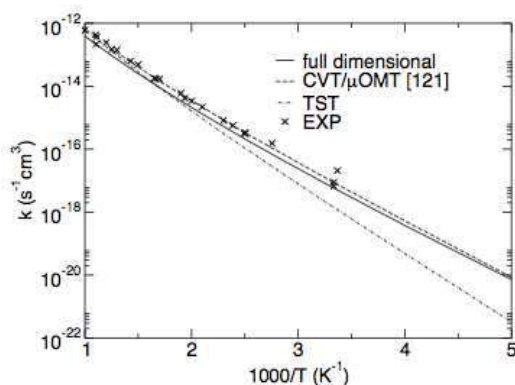


Figura 2. Funcions de distribució radial obtingudes a partir de resultats de Dinàmica Molecular (línia discontinua) i mesurats en experiments de difracció de neutrons (línia contínua).

MCTDH Calculation of Flux Correlation Functions: Rates and Reaction Probabilities for Polyatomic Chemical Reactions.

F. Huarte-Larrañaga, U. Manthe, *Multidimensional Quantum Dynamics: MCTDH theory and its applications*. Ed. Wiley-VCH, 231-248.

En aquesta publicació s'ha donat un detallada perspectiva del mètode que ha permès proporcionar valors exactes de constants de velocitat per a reaccions elementals. Aquesta metodologia, que va permetre trencar la barrera dels sistemes de quatre àtoms, ha esdevingut una referència pel que fa a la dinàmica de reaccions poliatòmiques. Disposar de resultats mecano-quàntics acurats és de gran importància en una doble vessant: permet la comprovació i millora de les superfícies d'energia potencial i, d'altra banda, tenir resultats exactes per a determinats models permet la validació de mètodes aproximats. En la figura es mostra la constata cinètica calculada per a la reacció $O(^3P) + CH_4 \rightarrow OH + CH_3$ i la seva comparació amb resultats experimentals:



Non-classical kinetics for enzymatic reactions in two-dimensional media

A. Isvoran, E. Vilaseca, J. L. Garcés, L. Unipan, F. Mas, *Romanian J. Biophys.*, 18, (2008) 283.

Simulacions Monte Carlo de la reacció enzimàtica de Michaelis-Menten en medis bidimensionals sense crowding molecular indiquen que segueixen una cinètica no clàssica. Es realitza una comparació entre diferents equacions per descriure la dependència temporal dels coeficients de reacció i es fa un anàlisi de la influència de les condicions inicials.

L2. DINÀMICA I CINÈTICA DE REACCIONS, ESTATS EXCITATS I ESPECTROSCÒPIA

Quantum dynamics study of the $K + HF(v=0-2, j=0) \rightarrow KF + H$ reaction and comparison with quasiclassical trajectory results

J. Mayneris, R. Martínez, J. Hernando, S. K. Gray, M. González, *J. Chem. Phys.*, 128, (2008) 144302.

Intent de clarificació del comportament anòmal que presenta la secció eficaz d'aquesta reacció (enorme increment de la reactivitat fora de la regió d'energies on l'efecte túnel és important) quan la molècula de HF($v=0$) s'excita amb un quantum vibracional. Aquest treball suggereix, a partir de la comparació entre els resultats quàntics (mètode RWP-CS) i de trajectòries quasi clàssiques (mètode QCT), la conveniència de revisar alguns dels experiments fets sobre aquesta reacció, tant rellevant en el context de la recerca sobre la influència de l'alineament molecular sobre la reactivitat. La comparació entre els resultats teòrics obtinguts per les seccions eficaces de reacció es presenta a la Figura.

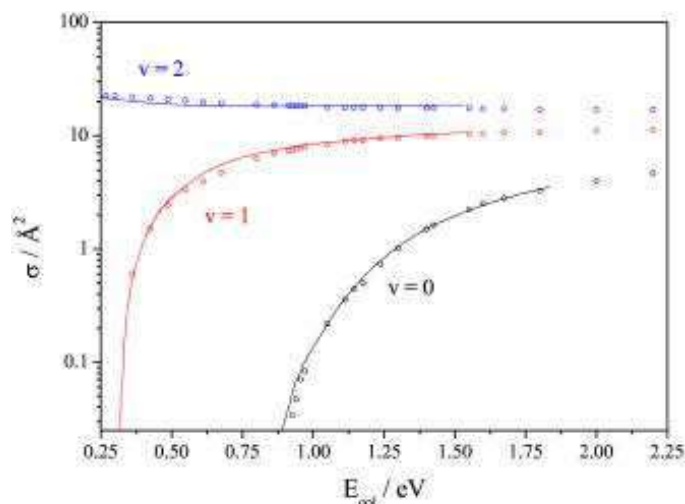


Figura. Comparació entre les seccions eficaces de reacció pel $K + HF$. La línia continua correspon als resultats quàntics RWP-CS i els cercles als resultats clàssics QCT. Únicament apareixen diferències significatives a la zona d'energia llindar pel HF($v=0$).

Renner-Teller coupled-channel dynamics of the $N(^2D) + H_2$ reaction and the role of the $NH_2 A^2A_1$ electronic state

P. Gamallo, P. Defazio, M. González, C. Petrongolo, *J. Chem. Phys.*, 129, (2008) 244307.

Primer estudi dinàmic-quàntic exacte d'una reacció química on els efectes electrònicament no adiabàtics (acoblements entre superfícies d'energia potencial) induïts per efecte Renner-

Teller juguen un paper destacat. En el mètode de propagació es fan servir paquets d'ona reals. La comparativa entre les constants de velocitats experimental i teòrica pel $N(^2D) + H_2$ es mostra a la Figura.

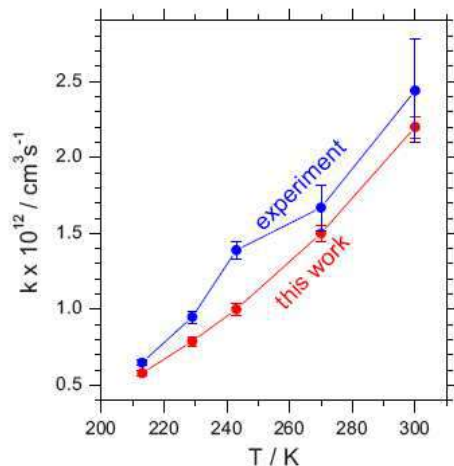


Figura. Constant de velocitat de la reacció $N(^2D) + H_2$ experimental i quàntic exacte.

Time-dependent quantum dynamics study of the $Ne + H_2^+(v=0-9)$ and $D_2^+(v=0-12)$ proton transfer reactions at thermal collision energies

J. Mayneris-Perxachs, M. González, *J. Phys. Chem. A*, 113, (2009) 4105-4109.

Treball bastant relacionat amb el publicat l'any 2008 sobre la transferència de protó en $Ne + H_2^+(v=0-4)$, on es van clarificar alguns aspectes pocs clars de la bibliografia. Es demostra la utilitat de l'aproximació mecano-quàntica *centrifugal-sudden* (CS), al menys pel que fa a les seccions eficaces relatives (que són també de molta utilitat en Química Física), a baixes energies de col·lisió i fins i tot en condicions de forta excitació vibracional dels reactius. Aquesta reacció, juntament amb la reacció equivalent amb He, és sobre la que es disposa de dades experimentals més acurades sobre la influència de la excitació vibracional en la reactivitat. Les seccions eficaces relatives experimentals i RWP-CS en funció del grau d'excitació vibracional es representen a la Figura.

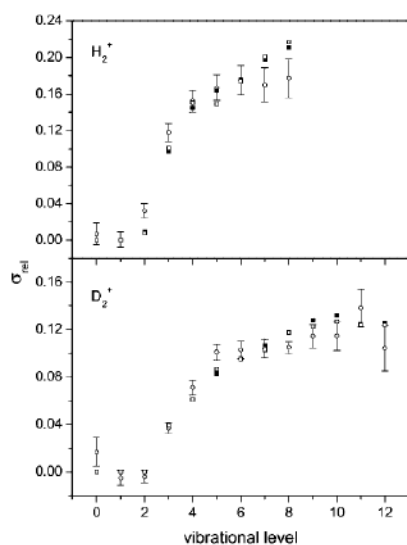


Figura. Seccions eficaces relatives experimentals (o) i teòriques RWP-CS per les reaccions de transferència de protó $Ne + H_2^+(v=0-9)$ and $D_2^+(v=0-12)$ en condicions tèrmiques (300 K) pel que fa a l'energia de col·lisió (els quadrats clars corresponen als resultats per la distribució de E_{col} a 300 K i els foscos al valor mig de E_{col} a aquesta temperatura; ambdós resultats són molt semblants).

The OH + D₂ → HOD + D angle-velocity distribution: Quasi-classical trajectory calculations on the YZCL2 and WSLFH potential energy surfaces and comparison with experiments at E_T=0.28 eV

J.D. Sierra, R. Martínez, J. Hernando, M. González, Phys. Chem. Chem. Phys., 11, (2009) 11520-11527.

Treball sobre el sistema tetratòmic *benchmark* més important (H₃O; reaccions amb barrera) on es mostren les grans dificultats del mètode de trajectòries quasi-clàssiques (mètode QCT) quan es tracta de descriure propietats poc promitjades, fins i tot en el cas de reaccions de quatre àtoms. Això aquí es degut a la importància dels efectes quàntics, resultat de la participació d'àtoms lleugers en el procés. Així mateix cal destacar la feineda que presenta treballar amb una representació de la superfície de potencial (SEP) basada en tècniques d'interpolació, com p. ex. és el cas de la SEP YZCL2 (tant des de el punt de vista del cost computacional com de la pseudo-quantització de l'energia interna de la molècula triatòmica de productes) en comparació a la utilització d'una SEP analítica (SEP WSLFH). La comparació entre les distribucions angle-velocitat experimental i teòrica QCT (SEP YZCL2) es presenta a la Figura .

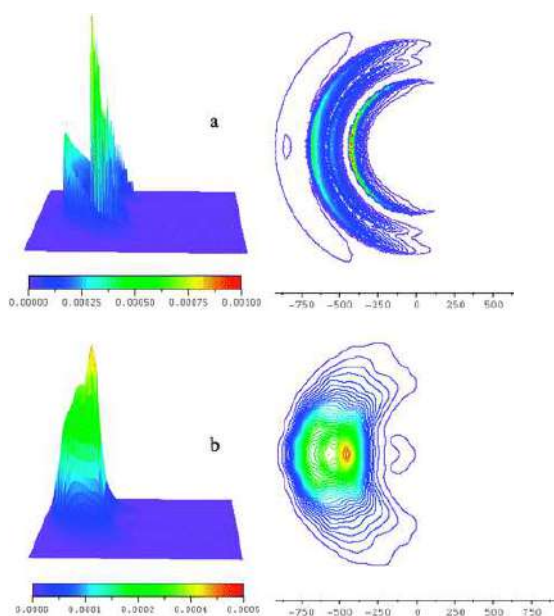


Figura. Distribucions angle-velocitat experimental (a) i teòriques QCT (b) per el producte HOD format a partir de OH + D₂ a una energia de col·lisió de 0.28 eV.

Theoretical and Experimental Studies on the Mechanism of Norbornadiene Pauson-Khand Cycloadducts Photorearrangement. Is There a Pathway on the Excited Singlet Potential Energy Surface?

S. Olivella, A. Solé, A. Lledó, J. Ji, X. Verdaguer, R. Suau, A. Riera, *J. Am. Chem. Soc.*, 130, (2008) 16898-16907.

La reacció intermolecular de Pauson-Khand (PKR), una cicloaddició carbonilativa entre un alquí i un alquè, és un mètode convenient per preparar ciclopentenones. Utilitzant norbornadiè com alquè, es poden preparar fàcilment una gran quantitat de triciclo[5.2.1.0]-4,8-decadien-3-ones (**1**). En aquest treball s'ha estudiat el mecanisme de reordenament fotoquímic d'aquests adductes **1**, a triciclo[5.2.1.0]-3,8-decadien-10-ones (**2**). Mitjançant càlculs CASSCF i CASPT2 s'han explorat minuciosament les superfícies d'energia potencial (SEP) de l'estat fonamental (S_0) i dels tres estats excitats més baixos ($^3(\pi\pi^*)$, $^1(n\pi^*)$, i $^3(n\pi^*)$) pel que fa a la reordenació prototípica de **1a** (el cicloadducte de la cicloaddició carbonilativa de nobornadiè i etí) a **2a**. D'aquest estudi, sorgeixen dos possibles camins de reacció no adiabàtics per a la reordenació fotoquímica: un comença en la SEP $^3(\pi\pi^*)$ i l'altre en la SEP $^1(n\pi^*)$. Els dos impliquen la ruptura inicial de l'enllaç C-C γ de l'enona, el que condueix a la formació d'un bis-al.lil o un diradical al.lil-butadieniloxil, respectivament, que després cau a la SEP S_0 mitjançant un creuament de superfícies $^3(\pi\pi^*)/S_0$ o una intersecció cònica $^1(n\pi^*)/S_0$, cada un als voltants del mínim diradical corresponent. Una vegada en la SEP S_0 , el tancament de l'anell a **2a** té lloc sense pràcticament barrera d'energia. La viabilitat dels camins de reacció es va estudiar experimentalment per mitjà de tècniques de "triplet sensitization" i estudis de "triplet quenching" en la fotoreorganització del cicloadducte Pauson-Khand substituït **1b** (R= TMS, R'= H) a **2b**. Utilitzant concentracions altes tant de piperilè com a "quencher" de triplet, o de benzophenone com a "sensitizer" de triplet, la velocitat de reacció va disminuir considerablement. Un gràfic de tipus Stern-Volmer de concentració del producte **2b** versus concentració de "quencher" de triplet va mostrar una correlació lineal excel·lent, indicant així que només hi ha un estat excitat implicat en la fotoreorganització. Concloem que, encara que hi ha un camí no adiabàtic que comença en la SEP $^1(n\pi^*)$, el producte de reacció es forma a través de l'estat $^3(\pi\pi^*)$ perquè la barrera d'energia implicada en la ruptura inicial de l'enllaç C-C γ de l'enona és molt més baixa en la SEP $^3(\pi\pi^*)$ que en la SEP $^1(n\pi^*)$.

Mechanisms for the Reactions of Hydroxyl Radicals with Acrolein: A Theoretical Study

S. Olivella, A. Solé, *J. Chem. Theory Comput.*, 4, (2008) 941-950.

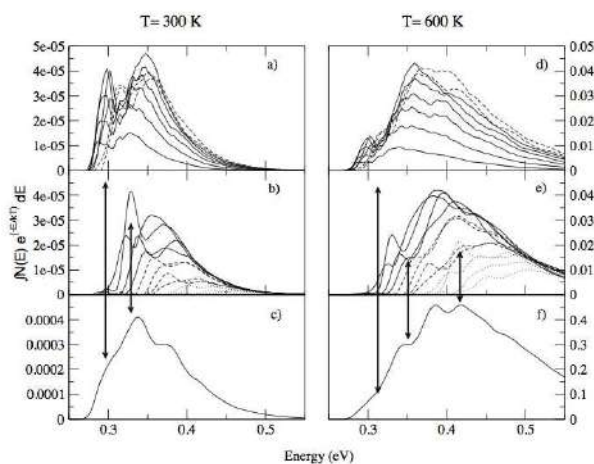
S'han investigat mitjançant mètodes mecanoquàntics de càlcul d'estructura electrònica (UQCISD i RQCISD(T)) els tres camins de reacció de mínima energia de la reacció de HO· amb acroleïna, una reacció clau en química atmosfèrica. El primer pas de tots els camins de reacció estudiats implica la formació sense barrera d'un complex prereactiu dèbilment lligat en el canal d'entrada, que està situat a poques kcal/mol per sota de l'energia dels reactius. El camí de reacció amb l'energia més baixa a 0 K s'ha trobat que és l'abstracció per l'HO· de l'àtom de H aldehydic a través d'una estructura d'estat de transició 1.1 kcal/mol per sota de l'energia dels reactius. L'addició de HO· a l'àtom de carboni terminal del doble

enllaç C=C té lloc a través d'una estructura d'estat de transició que està 0.7 kcal/mol per sota de l'energia dels reactius a 0 K, mentre que l'addició de HO· a l'àtom de carboni central té lloc a través d'una estructura d'estat de transició que està 0.8 kcal/mol per sobre de l'energia dels reactius a 0 K. Càlculs basats en la teoria convencional de l'estat de transició a 298 K prediuen que un 74.5% de la reacció de HO· amb acroleïna té lloc mitjançant abstracció de l'àtom de H aldehídric, un 24.2% mitjançant l'addició de HO· al carboni terminal del doble enllaç, i un 1.3% mitjançant l'addició de HO· a l'àtom de carboni central del doble enllaç. Aquests resultats estan en estret acord amb les dades experimentals disponibles.

Direct quantum mechanical calculation of the $F + H_2 \rightarrow HF + H$ thermal rate constant.

M. Moix, F. Huarte-Larrañaga, *Chem. Phys.*, 351, (2008) 65.

Malgrat la aparent simplicitat de la reacció, aquest treball ha representat un repte per la metodologia de les funcions de correlació de flux. Es van obtenir resultat molt satisfactoris amb un bon acord amb càlculs previs de *scattering quàntic*, aconseguint predir fins i tot algunes de les ressonàncies que presenta aquest sistema. En el gràfic es mostra la probabilitat cumulativa de reacció en funció de l'energia total i es pot observar la notable presència de ressonàncies.

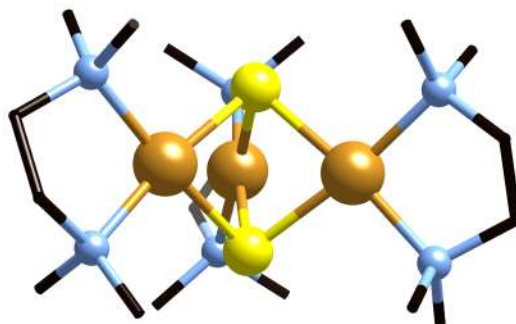


L3. ESTRUCTURA MOLECULAR I QUÍMICA QUÀNTICA

X-X Through-Cage Bonding in Cu, Ni and Cr Complexes with M_3X_2 Cores (X = S, As)

R. Carrasco, G. Aullón, S. Alvarez, *Chem. Eur. J.*, 15, (2009) 536-546.

Es presenten càlculs del funcional de la densitat en complexos trinuclears amb ponts sofre, $[(tmeda)_3Cu_3(\mu-S)_2]^{3+}$, $[(tmeda)_3Ni_3(\mu-S)_2]^{2+}$ i $[(tmeda)_3Ni_3(\mu-S)_2]^{4+}$, així com la reacció de formació del primer a partir del complex dinuclear $[(tmeda)_2Cu_2(\mu-S)_2]^{2+}$ i un fragment mononuclear $[(tmeda)(\eta^2-S)_2Cu]^+$. Es mostra una anàlisi orbital qualitativa de l'enllaç a la unitat M_3X_2 per casos en que cada metall M té una esfera de coordinació pla quadrada completada per dos àtoms donadors dels lligands terminals L, per exemple $[(L_2M)_3X_2]$. Aquest estudi conclou que un nombre d'electrons de l'esquelet de dotze correspon a sis enllaços M-X però sense enllaç X-X directe, mentre que el sistema anàleg amb deu electrons afavoreix la formació d'un enllaç X-X. Tanmateix, l'aplicació de les regles del nombre d'electrons de l'esquelet es presenta per unitats M_3X_2 de complexos amb cinc lligands terminals $[(L_5M)_3X_2]$, mitjançant una anàlisi qualitativa d'orbitals moleculars. La comprensió de l'enllaç en d'aquests compostos ajudarà a comprendre les característiques estructurals dels centres actius coure-sofre com òxid nítrós reductasa, cupredoxines o metal·lotioneïnes.



The Tetracyanopyrazinide Dimer Dianion, $[TCNP]_2^{2-}$. 2-Electron 8-Center Bonding

J. J. Novoa, P. W. Stephens, M. Weerasekare, W. W. Shum, J. S. Miller, *J. Am. Chem. Soc.*, 131, (2009) 9070.

La reacció entre el $Cr(C_6H_6)_2$ i el TCNP forma $[Cr(C_6H_6)_2][TCNP]$, on el TCNP es redueix i forma el dímer eclipsat $[TCNP]_2^{2-}$. Aquest dímer, de caràcter diamagnètic, és estudiat a partir de la teoria Atoms-in-Molecules, quedant descrita la seva interacció a llarga distància com a $2e^-/8c$. Els resultats B3LYP/6-31+G(d) indiquen que la interacció $[TCNP]^- \cdots [TCNP]^-$ és repulsiva (+58.9 kcal/mol) i l'estabilitat del dímer ve donada per les interaccions $[TCNP]^- \cdots \text{catió}^+$.

A Comparative Analysis of the Multicenter, Long Bond in [TCNE]⁻ and Phenalenyl Radical Dimers: A Unified Description of Multicenter, Long Bonds.

F. Mota, J. S. Miller, J. J. Novoa, *J. Am. Chem. Soc.*, 131, (2009) 7699.

En aquest article la naturalesa dels enllaços multicentre a llarga distància entre dímers neutres del radical fenalenil és analitzada en detall i comparada amb la dels enllaços multicentre a llarga distància presents en el [TCNE]₂²⁻. Es veu que la component atractiva dominant de l'interacció prové del solapament entre els orbitals SOMO-SOMO i de la component de dispersió. Aquesta component de dispersió és la que permet el solapament SOMO-SOMO i dona les propietats d'enllaç covalent a l'esmentada interacció.

Oxidation of End-Capped Pentathienoacenes and Characterization of Their Radical Cations

R. Malave, M. C. Ruiz Delgado, V. Hernandez, J. T. Lopez Navarrete, B. Vercelli, G. Zotti, J. J. Novoa, Y. Suzuki, S. Yamaguchi, J. T. Henssler, A. J. Matzger, *Chem. Eur. J.*, 15, (2009) 12346.

Es realitza un estudi detallat de les propietats òptiques i electroquímiques de dos derivats 'pentatioacens', el "2,6-bis-(trimethylsilyl)- α -pentatioacene" (TMS-T5-TMS) corresponent a l'espècie neutre, i el "2,6-bis(triisopropylsilyl)- α -pentathienoacene" (TIPS-T5-TIPS), corresponent a l'espècie oxidada, en un rang de temperatures entre 80 i 300°K. S'interpreten els espectres UV/Vis i Raman obtinguts experimentalment usant mètodes DFT depenents del temps i càlculs DFT a nivell B3LYP/6-31G**. Es prediuen les distàncies d'enllaç, els HOMO-LUMO i les distribucions de carregues mitjançant mètodes computacionals tant per l'espècie oxidada com per l'espècie neutre. Tal com s'evidencia en les dades espectroscòpiques i obtingudes mitjançant RSE. L'oxidació del derivat estericament menys impedit, el TMS-T5-TMS es dona a través d'una dimerització p. Per contra, el TIPS-T5-TIPS, amb els grups TIPS, mes voluminosos, s'oxida al catió radical però la dimerització queda previnguda degut a efectes estèric. Aquestes observacions experimentals queden confirmades pels càlculs DFT realitzats sobre les espècies [TMS-T5-TMS]₂²⁺ i [TIPS-T5-TIPS]₂²⁺ en estat sòlid i en solució. Els potencials red-ox i la localització dels pics d'absorció corresponents als cations radicals i dímers- π del TMS-T5-TMB son identificats experimentalment.

Molecules and Crystals with Both Icosahedral and Cubic Symmetry.

J. Echeverría, D. Casanova, M. Llunell, P. Alemany, S. Alvarez, *Chem. Commun.*, (2008), 2717-2725.

En aquest treball es crida l'atenció sobre l'existència de molècules que presenten fragments amb simetries icosaèdriques i cúbiques, aparentment incompatibles. La utilització de les mesures contínues de simetria per als diferents fragments mostra que, malgrat que la simetria global de la molècula no pot tenir simultàniament ambdós tipus de simetria, aquestes poden encaixar de manera complementària per donar molècules amb simetries locals icosaèdriques i cúbiques simultàniament, fet que té una important influència en les propietats físiques d'aquests compostos.

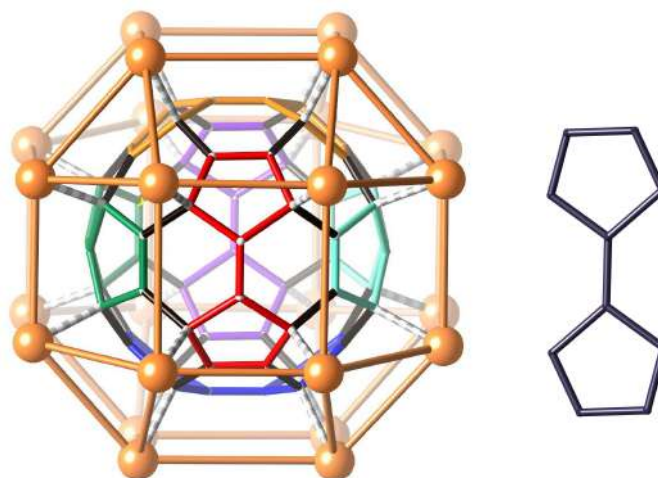


Figura. Vista de l'estructura de $C_{60}Br_{24}$ que combina la simetria icosaèdrica de l'esquelet ful·lerènic C_{60} amb el cub truncat concèntric Br_{24} (esferes grogues). L'esquelet de ful·lerè s'indica com a unió de sis unitats de fulvanè (dreta) amb diferents colors. Les línies grogues entre àtoms de brom no es corresponen a enllaços químics i només es mostren per remarcar el rombicuboctaedre del Br_{24} .

Dynamical study of the $Cs^+(^1S_0)+Mg(3^1S_0)$ non adiabatic collision system in the few keV energy range

M. Sabidó, J. de Andrés, J. Sogas, J. M. Lucas, M. albertí, J. M. Bofill, I. Rabadán, A. Aguilar,
Eur. Phys. J. D, 47, (2008) 63.

Els realitzen càlculs *ab initio* a nivell CISD de l'estat electrònic fonamental del sistema $CsMg^+$ així com diferents estats electrònics excitats capaços d'emissió de fluorescència i a partir d'ells es calculen també els acoblaments entre estats tant radials com rotacionals. L'estudi per dinàmica hemiquàntica [L. L Halcomb, D. J. Diestler, *J. Chem. Phys.* 281, (2002) 33] del sistema col·lisional permet obtenir les seccions eficaces de diversos canals de sortida, dedicant especial interès al de formació de $Mg(3^1P)$ i detectat experimentalment per mesures de fluorescència com un dels més importants. L'anàlisi detallada de les funcions de probabilitat (Figura 1) a diferents energies de col·lisió evidencia efectes de interferència quàntica deguts a la part electrònica tractada quànticament durant la col·lisió. Les seccions eficaces mesurades en funció de l'energia per a la formació de $Mg(3^1P)$ estan en força bon acord amb els valors experimentals mesurats i són del mateix ordre de magnitud mentre que, per alguns processos de transferència de càrrega, tot i que presenten una dependència correcta amb l'energia, els seus valors requereixen una adequada renormalització (Figura 2).

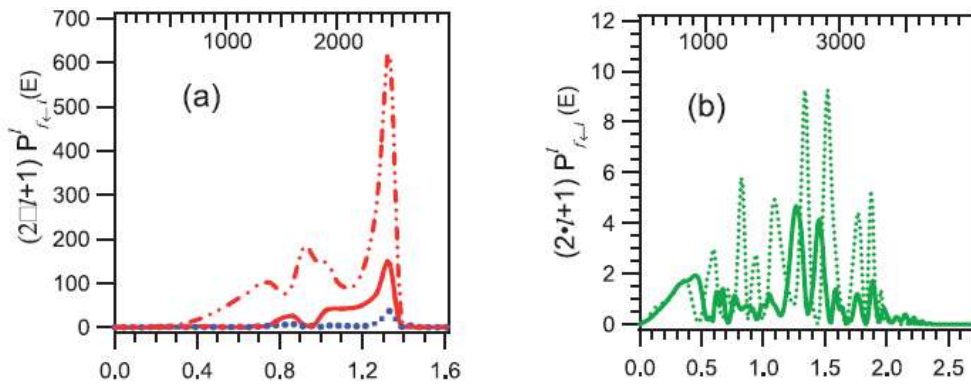


Figura 1. Funcions de probabilitat per a diferents canals en funció del paràmetre d'impacte (eix horitzontal inferior) o nombre quàntic orbital l (eix horitzontal superior). (a) $E = 350.00$ eV; funcions de probabilitat per formar: $\text{Cs}(6^2\text{S})+\text{Mg}^+(3^2\text{S})$, estats quasimoleculars $\Sigma^+-\Sigma^+$ (-); $\text{Cs}^+(1\text{S})+\text{Mg}^+(3^1\text{P})$, estats quasimoleculars $\Sigma^+-\Sigma^+$ (...); $\text{Cs}^+(1\text{S})+\text{Mg}^+(3^1\text{P})$, estats quasimoleculars $\Sigma^+-\Pi$ (-.-); (b) $E = 350.00$ eV; funcions de probabilitat per formar: $\text{Cs}(6^2\text{P})+\text{Mg}^+(3^2\text{S})$, estats quasimoleculars $\Sigma^+-\Sigma^+$ (-); $\text{Cs}(6^2\text{S})+\text{Mg}^+(3^2\text{S})$, estats quasimoleculars $\Sigma^+-\Pi$ (...).

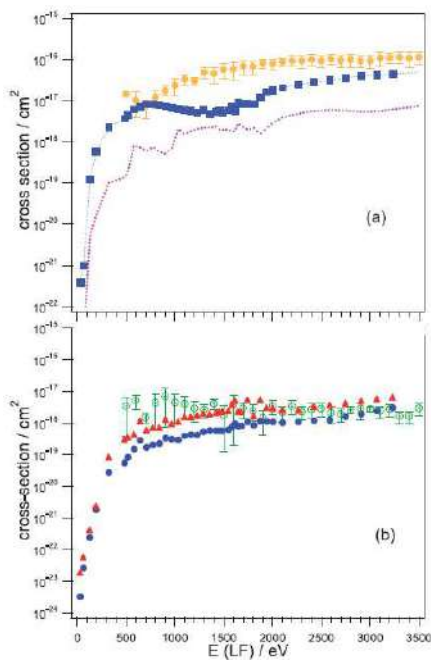


Figura 2. Valors de les seccions eficaces en funció de l'energia al laboratori (LF) per a diferents canals de col·lisió. (a) Valors calculats per $\text{Cs}(6^2\text{S})+\text{Mg}^+(3^2\text{S})$, (...) i $\text{Cs}^+(1\text{S})+\text{Mg}^+(3^1\text{P})$, (•); valors experimentals de les seccions eficaces per $\text{Cs}^+(1\text{S})+\text{Mg}^+(3^1\text{P})$, (•, mostrant la barra d'error). (b) Valors calculats per $\text{Cs}(6^2\text{P})+\text{Mg}^+(3^2\text{S})$, (•); valors calculats incloent possibles efecte de cascada des d'estats $\text{Cs}(5^2\text{D})$ per $\text{Cs}(6^2\text{P})+\text{Mg}^+(3^2\text{S})$, (▲); seccions eficaces experimentals renormalitzades per $\text{Cs}(6^2\text{P})+\text{Mg}^+(3^2\text{S})$, (o, mostrant barra d'error)

L4. MATÈRIA TOVA, MACROMOLÈCULES, COL·LOIDES I MEMBRANES

Interplay of unsaturated phospholipids and cholesterol in membranes: effect of the double-bond position

H. Martinez-Seara, T. Rog, M. Pasenkiewicz-Gierula, I. Vattulainen, M. Karttunen, R. Reigada, *Biophys. J.*, 95, 3295-3305 (2008)

Les propietats estructurals i dinàmiques de les membranes lipídiques riques en colesterol i fosfolípids es veuen fortament afectades per la insaturació de les cadenes alifàtiques dels lípids. En aquest treball demostrem que no només el fet de estar insaturats és important sinó també la posició del doble enllaç en la cadena alifàtica dels lípids. Hem estudiat com el colesterol interacciona amb fosfolípids de cadenes de 18 carbons de llargada, amb les dues cadenes insaturades i on la posició del doble enllaç és sistemàticament canviada. Les nostres simulacions atomístiques de Dinàmica Molecular indiquen que quan el doble enllaç no està en contacte amb l'anell rígid del colesterol, i especialment lluny del metil C18 de la cara rugosa del colesterol, la membrana resultant és gairebé tan ordenada que si els lípids constituents fossin saturats. Pel contrari, la interacció del doble enllaç amb l'anell del colesterol provoca desordre i fluïdesa a la membrana. El màxim desordre es produeix doncs quan el doble enllaç està situat al mig de la cadena alifàtica del fosfolípid, essent aquest el cas més comú en fosfolípids insaturats naturals. Els resultats suggereixen una mediació del colesterol a l'hora de seleccionar aquells lípids més comuns en membranes cel·lulars d'organismes eucariotes. Amb lípids saturats, el colesterol promou la formació d'estructures lipídiques altament ordenades (raft-like), mentre que regions més fluides de la membrana són riques en fosfolípids insaturats amb el doble enllaç al centre de les cadenes alifàtiques.

Phase separation in three-component lipid membranes: from Monte Carlo simulations to Ginzburg-Landau equations

R. Reigada, J. Buceta, J. Gomez, F. Sagués, K. Lindenberg, *J. Chem. Phys.*, 128, (2008) 025102.

La preferència del colesterol per empaquetar-se amb lípids saturats enlloc de amb lípids insaturats determina la força termodinàmica que motiva la formació de nanoestructures lipídiques en membranes cel·lulars, és a dir, dels 'lipid rafts'. En aquest context, la segregació de fases de mesclades ternàries en dues dimensions s'estudia formalment des de dues perspectives diferents. Per un costat, el model discret més simple està basat en simulacions Monte Carlo d'un model d'Ising corresponent a dues xarxes interconnectades, a partir de les quals, les característiques bàsiques del fenomen són investigades. Per una altra banda, es procedeix al procés de 'coarse-grain' del Hamiltonià discret a una formulació de camp mig i d'aquí s'obté una expressió per l'energia lliure del tipus Ginzburg-Landau. D'aquesta descripció, es construeixen equacions cinètiques que ens permeten realitzar simulacions numèriques i establir relacions analítiques pel criteri de separació de fases. Es discuteix també l'aplicació d'aquest formalisme en el context biològic.

Nonequilibrium patterns in phase-separating ternary membranes

J. Gomez, F. Sagués, R. Reigada, *Phys. Rev. E*, 80, (2009) 011920.

Presentem un model de no equilibri per l'estudi de la separació de fases d'una mescla ternària en dues dimensions. Quan el component que promou aquesta separació (colesterol) es dinàmicament intercanviat amb l'exterior del sistema, el procés de separació es deté generant dominis de segregació activament sostinguts. A més d'aquest efecte, la utilització d'un formalisme de Ginzburg-Landau ens permet introduir fluctuacions tèrmiques a la dinàmica del sistema i obtenir així una descripció del procés molt més dinàmica de l'organització en dominis. S'ha estudiat la grandària, forma i estabilitat d'aquests dominis. Dominis més grans, circulars i estables es formen quan disminuïm la taxa de reciclatge, quan augmentem la mobilitat del component bescanviat i quan la mescla es troba a menys temperatura. Esperem que aquest resultat sigui d'aplicació en l'estudi de la fenomenologia 'raft' a membranes cel·lulars.

Competitive Cd²⁺/H⁺ complexation to polyacrylic acid described by the stepwise and intrinsic stability constants

D. Calin, E. Companys, J. Galceran, J. L. Garcés, F. Mas, C. Rey-Castro, J. Salvador; J. Puy, *J. Phys. Chem. B*, 112, (2008) 10092-10100.

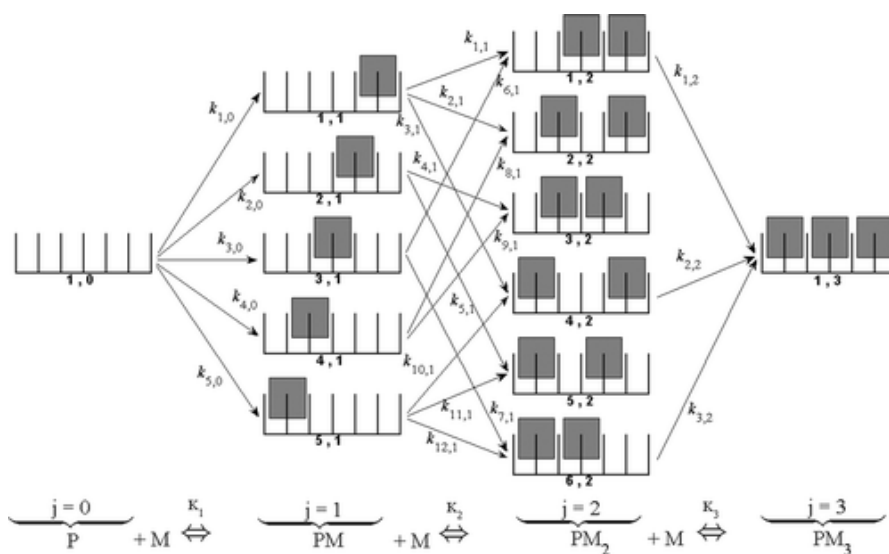
La descripció de la competició entre el procés de complexació macromolecular i l'equilibri àcid-base s'ha realitzat mitjançant constants microscòpiques. S'ha desenvolupat una expressió que utilitza els valors d'aquestes constants microscòpiques per obtenir informació sobre el procés d'enllaç a nivell microscòpic. Aquesta expressió és d'aplicació general, ja que inclou els efectes de la heterogeneïtat, interaccions i complexació quelant.

L5. FISICOQUÍMICA DE BIOSISTEMES I DISSENY DE FÀRMACS

A model-independent link between the macroscopic and microscopic descriptions of multidentate macromolecular binding: relationship between stepwise, intrinsic and microscopic equilibrium constants

J. L. Garcés, C. Rey-Castro, D. Calin, S. Madurga, F. Mas, I. Pastor, J. Puy, *J. Chem. Phys. Chem. B*, 113, (2009) 15145-15155.

L'enllaç d'ions i de molècules petites a macromolècules i superfícies es pot descriure macroscòpicament mitjançant constant d'equilibri estequiomètriques, que es poden obtenir experimentalment a partir de dades de recobriment molecular respecte a la concentració. En aquest treball es presenta una interpretació nova i senzilla d'aquestes constants en termes de constant microscòpiques. Aquesta descripció es pot aplicar al cas més general on s'inclou heterogeneïtat entre els llocs d'unió, interacció entre ells, adsorció multicomponent, complexació quelant, etc.

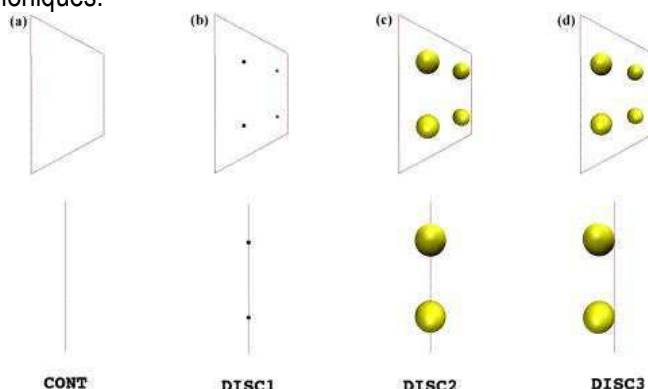


Ion binding to polyelectrolytes. Monte Carlo simulations versus classical mean field theories

S. Madurga, J. L. Garcés, E. Companys, C. Rey-Castro, J. Salvador, J. Galceran, E. Vilaseca, J. Puy, F. Mas, *Theor. Chem. Acc.*, 123, (2009) 127-135.

Simulacions Monte Carlo amb el formalisme Semi Gran Canònic s'han realitzat per estudiar la influència de la mida i del model de superfície carregada en les valoracions àcid-base de polielectrolits. S'han analitzat tres models de distribució dels grups funcionals sobre la superfície carregada, així com l'efecte de la mida del radi dels ions inerts i de la seva

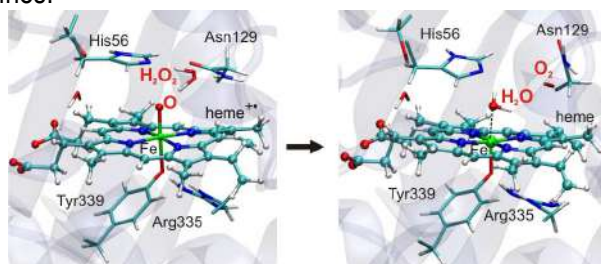
concentració. De les simulacions s'obtenen els perfils del grau de ionització respecte el pH a diferent forces iòniques.



The molecular mechanism of the catalase reaction

M. Alfonso-Prieto, X. Biarnés, P. Vidossich, C. Rovira, *J. Am. Chem. Soc.*, 131, (2009) 11751–11761.

Les catalases són enzims que protegeixen les cèl·lules dels efectes tòxics del peròxid d'hidrogen (H_2O_2), ja que el transformen en aigua i oxigen molecular de manera molt eficient ($H_2O_2 \rightarrow H_2O + O_2$). Des de la determinació de la primera estructura de l'enzim en els anys 80, s'havia pensat que la reacció catalítica requeria la transferència de dos electrons i que tenia lloc gràcies a la participació de l'aminoàcid *histidina distal*, el qual actuava com a catalitzador àcid-base. Els càlculs de dinàmica molecular QM/MM i metadinàmica demostren que, si bé la reacció té lloc a través d'aquest mecanisme, el procés no consisteix en la transferència d'un protó i un ió hidrur, com s'havia suposat, sinó que es tracta de dues transferències consecutives d'un àtom d'hidrogen, per una banda, i d'un protó i un electró, per l'altra. A més, hi ha un camí alternatiu sense participació de la histidina distal, la qual cosa explica les resultats de mesures cinètiques recents en mutants d'altres hemoproteïnes.



L6. NANOESTRUCTURES, SUPERFÍCIES, INTERFASES I CATÀLISI

Eley-Rideal reaction dynamics between O atoms on β -cristobalite (100) surface: a new interpolated potential energy surface and classical trajectory study

C. Arasa, V. Morón, H. F. Busnengo, R. Sayós, *Surf. Sci.*, (2009) 2742-2751.

En aquest treball hem estudiat les col·lisions d'oxigen atòmic amb la superfície de β -cristobalita (100), amb un oxigen preadsorbit sobre un Si de la primera capa, en el centre de la cel·la. Per a això hem construït una superfície d'energia potencial multidimensional (O_2/β -cristobalita) basada en una extensa xarxa de punts DFT, usant el mètode d'interpolació *Corrugation Reducing Procedure*. Hem calculat trajectòries quasi clàssiques en un ample interval de temperatures (100-1500 K), i també a diferents energies de col·lisió (0.01-4 eV) i angles d'incidència. S'ha observat que l'adsorció (o absorció) atòmica és el procés principal, si bé també existeix reflexió i reacció de recombinació atòmica tipus Eley-Rideal (ER), essent l'angle d'incidència molt influent sobre les diferents probabilitats de reacció. La reacció ER és afavorida amb l'augment de la temperatura del gas-sòlid, mostrant una energia d'activació (0.24 ± 0.02 eV) en l'interval 500-1500 K molt propera al seu valor experimental. El valor estimat del coeficient $\gamma(T)$ compara raonablement bé amb l'única determinació experimental existent. No obstant, s'ha discutit amplament altres factors que caldria introduir per obtenir un càlcul molt més acurat, en alguns dels quals ja estem treballant.

Dissociation of SO_2 on Au/TiC(001): Effects of Au-C interactions and charge polarization

J. A. Rodriguez, P. Liu, F. Vines, *Angew. Chem. Int. Ed.*, 47, (2008) 6685-6689.

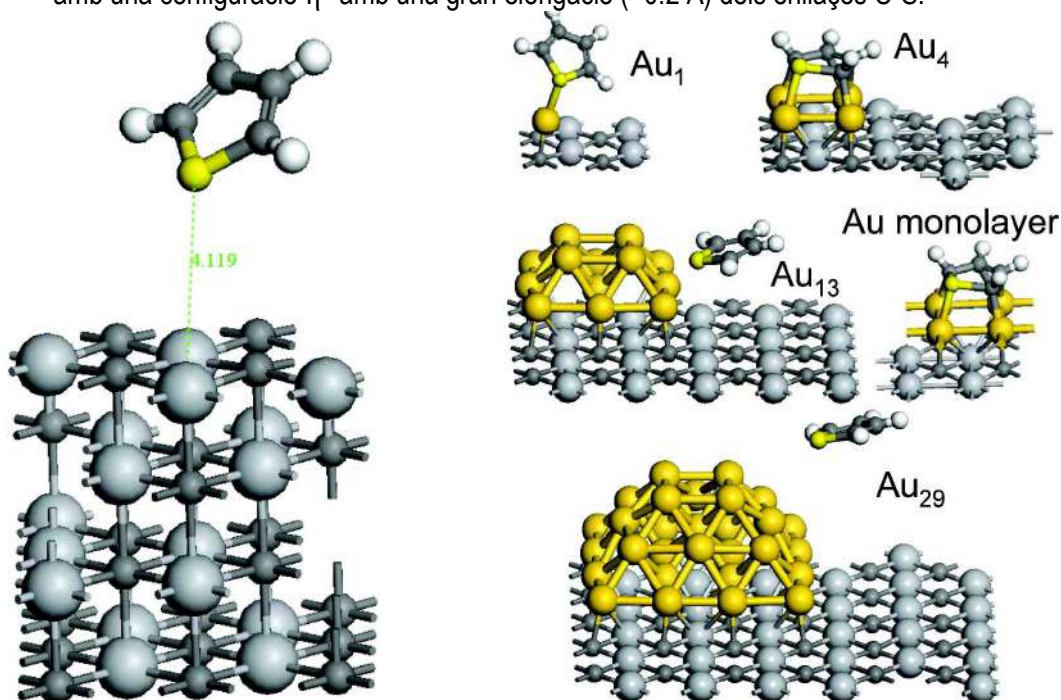
Activant l'or: S'han utilitzat espectroscòpia de fotoemissió d'alta resolució i càlculs DFT per tal d'estudiar l'interacció del SO_2 amb superfícies de Au/TiC(001). Les dues tècniques manifesten que es produeix la adsorció molecular del SO_2 i també la completa dissociació del enllaços SO sobre Au/TiC(001). El sistema Au/TiC(001) trenca els enllaços SO de manera més eficient que el sistema Au/TiO₂(110) o que el sistema Au/MgO(100) i descomposa el SO_2 a temperatures tant baixes com els 150 K.

Desulfurization of Thiophene on Au/TiC(001): Au-C Interactions and Charge Polarization

J. A. Rodriguez, L. Ping, Y. Takahashi, K. Nakamura, F. Vines, F. Illas, *J. Am. Chem. Soc.*, 131, (2009) 8595-8602.

Per a l'estudi de la interacció del tiofè amb les superfícies TiC(001) i Au/TiC(001) s'han emprat càlculs basats en la teoria del funcional de la densitat i experiments de fotoemissió. La força d'adsorció del tiofè sobre TiC(001) és feble, i la molècula es desorbeix a temperatures per dessota dels 200 K. La molècula s'uneix als centres Ti del TiC(001) a

través del seu àtom de sulfur amb patint pertorbacions estructurals negligibles. Tot i que el rendiment del TiC(001) o Au(111) per a la desulfurització és molt pobre, el sistema Au/TiC(001) presenta una activitat hidrodessulfurant més elevada que els catalitzadors convencionals de Ni/MoS_x. Les interaccions entre Au i TiC(001) indueixen una polarització de la densitat electrònica al voltat de l'Au que incrementa substancialment la reactivitat química del metall. Les nanopartícules de Au incrementen dràsticament la seva capacitat hidrodessulfurant del TiC(001) enfortint l'energia de l'enllaç del tiofè i ajudant a la dissociació del H₂ per produir l'hidrogen neccessari per a la hidrogenolisis dels enllaços C-S i l'eliminació de sulfur. La molècula d'H₂ es dissocia espontàniament en clústers bidimensionals d'or en contacte amb el TiC(001). En aquests sistemes, l'energia d'adsorció del tiofè és entre 0.45-0.65 eV més gran que pel TiC(001) o pel Au(111). El tiofè s'enllaça amb una configuració η⁵ amb una gran elongació (~0.2 Å) dels enllaços C-S.



Dynamic ion pairs in the adsorption of isolated water molecules on alkaline-earth oxide (001) surfaces

J. Carrasco, F. Illas, N. Lopez, Phys. Rev. Lett., 100, (2008) 016101.

L'adsorció d'aigua a baix recobriment sobre òxids de metalls alcalins s'ha estudiat amb mètodes basats en primers principis i amb simulacions de dinàmica molecular ab initio. En la superfície (001) del CaO i del BaO, la dissociació de l'aigua està termodinàmicament afavorida en comparació amb l'adsorció molecular trobada pel MgO (001). En la superfície (001) del CaO, la barrera energètica pel trencament de l'aigua és molt petita, fet que dona lloc a un parell iònic H-OH que exhibeix un caràcter dinàmic on el grup hidroxil es pot desplaçar a quatre setis d'adsorció equivalents a la vegada que es manté enllaçat al protó. Per altra banda, la separació del parell iònic és un procés endotèrmic de 0.8 eV. Aquest resultat coincideix amb els trobats per altres superfícies bàsiques com el cas del BaO

(001) i tenen aplicacions importants en la química de les superfícies d'òxids parcialment hidroxilades.

Azomethane decomposition catalyzed by Pt(111): An example of anti Broensted-Evans-Polanyi behavior.

J. R. B. Gomes, J. M. Bofill, F. Illas, *J. Phys. Chem. C*, 112, (2008) 1072-1080.

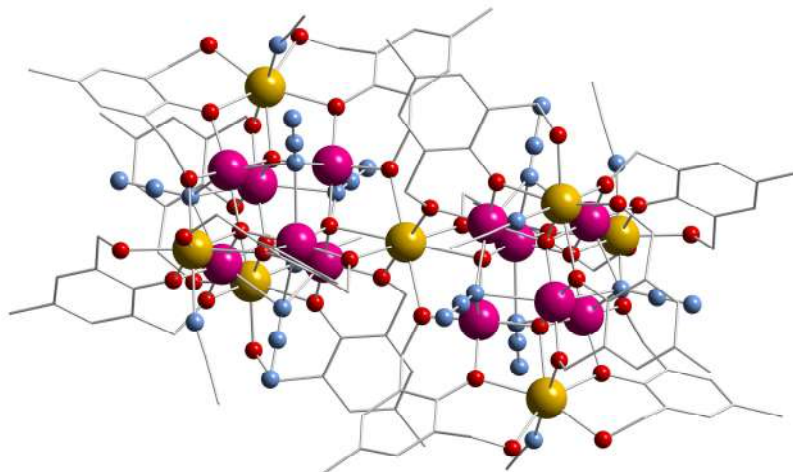
Aquest treball estudia el mecanisme molecular de descomposició de l'azometà (CH_3NNCH_3) sobre Pt(111), a partir de metodologia DFT periòdica. Es consideren 3 passos elementals principals, que impliquen escissions N–N o N–C. Per una banda, l'ordre termodinàmic d'estabilitats de productes afavoreix l'escissió N–N, donant lloc a dues unitats NCH_3 adsorbides. Ara bé, l'anàlisi conjunt de les energies d'activació mostra que el seu valor és menor, com menys estable és el producte. Es tracta doncs d'un comportament anti-BEP (Bronsted–Evans–Polanyi), essent el primer exemple d'aquest tipus en reaccions sobre superfícies.

L7. PROPIETATS ELÈCTRIQUES I MAGNÈTIQUES DE MOLÈCULES, CLÚSTERS I SÒLIDS

Magnetic Structure of the Large-Spin Mn₁₀ and Mn₁₉ Complexes: A Theoretical Complement to an Experimental Milestone

E. Ruiz, T. Cauchy, J. Cano, R. Costa, J. Tercero, S. Alvarez, *J. Am. Chem. Soc.*, 130, (2009) 7420-7426.

S'han proposat molècules d'alt spin com a candidates per l'emmagatzematge d'informació a nivell molecular. L'estructura electrònica de dos complexos moleculars magnètics, Mn₁₀ i Mn₁₉, s'han caracteritzat a partir de l'estudi computacional basat en la teoria del funcional de la densitat. Totes les interaccions d'intercanvi pel complex Mn₁₉ amb l'spin més alt fins ara conegut (83/2), i pel compost altament simètric de la mateixa família són ferromagnètiques. Aquests complexos presenten dos tipus d'acoblements ferromagnètics: interaccions Mn^{II}-Mn^{III} a través del doble pont μ_2 -alkoxo- μ_4 -oxo i interaccions Mn^{II}-Mn^{III} a través del pont μ_2 -alkoxo- μ_3 - η^1 : η^1 : η^1 , amb distàncies Mn^{III}-N llargues degut a un efecte Jahn-Teller.



Strong through-space two-halide magnetic exchange of -234 K in (2,5-dimethylpyrazine) copper(II) bromide

R. T. Butcher, J. J. Novoa, J. Ribas-Ariño, A. W. Sandvik, M. M. Turnbull, C. P. Landee, B. M. Wells, F. F. Awwadi, *Chem. Commun.*, (2009) 1359.

En col·laboració amb el grup experimental del professor M. Turnbull de la Clark University, s'ha estudiat tant a nivell experimental com teòric la primera interacció magnètica via through space de -234 K present en el cristall molecular de Cu(2,5-dimetilpirazina)Br₂. A nivell ab initio s'ha vist que aquesta interacció té lloc entre els ions Br \cdots Br enlloc de a través dels enllaços.

Structure and Magnetic Interactions in the Organic-based Ferromagnet Decamethylferrocenium Tetracyanoethenide, $[\text{FeCp}^*_2]^+[\text{TCNE}]^-$

J.-H. Her, P. W. Stephens, J. Ribas-Ariño, J. J. Novoa, W. W. Shum, J. S. Miller, *Inorg. Chem.*, 48, (2009) 3296.

En col·laboració amb el grup del professor J. Miller de la University of Utah, s'ha estudiat el comportament magnètic del cristall de $[\text{FeCp}^*_2][\text{TCNE}]$. Aquest cristall és el primer cristall de base orgànica que presenta propietats de material ferromagnètic. Les interaccions magnètiques d'aquest cristall han estat avaluades a nivell CASSCF i CASSCF/MCQDPT (considerant i no considerant l'acoblament spin-òrbita) trobant dues interaccions ferromagnètiques dominants (~ 45 i ~ 29 cm^{-1}) entre $\text{FeCp}^*_2 \cdots \text{TCNE}$ de dins d'una mateixa cadena. S'han trobat també altres interaccions entre les cadenes de menor ordre (~ 0.2 cm^{-1}) que no són negligibles i provoquen un ordenament magnètic tridimensional.

Chemical Bonding and Electronic and Magnetic Structure in LaOFeAs

J. C. Wojdel, I. de P. R. Moreira, F. Illas, *J. Am. Chem. Soc.*, 131, (2009) 906.

Càlculs periòdics basats en la teoria del funcional de la densitat que utilitzen funcionals híbrids de correlació-intercanvi prediuen que el LaOFeAs es un aïllant aniferromagnètic molt frustrat amb una covalència important entre el Fe i l'As, amb similituds evidents amb els cuprats.

Electronic structure and spin exchange interactions in $\text{Na}_2\text{V}_3\text{O}_7$, a vanadium(IV) oxide nanotubular phase

A. Rodríguez-Fortea, M. Lluell, P. Alemany, E. Canadell, *Inorg. Chem.*, 48, (2009) 5779-5789.

S'ha estudiat un compost, el vanadat nanotubular $\text{Na}_2\text{V}_3\text{O}_7$, amb una estructura magnètica complexa per al qual la determinació de totes les constants d'acoblament magnètic a la cel·la primitiva ha mostrat que la majoria de models proposats en la literatura per explicar el comportament magnètic en aquest compost no són realistes ja que en ells es menyspreen alguns acoblaments antiferromagnètics significatius.

Electronic structure of the A_8Tr_{11} (A = K, Rb, Cs; Tr = Ga, In, Tl) Zintl phases: Possible Chemical Reasons Behind their Activated vs. Non Activated Conductivity

M. Cobian, P. Alemany, A. García, E. Canadell, *Inorg. Chem.*, 48, (2009) 9792-9799.

En aquest treball s'estudien l'estructura electrònica i les propietats de transport per a una família de compostos amb estructures altament complexes. L'estudi explica per què tots els compostos coneguts d'aquesta família, excepte el $\text{Cs}_8\text{Ga}_{11}$, són metàl·lics. Aquest fet es pot atribuir a una inestabilitat electrònica en $\text{Cs}_8\text{Ga}_{11}$ que s'evita reduint les interaccions entre clústers, degut a la localització dels electrons, donant com a resultat una transició metall-aïllant.

Unconventional biradical character of titanium enolates.

I. de P. R. Moreira, J. M. Bofill, J. M. Anglada, J. G. Solsona, J. Nebot, P. Romea, F. Urpí, *J. Am. Chem. Soc.*, 130, (2008) 3242-3243.

En aquest treball es fa un estudi, tant experimental com teòric de l'enolació, mediada per TiCl_4 , d' α -hidroxi cetones. El resultat més destacable és la formació d'enolats de Ti(IV) amb un marcat caràcter biradicalari, tal com mostra l'evidència experimental a partir d'espectres EPR, com teòrica a partir de càlculs ab initio de densitats de spin. A la figura es mostra l'espectre EPR de les dues cetones estudiades en el treball.



III.4. Llista de publicacions

ARTICLES PUBLICATS L'ANY 2008

1. *A metallacryptand-based manganese(II)-cobalt(II) ferrimagnet with a three-dimensional honeycomb open-framework architecture.*
E. Pardo, D. Cangussu, M. C. Dul, R. Lescouezec, P. Herson, Y. Journaux, E. F. Pedroso, C. L. M. Pereira, M. C. Muñoz, R. Ruiz-Garcia, J. Cano, P. Amoros, M. Julve, F. Lloret.
Angew. Chem., Int. Ed., 47, (2008) 4211.
2. *Dissociation of SO₂ on Au/TiC(001): Effects of Au↔C Interactions and Charge Polarization.*
J. A. Rodriguez, P. Liu, F. Viñes, F. Illas, Y. Takahashi, K. Nakamura,
Angew. Chem. Int. Ed., 47, (2008) 6685-6689.
3. *Interplay of unsaturated phospholipids and cholesterol in membranes: effect of the double-bond position.*
H. Martinez-Seara, T. Rog, M. Pasenkiewicz-Gierula, I. Vattulainen, M. Karttunen, R. Reigada.
Biophysical Journal, 95, (2008) 3295-3305.
4. *Can Large Magnetic Anisotropy and High Spin Really Coexist?*
E. Ruiz, J. Cirera, J. Cano, S. Alvarez, J. Kortus.
Chem. Commun., (2008) 52-54.
5. *Molecules and Crystals with Both Icosahedral and Cubic Symmetry.*
J. Echeverría, D. Casanova, M. Llunell, P. Alemany, S. Alvarez.
Chem. Commun., (2008) 2717-2725.
6. *The self-assembly and magnetic properties of a Ni^{II}₈(μ₄-hydroxo)₆ cube with μ₂-pyrazolate as an exogeneous ancillary ligand.*
J. Y. Xu, X. Qiao, H. B. Song, S. P. Yan, D. Z. Liao, S. Gao, Y. Journaux, J. Cano.
Chem. Commun., (2008) 6414.
7. *Ab initio computational models in material science: A common playground for surface chemistry and solid state physics.*
F. Illas.
Chem. Eng. Comm., 195, (2008) 1465-1476.
8. *Polyhedral Structures with an Odd Number of Vertices: Nine-Coordinate Metal Compounds.*
A. Ruiz-Martínez, D. Casanova, S. Alvarez.
Chem. Eur. J., 14, (2008) 1291-1303.
9. *Structure, Magnetic, Polarized Neutron Diffraction and Theoretical Study of a copper(II) cubane.*
C. Aronica, Y. Chumakov, E. Jeanneau, D. Luneau, A.-L. Barra, P. Neugebauer, B. Gillon; A. Goujon, A. Cousson, J. Tercero, E. Ruiz.
Chem. Eur. J., 14, (2008) 9540.

10. *Direct quantum mechanical calculation of the $F + H_2 \rightarrow HF + H$ thermal rate constant.*
M. Moix, F. Huarte-Larrañaga.
Chem. Phys., 351, (2008) 65-71.
11. *Magnetic exchange interaction in triply bridged dinickel(II) complexes.*
C. Loose; E. Ruiz; B. Kersting; J. Kortus.
Chem. Phys. Lett., 452, (2008) 38-43.
12. *Evidence for spontaneous CO₂ activation on Cobalt surfaces.*
V. A. de la Peña O'Shea, S. Gonzalez, F. Illas and J. L. G. Fierro.
Chem. Phys. Lett., 454 (2008) 262-268.
13. *Modelling organic molecular crystals at finite temperatures, hybrid quantum mechanical/molecular mechanical embedding.*
J. Torras, S. Bromley, O. Bertran, F. Illas.
Chem. Phys. Lett., 457, (2008) 154-158.
14. *Exchange Coupling Constants Using Density Functional Theory: The MOX Suite*
E. Ruiz.
Chem. Phys. Lett., 460, (2008) 336-338.
15. *Evidence of magnetic ordering of paramagnetic surface defects on partially hydroxylated MgO nanocrystals.*
I. de P. R. Moreira, J. C. Wojdel, F. Illas, M. Chiesa and E. Giamello.
Chem. Phys. Lett., 462, (2008) 78-83.
16. *Full dimensional quantum versus semiclassical reactivity for the bent transition state reaction $N + N_2$.*
N. Faginas, F. Huarte-Larrañaga, A. Laganà
Chem. Phys. Lett., 464, (2008) 249.
17. *Mechanism of Binding of Fluoroquinolones to the Quinolone Resistance-Determining Region of DNA Gyrase: Towards an Understanding of the Molecular Basis of Quinolone Resistance.*
S. Madurga, J. Sánchez-Céspedes, I. Belda, J. Vila, E. Giralt.
ChemBioChem, 9, (2008) 2081-2086.
18. *Conformationally Restricted Hydantoin-Based Peptidomimetics as Inhibitors of Caspase-3 with Basic Groups Allowed at the S3 Enzyme Subsite.*
J. Vázquez, A. García-Jareño, L. Mondragón, J. Rubio-Martinez, E. Pérez-Payá, F. Albericio.
ChemMedChem, 3, (2008) 979-985.
19. *Conformational Analysis of Molecular Machines: Internal Rotation and Enantiomerization in Triptycyl[3]helicene.*
M. Llunell, P. Alemany, J. M. Bofill.
ChemPhysChem., 9, (2008) 1117-1119.
20. *Exchange Coupling in $Cu^{II}Gd^{III}$ Dinuclear Complexes. A Theoretical Perspective.*
J. Cirera and E. Ruiz.
Comptes Rendus Chim., 11, (2008) 1227-1234.

21. *Real wavepacket code for $ABC + D \rightarrow AB + CD$ reactive scattering.*
J. Mayneris, M. González, S. K. Gray.
Comput. Phys. Commun., 179, (2008) 741-747.
22. *Density-functional molecular dynamics studies of biologically relevant iron and cobalt complexes with macrocyclic ligands.*
I. Degtyarenko, X. Biarnés, R. M. Nieminen, C. Rovira.
Coord. Chem. Rev., 252, (2008) 1497.
23. *On the hydrogen bond nature of the C-H...F interactions in molecular crystals. An exhaustive investigation combining a crystallographic database search and ab initio theoretical calculations.*
E. D'Oria, J.J. Novoa.
CrystEngComm, 10, (2008) 423.
24. *On the origin of ferromagnetism in oximato-based $[Mn_3O]^{7+}$ triangles.*
J. Cano, T. Cauchy, E. Ruiz, C. J. Milios, T. T. Stamatatos, S. P. Perlepes, G. Christou, E. K. Brechin.
Dalton Trans., (2008) 234-240.
25. *Ligands that Enforce Unnatural Stereospinomers.*
D. Maganas, P. Kyritsis, G. Aullón, S. Alvarez.
Dalton Trans., (2008) 2235-2237.
26. *Polyhedral Structures with an Odd Number of Vertices: Nine. 2. Clusters and Supramolecular Architectures.*
A. Ruiz-Martínez, D. Casanova, S. Alvarez.
Dalton Trans., (2008) 2583-2591.
27. *Ligand design for multidimensional magnetic materials: a metallosupramolecular perspective.*
E. Pardo, R. Ruiz-García, J. Cano, X. Ottenwaelder, R. Lescouezec, Y. Journaux, F. Lloret, M. Julve.
Dalton Trans., (2008) 2780.
28. *Covalent Radii Revisited.*
B. Cordero, V. Gómez, A. E. Platero-Prats, M. Revés, J. Echeverría, E. Cremades, F. Barragán, S. Alvarez.
Dalton Trans., (2008) 2832-2838.
29. *Pentachloro(pyrazine)rhenate(IV) complex as precursor of heterobimetallic pyrazine-containing $Re^{IV} M^{II}_2$ ($M = Ni, Cu$) species: synthesis, crystal structures and magnetic properties.*
J. Martínez-Lillo, D. Armentano, N. Marino, L. Arizaga, R. Chiozzzone, R. Gonzalez, C. Kremer, J. Cano, J. Faus.
Dalton Trans., (2008) 4585.
30. *Conditional Affinity Spectra of Pb^{2+} -Humic Acid Complexation from Data Obtained with AGNES.*
J. Puy, J. Galceran, C. Huidobro, E. Company, N. Samper, J. L. Garcés, F. Mas.
Environ. Sci. Technol., 42, (2008) 9289-9295.

31. *Metallocenium Salts of Nickel Bis(α -thio phenedithiolate) $[M(Cp^*)_2][Ni(\alpha\text{-tpdt})_2]$ ($M = Fe, Mn, Cr$) - Metamagnetism and Magnetic Frustration.*
D. Belo, J. Mendonça, I. C. Santos, L. C. J. Pereira, M. Almeida, J. J. Novoa, C. Rovira, J. Veciana, V. Gama.
Eur. J. Inorg. Chem., (2008) 5299-5303.
32. *Dynamical study of the $Cs^+(^1S_0)+Mg(3^1S_0)$ non adiabatic collision system in the few keV energy range.*
M. Sabidó, J. de Andrés, J. Sogas, J. M. Lucas, M. albertí, J. M. Bofill, I. Rabadán, A. Aguilar.
Eur. Phys. J. D, 47, (2008) 63-70.
33. *Stereochemistry and Spin State in Four-Coordinate Transition Metal Complexes.*
J. Cirera, E. Ruiz, S. Alvarez.
Inorg. Chem., 47, (2008) 2871-2889.
34. *Electrochemical Behaviour of Copper Complexes with Substituted Polypyridinic Ligands. An Experimental and Theoretical Study.*
W. Cañon-Mancisidor, D. Rojas, E. Spodine, J. Manzur, S. Alvarez, D. Venegas-Yazigi.
Inorg. Chem., 47, (2008) 3687-3692.
35. *Squarato-metal(II) Complexes. 2: Unusual Bonding Mode for a Squarato-Bridged Trinuclear Copper(II) Complex.*
R. Vicente, J. Cano, E. Ruiz, S. S. Massoud, F. A. Mautner.
Inorg. Chem., 47, (2008) 4648.
36. *A new Bis(1-naphthylimino)acenaphthene Compound and its Pd(II) and Zn(II) Complexes: Synthesis, Characterization, Solid State Structures and Theoretical DFT Studies on the syn and anti Isomers.*
V. Rosa, T. Avilés, G. Aullon, B. Covelo, C. Lodeiro.
Inorg. Chem., 47, (2008) 7734-7744.
37. *Unravelling the intrinsic features of NO binding to iron(II)- and iron(III)-hemes.*
B. Chiavarino, M. E. Crestoni, S. Fornarini, C. Rovira.
Inorg. Chem., 47, (2008) 7792.
38. *Anion influence on the structure and magnetic properties of a series of multidimensional pyrimidine-2-carboxylato-bridged copper(II) complexes.*
J. Suarez-Varela, A. J. Mota, H. Aouryaghal, J. Cano, A. Rodriguez-Diequez, D. Luneau,
Inorg. Chem., 47, (2008) 8143.
39. *Syntheses, Structures, and Properties of Copper(II) Complexes of Bis(2-pyridylmethyl) Derivatives of o-, m-, and p-Phenylenediamine and Aniline.*
S. Turba, O. Walter, S. Schindler, L. P. Nielsen, A. Hazell, C. J. McKenzie, F. Lloret, J. Cano, M. Julve.
Inorg. Chem., 47, (2008) 9612.

40. *Self-Assembly of a Chiral Carbonate- and Cytidine-Containing Dodecanuclear Copper(II) Complex: a Multiarm-Supplied Globular Capsule*
D. Armentano, N. Marino, T. F. Mastropietro, J. Martínez-Lillo, J. Cano, M. Julve, F. Lloret, G. De Munno.
Inorg. Chem., 47, (2008) 10229.
41. *Application of Symmetry Operation Measures in Transition Metal Structural Chemistry.*
J. Echeverría, S. Alvarez.
Inorg. Chem., 47, (2008) 10965-10970.
42. *Rational design of a new class of heterobimetallic molecule-based magnets: Synthesis, crystal structures, and magnetic properties of oxamato-bridged $M_3' M_2$ ($M' = Li^I$ and Mn^{II} ; $M = Ni^{II}$ and Co^{II}) open-frameworks with a three-dimensional honeycomb architecture.*
D. Cangussu, E. Pardo, M. C. Dul, R. Lescouezec, P. Herson, Y. Journaux, E. F. Pedroso, C. L. M. Pereira, H. O. Stumpf, M. C. Muñoz, R. Ruiz-Garcia, J. Cano, M. Julve, F. Lloret.
Inorg. Chim. Acta, 361, (2008) 3394-3402.
43. *Magnetic properties of six-coordinated high-spin cobalt(II) complexes: Theoretical background and its application*
F. Lloret, M. Julve, J. Cano, R. Ruiz-Garcia, E. Pardo.
Inorg. Chim. Acta, 361, (2008) 3432-3445.
44. *A first-principles bottom-up study of the magnetic interaction mechanism in the bulk ferromagnet $p\text{-O}_2\text{N-C}_6\text{F}_4\text{-CNSSN}$.*
T. Cauchy, E. Ruiz, S. Alvarez.
Inor. Chim. Acta, 361, (2008) 3586.
45. *Experimental and theoretical study of the spin ground state of the high-spin molecular cluster $[Ni^{II}\{Ni^{II}(CH_3OH)_3\}_8(\mu-CN)_{30}\{W^V(CN)_3\}_6]\cdot 15CH_3OH$ by polarised neutron diffraction and density functional theory calculations.*
B. Gillon, J. Larionova, E. Ruiz, Q. Nau, A. Goujon, F. Bonadio, S. Decurtins.
Inor. Chim. Acta, 361, (2008) 3609-3615.
46. *Exchange Interactions in a Fe_5 Complex: A Theoretical Study using Density Functional Theory.*
J. Jorret, M. A. Robb, M. Deumal, J. J. Novoa.
Inor. Chim. Acta, 361, (2008) 3832-3835.
47. *Study of the magnetic Exchange within the cluster polymer $NaCu_6(gly)_8(ClO_4)_3(H_2O)]_n(ClO_4)_{2n}$.*
G. Aromi, J. J. Novoa, J. Ribas-Ariño, S. Igarashi, Y. Yukawa.
Inor. Chim. Acta, 361, (2008) 3919.
48. *On the N -representability and universality of $F[\rho]$ in the Kohn-Sham version of Density Functional Theory.*
E. Ludeña, F. Illas and A. Ramirez-Solis,
Int. J. Mod. Phys. B, 22 (2008) 4642-4654
49. *A Molecular Dynamics Simulation of Air Adsorption in Single-Walled Carbon Nanotube Bundles.*
V. Rojas Cervellera, M. Albertí, F. Huarte-Larrañaga.
Int. J. Quant. Chem., 108, (2008) 1714-1720.

50. *Structure and Magnetism of Dinuclear Copper(II) Metallacyclophanes with Oligoacene-bis(oxamate) Bridging Ligands: Theoretical Predictions on Wirelike Magnetic Coupling.*
E. Pardo, R. Carrasco, R. Ruiz-García, M. Julve, F. Lloret, M. C. Muñoz, Y. Journaux, E. Ruiz, J. Cano.
J. Am. Chem. Soc., 130, (2008) 576-585.
51. *Dual Aperture Control on pH- and Anion-Driven Supramolecular Nanoscopic Hybrid Gate-like Ensembles.*
R. Casasús, M. D. Marcos, R. Martínez-Máñez, F. Sancenón, J. Soto, L. Villaescusa, P. Amorós, J. Cano, E. Ruiz.
J. Am. Chem. Soc., 130, (2008) 1903-1917.
52. *Unconventional biradical character of titanium enolates.*
I. de P. R. Moreira, J. M. Bofill, J. M. Anglada, J. G. Solsona, J. Nebot, P. Romea, F. Urpí.
J. Am. Chem. Soc., 130, (2008) 3242-3243.
53. *Magnetic Structure of the Large Spin Mn₁₀ and Mn₁₉ Complexes: a Theoretical Complement to an Experimental Milestone.*
E. Ruiz, T. Cauchy, J. Cano, R. Costa, J. Tercero, S. Alvarez.
J. Am. Chem. Soc., 130, (2008) 7420-7426.
54. *How the C-O bond breaks during methanol decomposition on nanocrystallites of palladium catalysts.*
I. V. Yudanov, A. V. Matveev, K. M. Neyman, N. Rösch.
J. Am. Chem. Soc., 130, (2008) 9342-9352.
55. *Light-Induced Excited State Spin Trapping in Tetrazole-based Spin-Crossover Systems.*
B. Ordejón, C. de Graaf, C. Sousa.
J. Am. Chem. Soc., 130, (2008) 13961-13968.
56. *Theoretical and Experimental Studies on the Mechanism of Norbornadiene Pauson-Khand Cycloadducts Photorearrangement. Is There a Pathway on the Excited Singlet Potential Energy Surface?*
S. Olivella, A. Solé, A. Lledó, J. Ji, X. Verdager, R. Suau, A. Riera.
J. Am. Chem. Soc., 130, (2008) 16898-16907.
57. *A hierarchical approach to the study of complex macromolecular binding systems.*
J. L. Garcés, F. Mas, L. Acerenza, E. Mizraji.
J. Biol. Phys., 34, (2008) 213-235.
58. *Catalyst size matters: tuning the molecular mechanism of the water-gas-shift reaction on titanium carbide based compounds.*
F. Viñes, J.A. Rodriguez, P. Liu, and F. Illas.
J. Catal., 260, (2008) 103-112
59. *Towards an understanding of promoter action in heterogeneously catalyzed ethene epoxidation: why chlorine is the best halogen.*
D. Torres, R. M. Lambert, F. Illas.
J. Catal., 260, (2008) 380-383.

60. *Phase separation in three-component lipid membranes: from Monte Carlo simulations to Ginzburg-Landau equations.*
R. Reigada, J. Buceta, J. Gomez, F. Sagués, K. Lindenberg.
J. Chem. Phys., 128, (2008) 025102-025112.
61. *On the prediction of the crystal and electronic structure of mixed-valence materials, periodic density functional calculations: The case of Prussian blue.*
J.C. Wojdel, I de P.R. Moreira, S. T. Bromley, F. Illas.
J. Chem. Phys., 128, (2008) 044713.
62. *Finding Reaction Paths using the Potential Energy as Reaction Coordinate.*
A. Aguilar-Mogas, X. Giménez, J. M. Bofill.
J. Chem. Phys., 128, (2008) 104102-104113.
63. *Performance of the M06 family of exchange-correlation functionals for predicting magnetic coupling in organic and inorganic molecules.*
R. Valero, R. Costa, I. de P.R. Moreira, D. G. Truhlar, F. Illas.
J. Chem. Phys., 128, (2008) 114103.
64. *Quantum dynamics study of the $K + HF(v=0-2, j=0) \rightarrow KF + H$ reaction and comparison with quasiclassical trajectory results.*
J. Mayneris, R. Martínez, J. Hernando, S.K. Gray, M. González.
J. Chem. Phys., 128, (2008) 144302.
65. *Time dependent quantum dynamics study of the $Ne + H_2^+(v=0-4) \rightarrow NeH^+ + H$ proton transfer reaction.*
J. Mayneris, J. D. Sierra, M. González.
J. Chem. Phys., 128, (2008) 194307.
66. *Exact State-to-state quantum dynamics of the $F + HD \rightarrow HF(v'=2) + D$ reaction on model potential energy surfaces.*
D. De Fazio, V. Aquilanti, S. Cavalli, A. Aguilar, J. M. Lucas
J. Chem. Phys., 129, (2008) 064303.
67. *Use of an enhanced bulk diffusion-based algorithm for phase separation of a ternary mixture.*
J. Gomez, F. Sagués, R. Reigada.
J. Chem. Phys., 129, (2008) 184115-184124.
68. *Influence of cis double-bond parametrization on lipid membrane properties: How seemingly insignificant details in force-field change even qualitative trends.*
H. Martinez-Seara, T. Rog, M. Karttunen, R. Reigada, I. Vattulaine.
J. Chem. Phys., 129, (2008) 105103-105110.
69. *Renner-Teller coupled-channel dynamics of the $N(^2D) + H_2$ reaction and the role of the $NH_2 A^2A_1$ electronic state.*
P. Gamallo, P. Defazio, M. González, C. Petrongolo.
J. Chem. Phys., 129, (2008) 244307.

70. *Mechanisms for the Reactions of Hydroxyl Radicals with Acrolein: A Theoretical Study.*
S. Olivella, A. Solé.
J. Chem. Theory Comput., 4, (2008) 941-950.
71. *Symmetry operation measures.*
M. Pinsky, D. Casanova, P. Alemany, S. Álvarez, D. Avnir, C. Dryzun, Z. Kizner, A. Sterkin.
J. Comput. Chem., 29, (2008) 190-197.
72. *Role of cations, electronegativity difference and anionic interlayer interactions in the metallic vs. nonmetallic character of Zintl phases related to arsenic.*
P. Alemany, M. Llunell, E. Canadell.
J. Comput. Chem., 29, (2008) 2144-2153.
73. *Analytical methods for calculating continuous symmetry measures and the chirality measure.*
M. Pinsky, C. Dryzun, D. Casanova, P. Alemany, D. Avnir.
J. Comput. Chem., 29, (2008) 2712-2721.
74. *Stable Nanoporous Alkali Halide Polymorphs: a First Principles Bottom-up Study.*
W. Sangthong, J. Limtrakul, S. Bromley, F. Illas.
J. Mater. Chem., 18, (2008) 5871-5879.
75. *Effective Potential, Bohm's Potential plus Classical Potential, Analysis of Quantum Transmission.*
M. F. González, J. González, J. M. Bofill, X. Giménez.
J. Math. Chem., 43, (2008) 350-364.
76. *Protein-protein recognition as a first step towards the inhibition of XIAP and Survivin anti-apoptotic proteins.*
C. Obiol-Pardo, J. M. Granadino-Roldan, J. Rubio-Martinez.
J. Mol. Recognit., 21, (2008) 190-203.
77. *Density Functional Calculations of Pd Nanoparticles Using a Plane-Wave Method.*
F. Viñes, F. Illas, K. M. Neyman.
J. Phys. Chem. A, 112, (2008) 8911-8915.
78. *Electronic state of the molecular oxygen released by catalase.*
M. Alfonso-Prieto, P. Vidossich, A. Rodríguez-Forteza, X. Carpena, I. Fita, P. C. Loewen, C. Rovira.
J. Phys. Chem. A, 112, (2008) 12842.
79. *Competitive Cd²⁺/H⁺ complexation to polyacrylic acid described by the stepwise and intrinsic stability constants.*
D. Calin, E. Company, J. Galceran, J. L. Garcés, F. Mas, C. Rey-Castro, J. Salvador, J. Puy.
J. Phys. Chem. B, 112, (2008) 10092-10100.
80. *Azomethane decomposition catalyzed, Pt(111): An example of anti Broensted-Evans-Polanyi behaviour.*
J. R. B. Gomes, J. M. Bofill, F. Illas.
J. Phys. Chem. C, 112, (2008) 1072-1080.

81. *Hydrogen activation on silver: A computational study on surface and subsurface oxygen species.*
A. B. Mohammad, I. V. Yudanov, K. H. Lim, K. M. Neyman, N. Rösch.
J. Phys. Chem. C, 112, (2008) 1628-1635.
82. *The effect of Ag Adatoms on High-Coverage Alkanethiolate Adsorption on Au(111).*
M. Fonticelli, G. Benítez, P. Carro, O. Azzaroni, R. C. Salvarezza, S. Gonzalez, D. Torres, F. Illas.
J. Phys. Chem. C, 112, (2008) 4557-4563.
83. *A combined density-functional and IRAS study on the interaction of NO with Pd nanoparticles: Identifying new adsorption sites with novel properties.*
F. Viñes, A. Desikusumastuti, T. Staudt, A. Görling, J. Libuda, K. M. Neyman.
J. Phys. Chem. C, 112, (2008) 16539-16549.
84. *Atomic and electronic structure of cerium oxide stepped model surfaces.*
M. M. Branda, C. Loschen, K. M. Neyman, F. Illas.
J. Phys. Chem. C, 112, (2008) 17643-17651.
85. *On the thermodynamic stability of $(\sqrt{3} \times \sqrt{3})R30^\circ$ methanethiolate lattice on reconstructed Au(111) surface models.*
P. Carro, R. Salvarezza, D. Torres, F. Illas.
J. Phys. Chem. C, 112, (2008) 19121-19124.
86. *Spin Hamiltonian effective parameters from periodic electronic structure calculations.*
P. Rivero, I. de P.R. Moreira, F. Illas.
J. Phys.: Conf. Ser., 117, (2008) 012025.
87. *Proton affinity of S-containing aromatic compounds: Implications for crude oil hydrodesulfurization.*
I. García-Cruz, D. Valencia-Mendoza, T. Klimova, R. Oviedo-Roa, J. M. Martínez-Magadán, R. Gómez-Balderas, F. Illas.
J. Mol. Catal. A, 281, (2008) 79-84.
88. *Dependence of Mobility on Charge Carrier Localisation in Organic Molecular Crystals.*
S. T. Bromley, F. Illas, M. Mas-Torrent.
Phys. Chem. Chem. Phys., 10, (2008) 121-128.
89. *[Cyanil]₂²⁻ dimers possess long, two-electron ten-center (2e/10c) multicenter bonding.*
I. Garcia-Yoldi, J. S. Miller, J. J. Novoa.
Phys. Chem. Chem. Phys., 10, (2008) 4106.
90. *Density Functional Studies of Model Cerium Oxide Nanoparticles.*
C. Loschen, A. Migani, S. T. Bromley, F. Illas, K. M. Neyman.
Phys. Chem. Chem. Phys., 10, (2008) 5730-5738.
91. *Space and Momentum representation analysis of Hartman's effect in wavepacket transmission.*
M. F. González, X. Giménez, J. M. Bofill, F. Borondo.
Phys. Rev. A, 78, (2008) 032102-032107.

92. *Effect of surface site on the spin state of first-row transition metals adsorbed on MgO.*
E. Florez, F. Mondragon, P. Fuentealba, F. Illas.
Phys. Rev. B, 78, (2008) 075426.
93. *Actively maintained lipid nanodomains in biomembranes.*
J. Gómez, F. Sagués, R. Reigada.
Phys. Rev. E, 77, (2008) 021907-021912.
94. *Dynamic ion pairs in the adsorption of isolated water molecules on alkaline-earth oxide (001) surfaces.*
J. Carrasco, F. Illas, N. López.
Phys. Rev. Lett., 100, (2008) 016101-016104.
95. *A study to improve the van der Waals component of the interaction in water clusters.*
M. Albertí, A. Aguilar, D. Cappelletti, M. Bartolomei, A. Laganà, J. M. Lucas, F. Pirani.
Phys. Scr., 78, (2008) 058108.
96. *Thermal rate coefficients in collinear versus bent transition state reactions: the N + N₂ case study.*
A. Laganà, N. Faginas Lago, S. Rampino, F. Huarte-Larrañaga, E. García.
Phys. Scr., 78, (2008) 058116.
97. *Synthesis, Characterization and Magnetostructural Correlation Studies on Three Binuclear Copper Complexes of Pyrimidine derived Schiff Base Ligands.*
S. Gupta, S. Pal, A. K. Barik, A. Hazra, S. Roy, T. N. Mandal, S. M. Peng, G. H. Lee, M. S. El Fallah, J. Tercero and S. K. Kar.□
Polyhedron, 27, (2008) 2519-2528.
98. *Computational study of diffusion in cellular two-dimensional crowded media modelled as a mixture of mobile and immobile obstacles.*
A. Isvoran, E. Vilaseca, L. Unipan, J. L. Garcés, F. Mas.
Rev. Roum. Chim., 53, (2008) 415-419.
99. *Non-classical kinetics for enzymatic reactions in two-dimensional media.*
A. Isvoran, E. Vilaseca, J. L. Garcés, L. Unipan, F. Mas.
Romanian J. Biophys., 18, (2008) 283.
100. *A systematic density functional study of ordered sulfur overlayers on Cu(111) and Ag(111): influence of the adsorbate coverage.*
M. May, S. Gonzalez, F. Illas.
Surf. Sci., 602, (2008) 906-913.
101. *Classical dynamics study of atomic oxygen adsorption on the β-cristobalite (100) surface.*
C. Arasa, H. F. Busnengo, A. Salin, R. Sayós.
Surf. Sci., 602, (2008) 975-985.
102. *The chemistry of chlorine on Ag(111) over the sub-monolayer range: a density-functional theory investigation.*
Roldán, D. Torres, J. M. Ricart, F. Illas.
Surf. Sci., 602, (2008) 2639-2642.

103. *Origin of chemoselective behaviour of S covered Cu(111) towards catalytic hydrogenation of unsaturated aldehydes.*
M. Boronat, M. May, F. Illas.
Surf. Sci., 602, (2008) 3284-3290.
104. *A Computational Study and Valence Bond Approach to the Intramolecular Electrophilic Aromatic Substitution Mechanism of ortho-allyl-N-benzylanilines.*
E. E. Stashenko, J. R. Martínez, G. Tafurt-García, A. Palma, J. M. Bofill.
Tetrahedron, 64, (2008) 7407-7418.
105. *Evidence for spontaneous CO₂ activation on Cobalt surfaces.*
V. A. de la Peña O'Shea, S. Gonzalez, F. Illas, J. L. G. Fierro.
Chem. Phys. Lett., 454, (2008) 262-268.
106. *Narcissistic Reaction Pathways: An Example of Maxwell's Theorem of Geometrical Optics Applied to the Intrinsic Reaction Coordinate Model.*
M. Llunell, P. Alemany, J. M. Bofill.
Theor. Chem. Acc., 121, (2008) 279-288.

ARTICLES PUBLICATS L'ANY 2009

1. *Monte Carlo study of lipid nanoscale organization in cell membranes: tuning domain size and stability near the phase boundary.*
R. Reigada.
Biophys. Rev. Lett., 3, (2009) 245-265.
2. *Ring-oxidized retinoid specificity and retinoic acid signaling of aldo-keto reductase AKR1B10.*
F. X. Ruiz, O. Gallego, A. Ardèvol, A. Moro, M. Domínguez, R. Alvarez, A. R. de Lera, C. Rovira, I. Fita, X. Parés, J. Farrés.
Chem.-Biol. Interact., 178, (2009) 171.
3. *Jahn-Teller Distortions of Six-coordinate Copper(II) Compounds: Cis or Trans?*
J. Echeverría, E. Cremades, A. J. Amoroso, S. Alvarez.
Chem. Commun., (2009) 4242-4244.
4. *Single-molecule magnet Fe₉ supramolecular dimers: a theoretical approach to intramolecular and intermolecular exchange interactions.*
S. Gómez-Coca, E. Ruiz, J. Kortus.
Chem. Commun., (2009) 4363-4365.
5. *X-X Through-Cage Bonding in Cu, Ni and Cr Complexes with M₃X₂ Cores (X = S, As).*
R. Carrasco, G. Aullón, S. Alvarez.
Chem. Eur. J., 15, (2009) 536-546.
6. *How to Build Molecules with Large Magnetic Anisotropy.*
J. Cirera, E. Ruiz, S. Alvarez, F. Neese, J. Kortus.
Chem. Eur. J., 15, (2009) 4078-4087.
7. *Borate-Driven Gatelike Scaffolding Using Mesoporous Materials Functionalised with Saccharides.*
E. Aznar, C. Coll, M. D. Marcos, R. Martínez-Mañez, F. Sancenón, J. Soto, P. Amoros, J. Cano, E. Ruiz.
Chem. Eur. J., 15, (2009) 6877.
8. *Oxidation of End-Capped Pentathienoacenes and Characterization of Their Radical Cations.*
R. Malave, M. C. Ruiz Delgado, V. Hernandez, J. T. Lopez Navarrete, B. Vercelli, G. Zotti, J. J. Novoa, Y. Suzuki, S. Yamaguchi, J. T. Henssler, A. J. Matzger.
Chem. Eur. J., 15, (2009) 12346.
9. *Understanding Chemical Reactions within a Generalized Hamilton-Jacobi Framework.*
A. S. Sanz, X. Giménez, J. M. Bofill, S. Miret-Artés.
Chem. Phys. Lett., 478, (2009) 89-96.
10. *Approaching nanoscale oxides: models and theoretical methods.*
S. T. Bromley, I. de P. R. Moreira, K. M. Neyman, F. Illas.
Chem. Soc. Rev., 38, (2009) 2657-2670.

11. *Development and Characterization of Peptidic Fusion Inhibitors Derived from HIV-1 gp41 with Partial D-Amino Acid Substitutions.*
F. Gaston, G. C. Granados, S. Madurga, F. Rabanal, F. Lakhdar-Ghazal, E. Giralt, E. Bahraoui.
ChemMedChem, 4, (2009) 570-581.
12. *Retro-enantio N-methylated peptides as beta-amyloid aggregation inhibitors.*
D. Grillo-Bosch, N. Carulla, M. Cruz, L. Sanchez, R. Pujol-Pina, S. Madurga, F. Rabanal, E. Giralt.
ChemMedChem, 4, (2009) 1488-1494.
13. *Critical size for O₂ dissociation by Au nanoparticles.*
Roldán, S. González, J. M. Ricart, F. Illas.
ChemPhysChem, 10, (2009) 348-351.
14. *Conditional Affinity Spectra underlying NICA isotherm.*
J. Puy, C. Huidobro, D. Calin, C. Rey-Castro, J. Salvador, E. Companys, J. L. Garcés, J. Galceran, J. Cecilia, F. Mas.
Colloids Surf., A, 347, (2009) 156-166.
15. *Explicit Treatment of Water Molecules in Protein-Ligand Docking.*
O. Villacañas, S. Madurga, E. Giralt, I. Belda.
Current Computer-Aided Drug Design, 5 (2009) 145-154.
16. *Organometallic gold complexes of carborane. Theoretical comparative analysis of ortho, meta, and para derivatives and luminescence studies.*
O. Crespo, M. C. Gimeno, A. Laguna, I. Ospino, G. Aullón, J. M. Oliva.
Dalton Trans., (2009) 3807-3813.
17. *On the Role of the Pb²⁺ 6s Lone Pair in the Structure and Properties of the new Double Perovskite Pb₂ScSbO₆.*
S. A. Larrégola, J. C. Pedregosa, J. A. Alonso, M. J. Martínez-Lope, M. Algueró, V. de la Peña-O'shea, F. Porcher, F. Illas.
Dalton Trans., 28, (2009) 5453-5459.
18. *Can theoretical methods go beyond the experimental data? The case of molecular magnetism.*
E. Cremades, T. Cauchy, J. Cano, E. Ruiz.
Dalton Trans., (2009) 5873-5879.
19. *Ferro- and anti-ferromagnetically coupled tetracopper(II) 2 × 2 homoleptic rectangular grids supported by both -O and -(N-N) bridges derived from a new pyrazole based polydentate Schiff base ligand-magneto-structural correlations and DFT calculation.*
S. Roy, T. N. Mandal, A. K. Barik, S. Gupta, M. S. El Fallah, J. Tercero, R. J. Butcher, S. K. Kar.
Dalton Trans., (2009) 8215-8226.
20. *Cyclometallation of Amino-imines on Palladium Complexes. The Effect of the Solvent on the Experimental and Calculated Mechanism.*
G. Aullón, R. Chat, I. Favier, M. Font-Bardia, M. Gómez, J. Granell, M. Martínez, X. Solans.
Dalton Trans., (2009) 8292-8300.

21. *Effective Affinity Distribution for the Binding of Metal Ions to a Generic Fulvic Acid in Natural Waters.*
C. Rey-Castro, S. Mongin, C. Huidobro, C. David., J. Salvador, J. L. Garcés, J. Galceran, F. Mas, J. Puy.
Environ. Sci. Technol., 43 (2009) 7184-7191.
22. *A New Titanium Alkoxide-Thiolate Complex as a Versatile Heterofunctional Metalloligand.*
R. Fandos, A. Otero, A. Rodríguez, P. Terreros, G. Aullón, S. Alvarez.
Eur. J. Inorg. Chem., (2009) 1079-1085.
23. *Reactivity of the Super-Electron Rich Olefin Derived from Cyclam.*
M. F. Lappert, S. Alvarez, G. Aullón, R. Fandos, A. Otero, A. Rodríguez, S. Rojas, P. Terreros.
Eur. J. Inorg. Chem., (2009) 1851-1860.
24. *Ferromagnetic Coupling in a New Copper(II) Schiff Base Complex with Cubane Core: Structure, Magnetic Properties, DFT Study and Catalytic Activity.*
S. Thakurta, P. Roy, R. J. Butcher, M. Salah El Fallah, J. Tercero, E. Garribba, S. Mitra.
Eur. J Inorg. Chem., (2009) 4385-4395.
25. *On the suitability of the ILJ function to match different formulations of the electrostatic potential for water-water interactions.*
N. Faginas Lago, F. Huarte-Larrañaga, M. Albertí
Eur. Phys. J. D, 55, (2009) 75.
26. *A new side opening on prolyl oligopeptidase revealed by electron microscopy.*
T. Tarragó, J. Martín-Benito, E. Sabidó, B. Claasen, S. Madurga, M. Gairí, J. M. Valpuesta, E. Giralt.
FEBS Lett., 583, (2009) 3344-3348.
27. *Magnetic Bistability and Thermochromism in a Molecular Cu(II) Chain.*
F. Setifi, S. Benmansour, M. Marchivie, G. Dupouy, S. Triki, J. Sala-Pala, J. Y. Salaun, C. J. Gómez-García, S. Pillet, C. Lecomte, E. Ruiz.
Inorg. Chem., 48, (2009) 1269.
28. *Host-guest interactions, uniform vs fragmented linear atom chains, and likeliness of Peierls distortions in the $(Ca_7N_4)[M_x]$ ($M = Ag, Ga, In$) phases.*
P. Alemany, M. Llunell, E. Canadell.
Inorg. Chem., 48, (2009) 2919-2931.
29. *Exchange Interactions in Azido-Bridged Ligand Ni(II) Complexes: A Theoretical Analysis.*
G. Manca, J. Cano, E. Ruiz.
Inorg. Chem., 48, (2009) 3139-3144.
30. *Structure and Magnetic Interactions in the Organic-based Ferromagnet Decamethylferrocenium Tetracyanoethenide, $[FeCp^*_2]^{+}[TCNE]^{-}$.*
J.-H. Her, P. W. Stephens, J. Ribas-Ariño, J. J. Novoa, W. W. Shum, J. S. Miller.
Inorg. Chem., 48, (2009) 3296.

31. *Three lanthanum MOF polymorphs: Insights into kinetically and thermodynamically controlled phases.*
F. Gándara, V. A. de la Peña-O'Shea, N. Snejko, D. M. Proserpio, E. Gutiérrez-Puebla, M. A. Monge, F. Illas.
Inorg. Chem., 48, (2009) 4707-4713.
32. *Electronic structure and spin exchange interactions in Na₂V₃O₇, a vanadium(IV) oxide nanotubular phase.*
A. Rodríguez-Forteza, M. Lluell, P. Alemany, E. Canadell.
Inorg. Chem., 48, (2009) 5779-5789.
33. *Electronic structure and magnetic properties of potassium ozonide KO₃.*
I. de P.R. Moreira, M. Lluell, P. Alemany.
Inorg. Chem., 48, (2009) 5938-5945.
34. *Theoretical Methods Enlighten Magnetic Properties of a Family of Mn₆ Single-Molecule Magnet.*
E. Cremades, J. Cano, E. Ruiz, G. Rajaraman, C. J. Milios, E. K. Brechin.
Inorg. Chem., 48, (2009) 8012-8019.
35. *Electronic structure of the A₈Tr₁₁ (A = K, Rb, Cs; Tr = Ga, In, Tl) Zintl phases: Possible Chemical Reasons Behind their Activated vs. Non Activated Conductivity.*
M. Cobian, P. Alemany, A. García, E. Canadell.
Inorg. Chem., 48, (2009) 9792-9799.
36. *Discovering the Complex Chemistry of a Simple Ni^{II}/H₃L System: Magnetostructural Characterization and DFT Calculations of Di- and Polynuclear Nickel(II) Compounds.*
M. Fondo, N. Ocampo, A. M. García-Delibe, E. Ruiz, J. Tercero, J. Sanmartín.
Inorg. Chem., 48, (2009) 9861-9873.
37. *A Mixed-Valent Pentanuclear Cu^{II}₄Cu^I Compound Containing a Radical-Anion Ligand.*
T. J. Mooibroek, G. Aromí, M. Quesada, O. Roubeau, P. Gamez, S. DeBeer George, J. van Slageren, S. Yasin, E. Ruiz, J. Reedijk.
Inorg. Chem., 48, (2009) 10643.
38. *Synthesis, crystal structure, and magnetic properties of a new tetranuclear Cu(II) Schiff base compound.*
M. Biswas, G. Pilet, J. Tercero, M. S. El Fallah, S. Mitra.
Inorg. Chim. Acta, 362, (2009) 2915-2920.
39. *Substitution of Chloride by Nitrosyl Ligand in a Scorpionate Ruthenium(III) Compound: A Theoretical Study.*
G. Aullón, S. Alvarez, R. Cao, M. Ortiz, A. M. Díaz-García.
Inorg. Chim. Acta, 362, (2009) 4651-4658.
40. *On the development of an effective model potential to describe water interaction in neutral and ionic clusters*
M. Albertí, A. Aguilar, D. Cappelletti, A. Laganà, F. Pirani.
Int. J. Mass Spec., 280, (2009) 50.

41. *Direct calculation of the rate coefficients on the Grid: exact quantum versus semiclassical results for $N + N_2$.*
N. Faginas Lago, A. Costantini, F. Huarte-Larrañaga.
Int. J. Quantum Chem., 110, (2009) 422.
42. *Chemical bonding, electronic and magnetic structure in LaOFeAs.*
J.C. Wojdeł, I. de P. R. Moreira, F. Illas.
J. Am. Chem. Soc., 131, (2009) 906-907.
43. *A Comparative Analysis of the Multicenter, Long Bond in [TCNE]⁻ and Phenalenyl Radical Dimers: A Unified Description of Multicenter, Long Bonds.*
F. Mota, J. S. Miller, J. J. Novoa.
J. Am. Chem. Soc., 131, (2009) 7699.
44. *Desulfurization of thiophene on Au/TiC(001): Au-C interactions and charge polarization.*
J. A. Rodriguez, P. Liu, Y. Takahashi, K. Nakamura, F. Viñes, F. Illas.
J. Am. Chem. Soc., 131, (2009) 8595-8602.
45. *The Tetracyanopyrazinide Dimer Dianion, [TCNP]₂²⁻. 2-Electron 8-Center Bonding.*
J. J. Novoa, P. W. Stephens, M. Weerasekare, W. W. Shum, J. S. Miller.
J. Am. Chem. Soc., 131, (2009) 9070.
46. *The molecular mechanism of the catalase reaction.*
M. Alfonso-Prieto, X. Biarnés, P. Vidossich, C. Rovira.
J. Am. Chem. Soc., 131, (2009) 11751.
47. *Essential role of proximal histidine-asparagine interaction in mammalian peroxidases.*
X. Carpena, P. Vidossich, K. Schroettner, B. M. Calisto, S. Banerjee, J. Stamper, M. Soudi, P. G. Furtmüller, C. Rovira, I. Fita, C. Obinger.
J. Biol. Chem., 284, (2009) 25929.
48. *Edge Sites as a Gate for Subsurface Carbon in Palladium Nanoparticles.*
F. Viñes, C. Loschen, F. Illas, K. M. Neyman.
J. Catal., 266, (2009) 59-63.
49. *Influence of step sites in the molecular mechanism of the water gas shift reaction catalyzed by copper.*
J. L. Fajin, M N. D. S. Cordeiro, F. Illas, J. R. B. Gomes.
J. Catal., 268, (2009) 131-141.
50. *A Set of Molecular Descriptors Based on Renyi Entropy.*
L. Delgado-Soler, R. Toral, M. Santos Tomás, J. Rubio-Martinez.
J. Chem. Inf. Model., 49, (2009) 2457-2468.
51. *Periodic density functional theory study of spin-crossover in the Cesium Iron hexacyanochromate Prussian Blue analogue.*
J. Wojdeł, I. de P. R. Moreira, F. Illas.
J. Chem. Phys., 130, (2009) 014702.

52. *Is the Reduced Gradient Following Path a curve with extremal properties?*
J. M. Bofill.
J. Chem. Phys., 130, (2009) 176102-176103.
53. *Enhanced magnetic moments of Fe clusters supported on MgO/Fe(001) ultrathin films.*
U. Martinez, G. Pacchioni, F. Illas.
J. Chem. Phys., 130, (2009) 184711.
54. *Effect of the exchange-correlation potential and of surface relaxation on the description of the H₂O dissociation on Cu(111).*
L. Fajin, F. Illas, J. R. B. Gomes.
J. Chem. Phys., 130, (2009) 224702.
55. *Adsorption and diffusion of Au atoms on the (001) surface of Ti, Zr, Hf, V, Nb, Ta and Mo carbides.*
E. Florez, F. Viñes, J. A. Rodriguez, F. Illas.
J. Chem. Phys., 130, (2009) 244706.
56. *An experimental guided-ion-beam and ab initio study of the ion-molecule gas phase reactions between Li⁺ ions and iso-C₃H₇Cl in their ground electronic state.*
J. M. Lucas, J. de Andrés, J. Sogas, M. Alberti, J. M. Bofill, D. Bassi, D. Ascenzi, P. Tosi, A. Aguilar.
J. Chem. Phys., 131, (2009) 024306.
57. *The Effect of Local Environment on Photoluminescence: a TD-DFT study of Silanone Groups on the Surface of Silica Nanostructures.*
M. A. Zwiijnenburg, A. A. Sokol, C. Sousa, S. T. Bromley.
J. Chem. Phys., 131, (2009) 034705.
58. *Born-Oppenheimer and Renner-Teller coupled-channel quantum dynamics of the N(2D) + HD reactions*
P. Gamallo, P. Defazio
J. Chem. Phys., 131, (2009) 044320.
59. *A Restricted Quantum Reaction Path Hamiltonian: Theory, Discrete Variable Representation Propagation Algorithm and Applications.*
J. González, X. Giménez, J. M. Bofill.
J. Chem. Phys., 131, (2009) 054108-054123.
60. *Exploring Ce³⁺/Ce⁴⁺ Cation Ordering in Reduced Ceria Nanoparticles Using Interionic-Potential and Density-Functional Calculations.*
A. Migani, K. M. Neyman, F. Illas, S. T. Bromley.
J. Chem. Phys., 131, (2009) 064701.
61. *On the difficulties of present theoretical models to predict the oxidation state of atomic Au adsorbed on regular sites of CeO₂(111).*
M. M. Branda, N. J. Castellani, R. Grau-Crespo, N. H. de Leeuw, N. C. Hernandez, J. F. Sanz, K. M. Neyman, F. Illas.
J. Chem. Phys., 131, (2009) 094702.

62. *An experimental guided-ion-beam and ab initio study of the ion-molecule gas phase reactions between Li^+ ions and iso- $\text{C}_3\text{H}_7\text{Cl}$ in their ground electronic state.*
J. M. Lucas, J. de Andrés, J. Sogas, M. Albertí, J. M. Bofill, D. Bassi, D. Assenzi, P. Tosi, A. Aguilar.
J. Chem. Phys., 131, (2009) 024306-024315.
63. *Theoretical Mechanistic Study of the Oxidative Degradation of Benzene in the Troposphere: Reaction of Benzene-HO Radical Adduct with O_2 .*
S. Olivella, A. Solé, J. M. Bofill.
J. Chem. Theory Comput., 5, (2009) 1607-1623.
64. *Performance of plane-wave based LDA+U and GGA+U approaches to describe magnetic coupling in molecular systems.*
P. Rivero, C. Loschen, I. de P. R. Moreira, F. Illas.
J. Comput. Chem., 30, (2009) 2316-2326.
65. *Prediction of half-metallic conductivity in Prussian Blue derivatives.*
J. C. Wojdeł, I. de P. R. Moreira, S. T. Bromley, F. Illas.
J. Mater. Chem., 19, (2009) 2032-2036.
66. *On the effectiveness of partial oxidation of propylene by gold: A Density functional theory study.*
A. Roldán, D. Torres, J. M. Ricart, F. Illas.
J. Mol. Catal. A: Chem., 306, (2009) 6-10.
67. *Homology modeling of human Transketolase: Description of critical sites useful for drug design and study of the cofactor binding mode.*
C. Obiol-Pardo, J. Rubio-Martinez.
J. Mol. Graph. Model., 27, (2009) 723-734.
68. *Mimicking direct protein-protein and solvent-mediated interactions in the CDP-methylerythritol kinase homodimer : A pharmacophore-directed virtual screening approach.*
Victor Giménez-Oya, Óscar Villacañas, Xavier Fernández-Busquets, Jaime Rubio-Martinez, Santiago Imperial
J. Mol. Model., 15, (2009) 997-1007.
69. *Homology modeling of M. tuberculosis 2C-methyl-D-erythritol-4-phosphate cytidyltransferase, the third enzyme of the MEP pathway for isoprenoid biosynthesis.*
C. Obiol-Pardo, A. Cordero, J. Rubio-Martinez, S. Imperial.
J. Mol. Model., (doi 10.1007/s00894-009-0615-x).
70. *Theoretical study of the electronic structure of $[\text{tetrathiafulvalene}]_2^{2+}$ dimers and their long, intradimer multicenter bonding in solution and the solid state.*
I. Garcia-Yoldi, J. S. Miller, J. J. Novoa.
J. Phys. Chem. A, 113, (2009) 484.
71. *Active sites for H_2 adsorption and activation in Au/TiO₂ and the role of the support.*
M. Boronat, F. Illas, A. Corma.
J. Phys. Chem. A, 113, (2009) 3750-3757.

72. *Time-dependent quantum dynamics study of the Ne + H₂⁺(v=0-9) and D₂⁺(v=0-12) proton transfer reactions at thermal collision energies.*
J. Mayneris-Perxachs, M. González.
J. Phys. Chem. A, 113, (2009) 4105-4109.
73. *Theoretical study of the Electronic Structure of [TCNQ]₂²⁻ (TCNQ = 7,7,8,8-tetracyano-p-quinodimethane) Dimers and Their Intradimer, Long, Multicenter Bond in Solution and the Solid State.*
I. Garcia-Yoldi, J. S. Miller, J. J. Novoa.
J. Phys. Chem. A, 113, (2009) 7124.
74. *Carbon on platinum substrates: From carbidic to graphitic phases on the (111) surface and on nanoparticles.*
F. Viñes, K. M. Neyman, A. Görling.
J. Phys. Chem. A, 113, (2009) 11963-11973.
75. *Guided-ion-beam and ab initio study of the Li⁺, K⁺ and Rb⁺ association reactions with gas phase butanone and cyclohexanone in their ground electronic states.*
J. M. Lucas, J. de Andrés, E. López, M. Albertí, J. M. Bofill, D. Bassi, D. Ascenzi, P. Tosi, A. Aguilar.
J. Phys. Chem. A, 113, (2009) 14766-14773.
76. *A Bohmian Total Potential view to quantum effects III. Tunnelling in phase space.*
M. F. González, J. M. Bofill, X. Giménez.
J. Phys. Chem. A, 113, (2009) 15024-15030.
77. *Tetrahedral Ordering in Water: Raman Profiles and their Temperature Dependence.*
M. Paolantoni, N. Faginas Lago, M. Albertí, A. Laganà.
J. Phys. Chem. A, (doi: 10.1021/jp9052083).
78. *Mechanism of cellulose hydrolysis by inverting GH8 endoglucanases: A QM/MM metadynamics study.*
L. Petersen, A. Ardèvol, C. Rovira, P. Reilly.
J. Phys. Chem. B, 113, (2009) 7331.
79. *Why is the sn-2 chain of monounsaturated glycerophospholipids usually unsaturated whereas the sn-1 chain is saturated? Studies of 1-stearoyl-2-oleoyl-sn-glycero-3-phosphatidylcholine (SOPC) and 1-Oleoyl-2-stearoyl-sn-glycero-3-phosphatidylcholine (OSPC) membranes with and without cholesterol*
H. Martinez-Seara, T. Rog, M. Karttunen, I. Vattulainen, R. Reigada.
J. Phys. Chem. B, 113, (2009) 8347-8356.
80. *A model-independent link between the macroscopic and microscopic descriptions of multidentate macromolecular binding: relationship between stepwise, intrinsic and microscopic equilibrium constants.*
J. L. Garcés, C. Rey-Castro, D. Calin, S. Madurga, F. Mas, I. Pastor, J. Puy.
J. Phys. Chem. B, 113, (2009) 15145-15155.

81. *Density functional theory study of the adsorption of Au atom on cerium oxide: effect of low-coordinated surface sites.*
N. J. Castellani, M. M. Branda, K. M. Neyman, F. Illas.
J. Phys. Chem. C, 113, (2009) 4948-4954.
82. *Mechanism of selective hydrogenation of α,β -unsaturated aldehydes on silver catalysts: A density functional study.*
K. H. Lim, A. B. Mohammad, I. V. Yudanov, K. M. Neyman, M. Bron, P. Claus, N. Rösch.
J. Phys. Chem. C, 113, (2009) 13231-13240.
83. *Effect of the support on the electronic structure of Au nanoparticles supported on transition metal carbides: Choice of the best substrate for Au activation.*
E. Florez, L. Feria, F. Viñes, J. A. Rodriguez, F. Illas.
J. Phys. Chem. C, 113, (2009) 19994-20001.
84. *The Stability of Binary SAMs Formed by α -Acid and Alcohol Functionalized Thiol Mixtures.*
F. Tielens, V. Humblot, C. M. Marie Pradier, M. Calatayud and F. Illas.
Langmuir, 25, (2009) 9980-9985.
85. *Quimiogenómica: Una nueva aproximación al diseño de fármacos.*
L. Delgado-Soler, J. Rubio-Martinez.
LifeSciencesLab, 4, (2009) 40-42.
86. *Mechanism of action of and resistance to quinolone.*
A. Fàbrega, S. Madurga, E. Giralt, J. Vila.
Microb. Biotechnol., 2, (2009) 40-61.
87. *Growth and properties of Au nanowires.*
Roldán, J. M. Ricart, F. Illas.
Mol. Simul., 35, (2009) 1051-1056.
88. *Restricted active space spin-flip configuration interaction approach: theory, implementation and examples.*
D. Casanova, M. Head-Gordon.
Phys. Chem. Chem. Phys., 11, (2009) 9779-9790.
89. *The $\text{OH} + \text{D}_2 \rightarrow \text{HOD} + \text{D}$ angle-velocity distribution: Quasi-classical trajectory calculations on the YZCL2 and WSLFH potential energy surfaces and comparison with experiments at $E_T=0.28$ eV.*
J. D. Sierra, R. Martínez, J. Hernando, M. González.
Phys. Chem. Chem. Phys., 11, (2009) 11520-11527.
90. *Description of magnetic interactions in strongly correlated solids via range-separated hybrid functionals.*
P. Rivero, I. de P.R. Moreira, G. E. Scuseria, F. Illas.
Phys. Rev. B, 79, (2009) 245129.
91. *Nonequilibrium patterns in phase-separating ternary membranes*
J. Gomez, F. Sagués, R. Reigada.
Phys. Rev. E, 80, (2009) 011920-011930.

92. *The origin of the bistability in the thiazyl radical 1,3,5-trithia-2,4,6-triazapentalenyl (TTTA). A first principles bottom-up investigation of the magnetic properties of its high temperature polymorph.*
C. S. Clarke, J. Jornet, M. Deumal, J. J. Novoa.
Polyhedron, 28, (2009) 1614.
93. *On the existence of temperature induced changes in the magnetic topology of crystals that show no first-order crystallographic phase transitions.*
J. Jornet, M. Deumal, M. M. Turnbull, J. J. Novoa.
Polyhedron, 28, (2009) 1965.
94. *Eley-Rideal reaction dynamics between O atoms on β -cristobalite (100) surface: a new interpolated potential energy surface and classical trajectory study.*
C. Arasa, V. Morón, H. F. Busnengo, R. Sayós.
Surf. Sci., 603, (2009) 2742-2751.
95. *The 65th birthday of Professor Santiago Olivella Nello.*
J. M. Anglada, J. M. Bofill, J. M. Lluch.
Theor. Chem. Acc., 123, (2009) 1-2.
96. *Static and dynamic properties of anionic intermolecular aggregates: The I- benzene- Ar_n case.*
M. Albertí, A. Aguilar, J. M. Lucas, F. Pirani.
Theor. Chem. Acc., 123, (2009) 21.
97. *A Bohmian total potential view to quantum effects. II. Decay of temporarily trapped states.*
M. F. González, A. Aguilar-Mogas, J. González, R. Crehuet, J. M. Anglada, J. M. Bofill, X. Giménez.
Theor. Chem. Acc., 123, (2009) 51-58.
98. *Oxidation States, Atomic Charges and Orbital Populations in Transition Metal Complexes.*
G. Aullón, S. Alvarez.
Theor. Chem. Acc., 123, (2009) 67-73.
99. *Uniform linear chains of group 11 atoms: do they have a bias towards a Peierls distortion?*
P. Alemany, M. Llunell, E. Canadell.
Theor. Chem. Acc., 125, (2009) 85-92.
100. *Analysis of the basis set and correlation effects on the computation of molecular polarizabilities using molecular polarization maps.*
Lurdes Roset, Jaime Rubio-Martinez, Juan J. Perez
Theor. Chem. Acc., 123, (2009) 113-118.
101. *Influence of the exchange-correlation potential on the description of the molecular mechanism of oxygen dissociation by Au nanoparticles.*
Roldán, J. M. Ricart, F. Illas.
Theor. Chem. Acc., 123, (2009) 119-126.
102. *Ion binding to polyelectrolytes. Monte Carlo simulations versus classical mean field theories.*
S. Madurga, J. L. Garcés, E. Companys, C. Rey-Castro, J. Salvador, J. Galceran, E. Vilaseca, J. Puy, F. Mas.
Theor. Chem. Acc., 123, (2009) 127-135.

103. Long, *Multicenter Bonding in π -[thiophene]₂²⁺ dimers*.
I. Garcia Yoldi, J. S. Miller, J. J. Novoa.
Theor. Chem. Acc., 123, (2009) 137.

CAPÍTOLS DE LLIBRES I *PROCEEDINGS* (2008)

1. *From bonds to packing: an energy-based cristal packing analysis for molecular crystals.*
J. J. Novoa, E. D'Oria.
Engineering of Crystalline Materials Properties. Springer, Dordrecht (2008), 307.
2. *Theoretical study of O₂ dissociation and reflection on the β -cristobalite (100) surface.*
V. Morón, C. Arasa, R. Sayós, H. F. Busnengo.
AIP Conference Proceedings, 1084, (2008) 682-687
3. *Time-Dependent Density Functional Theory from a Bohmian Perspective.*
A. S. Sanz, X. Giménez, J. M. Bofill, S. Miret-Artés.
Theory of Chemical Reactivity: A Density Functional View. Taylor & Francis Group, London (2008) 105-119.
4. *Small water clusters: the cases of rare gas-water, alkali ion-water and water dimers.*
M. Albertí, A. Aguilar, M. Bartolomei, D. Cappelletti, A. Laganà, J. M. Lucas, F. Pirani.
Lecture Notes in Computer Science, 5072, (2008) 1026
5. *Electronic structure and reaction mechanisms of heme peroxidases.*
C. Rovira.
Proceedings of the 9th European Biological Inorganic Chemistry Conference (EUROBIC 9), (2008) 21-23.

CAPÍTOLS DE LLIBRES I *PROCEEDINGS* (2009)

1. *Theoretical dynamics study of several atomic and molecular oxygen processes over silica surface.*
R. Sayós, V. Morón, C. Arasa, H. F. Busnengo.
Proceedings of the Sixth European Symposium on Aerothermodynamics for Space Vehicles, ESA SP-659, S28, (2009) 1-7.
2. *Ab initio methods for biological systems: state of the art and perspectives.*
L. Guidoni, C. Rovira, M. Sulpizi.
 Ψ_k -newsletter, August issue, (2009).
3. *A Grid Implementation of Direct Semiclassical Calculations of Rate Coefficients.*
A. Costantini, N. Faginas-Lago, A. Laganà, F. Huarte-Larrañaga.
Lecture Notes in Computer Science, 5593, (2009) 93.
4. *Iterative diagonalization of operators.*
F. Huarte-Larrañaga, U. Manthe.
Multidimensional Quantum Dynamics: MCTDH theory and its applications. Ed. Wiley-VCH, Weinheim (2009) 69-72.

5. *Correlation Discrete Variable Representation.*
F. Huarte-Larrañaga, U. Manthe.
Multidimensional Quantum Dynamics: MCTDH theory and its applications. Ed. Wiley-VCH, Weinheim, (2009) 73-80.

6. *MCTDH Calculation of Flux Correlation Functions: Rates and Reaction Probabilities for Polyatomic Chemical Reactions.*
F. Huarte-Larrañaga, U. Manthe.
Multidimensional Quantum Dynamics: MCTDH theory and its applications. Ed. Wiley-VCH, Weinheim (2009) 231-248.

7. *Application of computational methods to study antibiotic resistance mechanisms. Fluoroquinolone resistance as a case study.*
S. Madurga, J. Vila, E. Giralt.
Antibiotic Resistance. Nova Science Publishers, Inc. (2009).

III.5. Altres activitats

TESIS DOCTORALS 2008

Racionalización de la estructura cristalina mediante métodos ab initio.

Emiliana D'Oria

Facultat de Química, Universitat de Barcelona.

Març 2008.

Estudio teórico de procesos de adsorción específica en monocapas.

David Tur Tur

Facoltà di Chimica, Università degli Studi di Milano-Bicocca.

Desembre 2008.

Estudio de la estructura y reactividad de superficies y nanopartículas de carburos de metales de transición.

Francesc Viñes Solana

Facultat de Química, Universitat de Barcelona.

2008.

Diseño asistido por ordenador de inhibidores de las dianas terapéuticas Bcl-X_L/Bcl-2 y TTR.

Marta Pinto Manresa

ETSEI, Universitat de Barcelona.

Juliol 2008.

Disrupting the protein-protein recognition in cancer pathways by molecular modeling.

Cristian Obiol Pardo

Facultat de Química, Universitat de Barcelona.

Octubre 2008.

TESIS DOCTORALS 2009

Estudio teórico de la dimerización entre iones radicales en cristales moleculares de interés tecnológico.

Íñigo García Yoldi

Facultat de Química, Universitat de Barcelona.

Gener 2009.

Grid Enabled Distributed Computing: from Molecular Dynamics to Multiscale Simulations.

Alessandro Costantini

Facultat de Chimica, Universitat de Perugia.

2009

Theoretical study of the reactivity of catalases by means of ab initio molecular dynamics.

Mercedes Alfonso Prieto

Institut de Biotecnologia i Biomedicina (IBB), Universitat Autònoma de Barcelona.

Desembre 2009.

MÀSTERS 2008

Estudi teòric de la naturalesa de les interaccions C-Br...Br-C en cristalls moleculars.

Marçal Capdevila i Cortada

Facultat de Química, Universitat de Barcelona.

Setembre 2008.

Interacció de l'oxigen atòmic i molecular amb grafit: estudi DFT, cinètic i dinàmic.

Victor Morón Tejero

Facultat de Química, Universitat de Barcelona.

Juny 2008.

Estudi de la dinàmica molecular mitjançant el model de clústers i frontisses.

Abel Carreras Conill

Facultat de Química, Universitat de Barcelona.

Setembre 2008.

Simulation of CASSCF results via MMVB: study of benzene and perylene+ surface crossings.

David Mendive

Facultat de Química, Universitat de Barcelona.

Octubre 2008.

MÀSTERS 2009

Estudi Teòric de les Interaccions entre Àtoms de Plati i la Superfície (111) del CeO₂.

Albert Bruix Fusté

Facultat de Química, Universitat de Barcelona.

Setembre 2009.

Estudio teórico de la desproporción del radical hidroxilo sobre una superficie (100) de carburo de titanio.

Cristina Charneco Rosales

Facultat de Química, Universitat de Barcelona.

Setembre 2009.

Aplicació del quantum reaction path hamiltonian a la reacció de bescanvi d'hidrogen amb variacions isotòpiques.

Marc Caballero Puig

Facultat de Química, Universitat de Barcelona.

Setembre 2009.

Dinàmica de Reacció amb transicions no adiabàtiques.

Javier Aguilar Fargas

Facultat de Química, Universitat de Barcelona.

Setembre 2009.

PARTICIPACIÓ A CONGRESSOS 2008

Ab Initio Simulation of Crystalline Solids: History and Prospects

Torino (Itàlia), 2008.

How similar is the electronic and magnetic structure of LaOAsFe to that of cuprate superconducting parent compounds?

F. Illas.

Ab Initio Modelling in Applied Biosciences: Structure, Dynamics and Function

Uppsala (Suècia), 2008.

Substrate conformational changes in carbohydrate-binding enzymes: glycoside hydrolases.

C. Rovira.

The 59th Annual Meeting of the International Society of Electrochemistry

Sevilla (Espanya), 2008.

Metal interactions with heterogeneous environmental matter.

J. Puy, C. David, J. L. Galceran, J. L. Garcés, E. Companys, C. Rey-Castro, F. Mas, J. Salvador.

7th Brazilian MRS Meeting

Guaraja, Sao Paulo (BRASIL), 2008.

Prediction of new polymorphs of old materials from a bottom-up approach using density functional theory calculations.

F. Illas.

Chemodynamics of Ecosystems

Monte Verita (Suïssa), 2008.

New measuring and interpretative techniques for trace metal speciation. From AGNES to Conditional Affinity Spectra.

J. L. Galceran, E. Companys, C. Huidobro, J. L. Garcés, J. Salvador, F. Mas, J. Puy.

Describing metal interactions with heterogeneous environmental matter.

J. Puy, C. David, J. L. Galceran, J. L. Garcés, E. Companys, C. Rey-Castro, F. Mas, J. Salvador.

CPMD2008 Conference on modeling and computation of structure and dynamics condensed phase systems

Trieste (Itàlia), 2008.

The reaction mechanisms of heme peroxidases. A QM/MM investigation.

C. Rovira.

Computational Nanoalloys

Pisa (Itàlia), 2008.

Density-functional studies of bimetallic nanostructures relevant to catalysis and beyond

K. M. Neyman.

Computational Science and its applications- ICCSA 2008

Perugia (Itàlia), 2008.

Small water clusters: The cases of Rare-gas water and water dimer.

M. Albertí, A. Aguilar, M. Bartolomei, D. Cappelletti, J. M. Lucas, A. Laganà, A., F. Pirani.

Conference on Molecular Simulations in Biosystems and Material Science (SimBioMat)

Konstanz (Alemanya), 2008.

A Monte Carlo simulation method for specific ion binding to polyelectrolyte systems.

S. Madurga, E. Vilaseca, C. Rey-Castro, J. L. Garcés, J. Puy, F. Mas.

Effect of double bond position in unsaturated phosphatidylcholine bilayers.

H. Martinez-Seara, R. Reigada.

XXI Conference on 'Statistical Mechanics and Molecular Biophysics' (EMBO)

Sitges (Espanya), 2008.

Theoretical study of lipid raft formation in cell membrane.

J. Gomez, R. Reigada.

Anomalous diffusion of alpha.chymotrypsin due to molecular crowding.

I. Pastor, J. L. Garcés, S. Madurga, E. Vilaseca, A. Isvoran, M. Cascante, F. Mas.

In Silico study of enzymatic diffusion controlled reactions in crowded med.

L. Pitulice, E. Vilaseca, A. Isvoran, L. Unipan, J. L. Garcés, F. Mas.

I Congreso Nacional de Estudiantes y II Jornadas de Ingeniería Química

Loja (Equador), 2008.

Diseño de materiales con aplicaciones tecnológicas

J. J. Novoa.

1st CTP Workshop on the Dynamics of Elementary Processes at the Gas/Solid Interfaces

Burdeos (França), 2008.

Quasiclassical trajectory study of some elementary processes involving oxygen over a silica surface.

R. Sayós, V. Morón, C. Arasa, H. F. Busnengo.

Electronic Structures: Principles and Applications (ESPA)

Palma de Mallorca (Espanya), 2008.

The nature of the C-Br...Br-C in crystals.

M. Capdevila-Cortada, J.J.Novoa.

The nature of the long distance bonds in crystals and solution

I. Garcia-Yoldi, F. Mota, J. S. Miller, J. J. Novoa.

Ab initio study of the light-induced excited state spin trapping (LIESST) in Fe and Co complexes

B. Ordejón, C. de Graaf, C Sousa.

Application of the continuous symmetry measures to flexible molecules: chirality in simple biphenyl derivatives.

N. Merchán, A. Carreras, M. Llunell, P. Alemany.

A restricted quantum reaction path hamiltonian for large polyatomic systems.

J. González, X. Giménez, J. M. Bofill.

Caracterización Electrónica del Centro Activo del Fotosistema II.

E. Cremades, G. Aullón, J. Cano.

X Escuela Nacional de Materiales Moleculares

Elx (Espanya), 2008.

Ingeniería cristalina de materiales moleculares

J. J. Novoa.

ESF-EMBO Symposium "Protein Design and Evolution for Biocatalysis"

Sant Feliu de Guixols (Espanya), 2008.

QM/MM investigation of the reactions of the hepatitis C virus NS3 protease with its main natural substrates. Reaction mechanism and molecular dynamics simulations

A. Rodríguez, C. Oliva, M. González.

ESF Workshop on Electrostatic Effects in Soft Matter

Bellaterra, Barcelona (Espanya), 2008.

Electrostatic and specific binding to polyelectrolyte ligands.

F. Mas, S. Madurga, E. Vilaseca, C. Rey-Castro, J. L. Garcés, J. Puy.

4th EuCheMS Conference on Nitrogen Ligands.

Garmisch-Partenkirchen (Alemanya), 2008.

Coordination Spheres and Supramolecular Buildings from a Polyhedral Point of View.

S. Alvarez.

On the Hapticity of Scorpionato Ligands in Rhodium(I) Complexes.
G. Aullón.

9th European Biological Inorganic Chemistry Conference (EUROBIC9)
Wroclaw (Polònia), 2008.

The reaction mechanisms of heme peroxidases by first-principles simulations.
C. Rovira.

European Conference on Dynamics of Molecular Systems MOLEC XVII
St. Petersburg (Rússia), 2008.

Molecular Dynamics simulations of gas adsorption in Carbon Nanotubes.
F. Huarte Larrañaga.

9th European Meeting on Environmental Chemistry
Girona (Espanya), 2008.

Metal speciation: measuring with AGNES and interpreting with Conditional Affinity Spectra.
J. Galceran, J. Cecília, E. Companys, C. David, J. L. Garcés, C. Huidobro, F. Mas, S. Mongin, C. Rey-Castro, J. Salvador, J. Puy.

Functional Materials and Nanotechnologies
Riga (Letònia), 2008.

Density functional modeling of nanomaterials: Beyond the approach of ideal surfaces in catalysis.
K. M. Neyman.

GECOM – CONCOORD
Dourdan (França), 2008.

Étude de la Coordination du Diazote par des Métaux du Groupe 4.
B. Peigné, G. Aullón, J. Cano.

Gordon Research Conference on Macromolecular organization & Cell Function
Oxford (Anglaterra), 2008.

Anomalous diffusion of β -chymotrypsin due to molecular crowding.
I. Pastor, J. L. Garcés, S. Madurga, E. Vilaseca, A. Isvoran, M. Cascante, F. Mas.

Grand Challenges in Computational Biology (Joint BSC - IRB Barcelona Conference)
Barcelona (Espanya), 2008.

Comparative AM1/MM Study of the Reaction Mechanism of the Hepatitis C Virus NS3 Protease with the Three Main Natural Substrates
A. Rodríguez, C. Oliva, M. González.

GRIDCHEM Joint Meeting

Barcelona (Espanya), 2008.

Grid-MCTDH : $k(T)$ calculation of $N + N_2$.

F. Huarte Larrañaga.

GRIDCHEM QDYN Specialized workshop

Bologna (Itàlia), 2008.

Grid-MCTDH : structure of the wavefunction.

F. Huarte Larrañaga.

9th Iberian Joint Meeting on Atomic and Molecular Physics IBER 2008

Capuchos (Portugal), 2008.

Structural order in water predicted by molecular dynamics.

N. Faginas Lago, M. Paolantoni, A. Laganà, A. Aguilar, M. Albertí.

Experimental and theoretical study of Ion-molecule processes using Guided Ion Beams techniques: adduct formation and chemical reactions.

Aguilar, J. M. Lucas, J. De Andrés, J. Sogas, M. Albertí, J. M. Bofill, D. Bassi, D. Ascenzi, P. Tosi, F. Pirani.

Innovation in crystal polymorphism

Bologna (Itàlia), 2008.

Implementing PIXEL potentials for the optimization of crystal structures.

J. J. Novoa.

37th Inorganic Reaction Mechanisms Group Meeting (IRMG)

Barcelona (Espanya), 2008

Polyhedral Shape Measures as Reaction Coordinates.

S. Alvarez, D. Casanova, J. Cirera, P. Alemany, E. Ruiz, D. Avnir.

On the Mechanism for the Cyclopalladation Reaction in Acidic Media.

G. Aullón, R. Chat, M. Gómez, J. Granell, M. Martínez.

38th International Conference on Coordination Chemistry (ICCC)

Jerusalem (Israel), 2008.

Quantitative measures of symmetry loss: applications in transition metal chemistry.

J. Echeverría, D. Casanova, M. Lluell, P. Alemany, S. Alvarez.

Spin and Stereochemistry of Four-coordinate Transition Metal Compounds: Continuous Shape Measures and DFT Computational Analysis

J. Cirera, E. Ruiz, S. Alvarez.

International Conferences on Molecular Magnetism (ICMM)

Firenze (Itàlia), 2008.

Temperature-dependent magnetic topology: the (2,3-dmpyH)₂CuBr₄ and β -p-NCC₆F₄CN₂SSN cases.

J. Jornet-Somoza, M. Deumal, M. A. Robb, M. M. Turnbull, C. P. Landee, J. M. Rawson, J. J. Novoa.

Theoretical study of the magnetic properties of the 1D system CuPz(NO₃)₂.

J. J. Novoa.

The keys of the bistability in molecular magnetic TTTA crystals.

J. J. Novoa.

A detailed theoretical study on the Mn₁₂ single-molecule magnet.

J. Cano, E. Ruiz, S. Alvarez.

23rd International Conference on Organometallic Chemistry

Rennes (França), 2008.

On the Searching the Catalytic Mechanism for the Cyclopalladation Reaction in Acidic Media.

G. Aullón, R. Chat, M. Gómez, J. Granell, M. Martínez.

12th International Conference on Theoretical Aspects of Catalysis

Varna (Bulgària), 2008.

Towards realistic models of catalysts: Density functional studies of nanoscale materials

K. M. Neyman.

5th International Meeting on Photodynamics

La Habana (Cuba), 2008.

Small water clusters.

M. Albertí, A. Aguilar, J. M. Lucas, M. Bartolomei, D. Capelletti, A. Laganà and F. Pirani.

Ion-molecule processes studied by Guided Ion Beams techniques and their theoretical interpretation: adduct formation, charge transfer processes and chemical reactions.

J. M. Lucas, J. De Andrés, J. Sogas, M. Albertí, A. Aguilar, D. Bassi, D. Assenzi, P. Tosi, F. Pirani.

26th International Symposium on Rarefied Gas Dynamics (RGD26)

Kioto (Japó), 2008.

Theoretical study of O₂ dissociation and reflection on the β -cristobalite (100) surface.

V. Morón, C. Arasa, R. Sayós, H. F. Busnengo.

9th International Workshop on State-of-the-Art in Scientific and Parallel Computing
Trondheim (Noruega), 13-16 mayo 2008

Exchange Interactions in Large Polynuclear Transition Metal Complexes.
E. Ruiz.

I Jornada de Jóvenes Investigadores en Física Atómica y Molecular
Madrid (Espanya), 2008.

Estudio teórico de procesos del oxígeno molecular sobre β -cristobalita.
V. Morón, R. Sayós, C. Arasa, H. F. Busnengo.

Meeting of the World Association of Theoretical and Computational Chemists (WATOC)
Sydney (Austràlia), 2008.

Mechanism of Heterogeneously Catalyzed Ethene and Propene Epoxidation: Role of Halogens as Selectivity Promoters
F. Illas.

MOLEC-2008 XVII European Conference on Dynamics of Molecular Systems
Sant Petesburg (Rusia), 2008.

Theoretical and experimental RFGIB study of some ion-molecule reactions.
J. M. Lucas, J. De Andrés, M. Albertí, J. Sogas, J. M. Bofill, D. Ascenzi, P. Tosi, D. Bassi, A. Aguilar.

Theoretical Ion-molecule processes studied by Guided Ion Bemas techniques: alkali ion molecule adduct formation.
J. M. Lucas, J. De Andrés, M. Albertí, J. Sogas, J. M. Bofill, D. Ascenzi, P. Tosi, D. Bassi, A. Aguilar.

Morphology and dynamics of nanostructures and disordered materials via atomic-scale modelling (EMRS Symposium)
Warsaw (Polònia), 2008.

Substrate conformational changes in carbohydrate-binding enzymes. Insights from ab initio simulations.
C. Rovira.

235th National Meeting of the American Chemical Society. Symposium on Bioenergy and Carbohydrate Structure: Modeling and Experiment
New Orleans (EUA), 2008.

First principles simulations of substrate distortion in β -glycoside hydrolases.
C. Rovira.

New Trends in Crystal Engineering

Barcelona (Espanya), 2008.

On the nature of the intermolecular interactions found in molecular crystals of technological interest

J. J. Novoa.

NOSIC-3 (Not Strictly Inorganic Chemistry)

Prullans de Cerdanya (Espanya), 2008.

Beer: Reflections of a Physical Chemist

P. Alemany.

XIème Rencontre des Chimistes Théoriciens Francophones

Dinard (França), 2008.

Délocalisation de Spin au sein des Systèmes Fe_2S_2 .

B. Peigné, G. Aullón, J. Cano.

Propriétés Magnétiques de Complexes Polynucleaires avec Métaux de Transition: un étude théorique.

E. Ruiz.

XXIV Reunió de la Xarxa de Química Teòrica i Computacional de Catalunya

Girona (Espanya), 2008.

Performance of Plane-Wave-Based LDA plus U and GGA plus U Approaches to Describe Magnetic Coupling in Molecular Systems

P. Rivero, C. Loschen, I. de P. R. Moreira, F. Illas.

Density functional studies of coinage metal nanoparticles: scalability of their properties to bulk density functional studies of coinage metal nanoparticles.

A. Roldán.

Un hamiltonià quàntic lligat al camí de reacció.

J. González, X. Giménez, J. M. Bofill.

La reacció $Li^+ + (CH_3)_2CHCl$: estudi experimental RF-GIB i teòric.

A. Aguilar, M. Albertí, J. De Andrés, E. López, J. M. Lucas, J. Sogas, J. M. Bofill, D. Bassi, P. Tosi, D. Ascenzi.

Direct Calculation of kinetic coefficients.

F. Huarte Larrañaga

Reaccions enzimàtiques en situacions de crowding macromolecular.

Pastor, J. L. Garcés, S. Madurga, E. Vilaseca, A. Isvoran, M. Cascante, F. Mas.

V Simposio de Jóvenes Investigadores Sigma-Aldrich

Santiago de Compostela (Espanya), 2008.

The nature of the C-Br...Br-C in crystals

M. Capdevila-Cortada, J. J. Novoa.

Temperature-dependent magnetic topology: the (2,3-dmpyH)₂CuBr₄ and β -p-NCC₆F₄CNSSN cases.

J. Jornet-Somoza, M. Deumal, M. A. Robb, M. M. Turnbull, C. P. Landee, J. M. Rawson, J. J. Novoa.

Estudio teórico QM/MM de reacciones enzimáticas de la proteasa NS3 del virus de la hepatitis C QM/MM

J. A. Martínez, R. Martínez, A. Rodríguez, P. Puyuelo, M. González.

Sixth European Symposium on Aerothermodynamics for Space Vehicles

Versalles (França), 2008.

Theoretical dynamics study of several atomic and molecular oxygen processes over a silica surface.

R. Sayós, V. Morón, C. Arasa, H. F. Busnengo.

Symposium "Bimetallic nanosystems: Tuning chemical and physical properties", Annual Meeting of the German Physical Society

Berlin (Alemanya), 2008.

Density functional studies of bimetallic nanosystems.

K. M. Neyman.

Theoretical chemistry: modeling reactivity from gas phase to biomolecules and solids

Barcelona (Espanya), 2008.

Gas-surface adapted modified Shepard interpolation method for constructing potential energy surfaces

V. Morón, C. Crespos, R. Sayós.

V Trobada de Joves Investigadors dels Països Catalans

Vic (Espanya), 2008.

Tautomeria i propietats electròniques. Síntesi, caracterització, estudi teòric-computacional i determinació experimental de propietats físiques de benzotiazolilaminoacridines tautomèriques

S. Latorre, J. M. Bofill, F. López-Calahorra.

Difusió de proteïnes en situacions de crowding macromolecular.

I. Pastor, J. L. Garcés, S. Madurga, E. Vilaseca, M. Cascante, F. Mas.

PARTICIPACIÓ A CONGRESSOS 2009

3rd Adriatic Meeting on Computational Solutions in the Life Sciences

Primosten (Croàcia), 2009.

QM/MM study of the reaction mechanism of the HCV NS3 protease with its main natural substrates.

A. Rodríguez, J. A. Martínez, C. Oliva, P. Puyuelo, R. Martínez, M. González.

2nd Asian Symposium on Advanced Materials

Shangai (Xina), 2009.

Density functional studies of nanoscale materials: Towards realistic models of catalysts and beyond.

K. M. Neyman.

CCP5 Annual Meeting 2009

Londres (Anglaterra), 2009.

Rationalising polymorphism of inorganic compounds.

M. A. Zwijnenburg.

8th Carbohydrate Bioengineering Meeting

Nàpols (Itàlia), 2009.

Substrate conformational changes in glycoside hydrolase catalysis.

C. Rovira

Computer Simulation of Oxides Workshop

Dublin (Irlanda), 2009.

Chemical bonding, electronic and magnetic structure in LaOFeAs: How different these compounds are from HTC cuprates?

F. Illas.

XXXV Congreso de Químicos Teóricos de Expresión Latina

San Andres (Colòmbia), 2009.

Actividad catalítica de nanoparticulas de Au.

F. Illas.

COST-D41 "Inorganic Oxide Surfaces and Interfaces" WG2 Meeting

Cracow (Polonia), 2009.

Modelling ceria nanoparticles and extended surfaces with irregularities.

K. M. Neyman.

Density-functional studies of nanostructures based on metal oxides.

K. M. Neyman.

Clean and Pt-modified ceria films and nanoparticles: Growth, structure and reactivity.

J. Libuda, K. M. Neyman, A. Bayer, M. M. Branda, S. T. Bromley, A. Bruix, A. Görling, F. Illas, M. P. A. Lorenz, Y. Lykhach, V. Matolin, A. Migani, K. C. Prince, T. Skala, R. Streber, T. Staudt, H.-P. Steinrueck, N. Tsud, G. N. Vayssilov, F. Viñes.

Crystals, Co-Crystals, Salts, Solvates and their Polymorphs: Use, Improvement and Innovation

Bologna (Itàlia), 2009.

Crystal polymorph prediction using PIXEL intermolecular potentials.

E. D'Oria, M. Capdevila-Cortada, J. J. Novoa.

The nature of the C-Br...Br-C in crystals.

M. Capdevila-Cortada, J.J.Novoa

7th EBSA European Biophysics Congress

Genova (Itàlia), 2009.

Behaviour of alpha-chymotrypsin in macromolecular crowding media.

I. Pastor, J. L. Garcés, S. Madurga, E. Vilaseca, M. Cascante, F. Mas.

EGEE Conference

Barcelona (Espanya), 2009.

Grid-MCTDH: quantum calculation of kinetic coefficients.

F. Huarte Larrañaga.

9º Encontro Nacional de Química Física

Aveiro (Portugal), 2009.

Structure and reactivity of new nanomaterials from first principles.

F. Illas.

XII Encuentro de Química Inorgánica de la Sociedad Chilena de Química

Antofagasta (Xile), 2009.

¿Por qué son regulares las cadenas lineales de átomos de metales nobles? La distorsión de Peierls y la estructura electrónica de $Ag_{1.33}Ca_7N_4$.

P. Alemany.

Estudio teórico de la estabilidad de las fases $Li_xK_{1-x}CuFeS_2$ con estructura del tipo $ThCr_2Si_2$.

S. Conejeros, S. Montoya, J. Llanos, V. Sánchez, L. Padilla- Campos, P. Alemany.

Estructura electrònica con polarización de espin para el compuesto $KCuFeS_2$ con estructura del tipo $ThCr_2Si_2$.

S. Conejeros, S. Montoya, J. Llanos, V. Sánchez, L. Padilla- Campos, P. Alemany.

Barreras de migración del cobre y litio en el compuesto $LiCuFeS_2$ con estructura tipo $CaAl_2Si_2$ y $ThCr_2Si_2$ y voltajes de intercalación promedio.

S. Conejeros, S. Montoya, J. Llanos, V. Sánchez, L. Padilla- Campos, P. Alemany.

La música de la química.

S. Alvarez.

Forma y spin de complejos tetracoordinados de tipo Werner y organometálicos.

S. Alvarez.

Propiedades magnéticas de complejos polinucleares de metales de transición: un análisis teórico.

E. Ruiz.

ESOR XII: 12th European Symposium on Organic Reactivity.

Haifa (Israel), 2009.

New Perspectives on Polyhedral Molecules and their Crystal Structures.

S. Alvarez.

European Conference in Molecular Magnetism 09

Wroclaw (Polònia), 2009.

Theoretical study of the 1D-3D magnetic transition.

J. J. Novoa.

Expanding the frontiers of molecular dynamics simulations in biology (Joint BSC - IRB Barcelona Conference)

Barcelona (Espanya), 2009.

QM/MM analysis of the reaction mechanism of the HCV NS3 protease.

A. Rodríguez, J. A. Martínez, C. Oliva, P. Puyuelo, R. Martínez, M. González.

Frontiers in Medicinal Chemistry: Emerging Targets, Novel Candidates and Innovative Strategies

Barcelona (Espanya), 2009.

Structure-Based Discovery of new small-molecule inhibitors of the antiapoptotic protein Bcl-X_L.

M. Pinto, M. del Mar Orzáez, L. Delgado-Soler, E. Pérez-Payá, J. J. Pérez, J. Rubio-Martinez.

GRIDCHEM QDYN Specialized workshop

Catània (Itàlia), 2009.

Insertion reactions within the MCTDH approach.

M. Moix, F. Huarte Larrañaga.

Grid-MCTDH: progress on php control.

F. Huarte Larrañaga.

10th Iberian Joint Meeting on Atomic and Molecular Physics, IBER 2009

Santiago de Compostela (Espanya), 2009.

Adapted modified Shepard interpolation method for gas-surface potential energy surfaces.

V. Morón, C. Crespos, R. Sayós.

The adaptability of the Improved Lennard Jones (ILJ) function.

M. Albertí F. Huarte-Larrañaga, N. Faginas Lago.

Experimental RF-GIB and theoretical study of the formation of some alkali ion-molecule association reactions.

A. Aguilar, J. M. Lucas, J. De Andrés, E. López, M. Albertí, J. M. Bofill, D. Bassi, D. Ascenzi, P. Tosi.

Direct calculation of kinetic coefficients.

F. Huarte Larrañaga.

International Workshop on Computational Catalysis

Munich (Alemanya), 2009.

Formation and characterization of C deposits on Pd catalysts: DFT studies on representative nanoparticles.

K. M. Neyman.

XX Italian-Spanish Congress on Thermodynamics of Metal Complexes (ISMEC2009)

Pisa (Itàlia), 2009.

Thermodynamical aspects of macromolecular binding. Environmental application.

C. David, S. Monguin, J. L. Galceran, J. L. Garcés, E. Companys, C. Rey-Castro, F. Mas, J. Salvador, J. Puy.

Jujols IV

Groningen (Països Baixos), 2009.

Performance of RSH functionals to describe magnetic coupling in dinuclear copper compounds & strongly correlated solids.

P. Rivero Moreno, I. de P. R. Moreira, F. Illas.

NANOTECH Insight Conference

Bellaterra (Espanya), 2009.

Molecular Dynamics simulations of Gas adsorption in Carbon Nanotubes.

F. Huarte Larrañaga.

New Tendencies in Computational Biophysics

Timisoara (Romania), 2009.

Non-classical diffusion and enzymatic kinetics.

F. Mas, I. Pastor, J. L. Garcés, S. Madurga, L. Unipan, E. Vilaseca, A. Isvoran, M. Cascante.

Monte Carlo simulations of reaction-diffusion processes in crowded media.

E. Vilaseca, J. L. Garcés, I. Pastor, S. Madurga, L. Pitulice, A. Isvoran, M. Cascante, F. Mas.

XXXII Reunión Bienal de la Real Sociedad Española de Química

Oviedo (Espanya), 2009.

Estudio Comparativo QM/MM de la SEP de la reacción de la proteasa NS3 del virus de la hepatitis C con el sustrato NS5A/5B.

J. A. Martínez, R. Martínez, A. Rodríguez, P. Puyuelo, M. González.

Forma y spin de complejos tetracoordinados de tipo Werner y organometálicos

S. Alvarez.

III Reunión Ibérica de Coloides e Interfases (RICI3) & VIII Reunión del Grupo Especializado de Coloides e Interfases (GECI)

Granada (Espanya), 2009.

Monte Carlo simulations of proton binding to ionizable surfaces.

S. Madurga, J. L. Garcés, C. Rey-Castro, I. Pastor, E. Vilaseca, J. Puy, F. Mas.

Macromolecular diffusion process of alpha-chymotrypsin in crowded media.

I. Pastor, J. L. Garcés, S. Madurga, E. Vilaseca, M. Cascante, F. Mas.

Summer School on Simulation Approaches to Problems in Molecular and Cellular Biology (CECAM/Psi_k school)

Donostia (Espanya), 2009.

Substrate conformational changes in glycoside hydrolase catalysis / The reaction mechanisms of heme peroxidases by first-principles simulations.

C. Rovira

Theoretical Chemistry: Modeling Reactivity from Gas Phase to Biomolecules and Solids
 Barcelona (Espanya), 2009.

The nature of the C-Br...Br-C in crystals.

M. Capdevila-Cortada, J. J. Novoa.

Temperature-dependent magnetic topology: the (2,3-dmpyH)₂CuBr₄ and β-p-NCC₆F₄CN₂SSN cases.

J. Jornet-Somoza, M. Deumal, M. A. Robb, M. M. Turnbull, C. P. Landee, J. M. Rawson, J. J. Novoa.

A first principles bottom-up theoretical study of a series of tetrabromocuprates: from spin-ladders to 3D magnetic topologies.

M. Deumal, J. Jornet-Somoza, M. A. Robb, M. M. Turnbull, J. J. Novoa.

Gas-surface adapted modified Shepard interpolation method for constructing potential energy surfaces.

V. Morón, C. Crespos, R. Sayós.

The effect of local environment on photoluminescence: a TD-DFT study of silanone groups on the surface of silica nanostructures.

M. A. Zwijnenburg, A. A. Sokol, C. Sousa, S. T. Bromley.

Light-induced excited state spin trapping (LIESST) in Fe(II) spin crossover systems.

C. Sousa, C. de Graaf.

The Peierls distortion in uniform zigzag or linear metal chains.

P. Alemany, M. Lluell, E. Canadell.

A restricted quantum reaction path hamiltonian for large polyatomic systems.

J. González, X. Giménez, J.M. Bofill.

Anion-π interactions: The X-benzene adducts (X=F, Cl, Br, I).

M. Albertí, A. Aguilar, J.M. Lucas, F. Pirani.

A statistical mechanics approach to study ion binding to charged colloids.

F. Mas, S. Madurga, J. L. Garcés, E. Companys, C. Rey-Castro, C. David, I. Pastor, J. Salvador, J. L. Galceran, E. Vilaseca, J. Puy.

Monte Carlo simulations of proton binding to ionizable surfaces.

S. Madurga, J. L. Garcés, C. Rey-Castro, I. Pastor, E. Vilaseca, J. Puy, F. Mas.

Macromolecular diffusion process of alpha-chymotrypsin in crowded media.

I. Pastor, J. L. Garcés, S. Madurga, E. Vilaseca, M. Cascante, F. Mas.

Workshop “Structure Prediction for clusters”

Londres (Anglaterra), 2009.

What global optimization can do for spectroscopy.

M. A. Zwijnenburg.

ESTADES EN CENTRES DE PRESTIGI 2008

- M. Albertí Wirsing **Università di Perugia, Perugia (Itàlia)**
Modelització de l'aigua. Flexibilitat de la funció ILJ per adaptar-se a diferents entorns electrostàtics.
 2008 (2.5 mesos)
- Università di Perugia, Perugia (Itàlia)**
Estudio de la formación e inhibición de clatratos de moléculas gaseosas mediante métodos de la Dinámica Molecular.
 2008 (4 mesos)
- P. Alemany **Universidad Católica del Norte, Antofagasta (Xile)**
Estudi teòric de propietats òptiques de fòsfors inorgànics.
 2008 (3 setmanes)
- Universidad Católica del Norte, Antofagasta (Xile)**
Estudi teòric de propietats òptiques de fòsfors inorgànics.
 2008 (2 setmanes)
- M. Deumal **Imperial College, Londres (UK)**
Anàlisi microscòpic de propietats magnètiques.
 2008 (2 mesos)
- I. García-Yoldi **University of California (Berkeley), Berkeley (EUA)**
Estudi de la dimerització de ions-radicals.
 2008 (3 mesos)
- J. Jornet-Somoza **Imperial College, Londres (UK)**
Programació d'un codi per a l'anàlisi de propietats magnètiques.
 2008 (2 mesos)
- J. J. Novoa **University of Utah, Salt Lake City (EUA)**
Estudi d'enllaços a llarga distància.
 2008 (1 mes)
- P. Rivero **Rice University, Houston (EUA)**
Molècules i òxids amb propietats magnètiques.
 2008 (3 mesos)

- V. Morón Tejero **Université Bordeaux, Institute des Sciences Moléculaires, Bordeus (França)**
Desenvolupament del mètode d'interpolació de Shepard per a la construcció de superfícies d'energia potencial en sistemes gas-superfície sòlida en coordenades cartesianes. Aplicació a alguns processos químics d'interès en la indústria aeroespacial.
2008 (11 setmanes)
- D. Tur **Università degli Studi di Milano-Bicocca, Milà (Itàlia)**
Estudi de les propietats elèctriques en sensors.
2008 (2 mesos)

ESTADES EN CENTRES DE PRESTIGI 2009

- P. Gamallo Belmonte **Université Bordeaux, Institute des Sciences Moléculaires, Bordeus (França)**
a) Desenvolupament del mètode FPLEPS per a la construcció de superfícies d'energia potencial analítiques en sistemes gas-superfície sòlida i b) construcció de models cinètics per a l'estudi de la interacció de fluxos d'aire sobre sílice.
2009 (3 mesos)
- J. Gomez **Weizmann Institute, Rehovot (Israel)**
Inserció i efecte de proteïnes integrals en membranes lipídiques.
2009 (2 mesos)
- J. Jornet-Somoza **Imperial College, Londres (UK)**
Anàlisi microscòpic de propietats magnètiques.
2009 (3 mesos)
- H. Martinez-Seara **Helsinki University of Technology, Helsinki (Finlàndia)**
Dinàmica Molecular de membranes lipídiques.
2009 (6 mesos)
- Francesc Mas **University of West Timisoara, Tlisoara (Romania)**
Computational Biophysics.
2009 (1 setmana)
- V. Morón Tejero **Université Bordeaux, Institute des Sciences Moléculaires, Bordeus (França)**
Desenvolupament del mètode d'interpolació de Shepard per a la construcció de superfícies d'energia potencial en sistemes gas-superfície sòlida en coordenades cartesianes. Aplicació a alguns processos químics d'interès en la indústria aeroespacial.
2009 (13 setmanes)

- J. J. Novoa **University of Utah, Salt Lake City (EUA)**
Estudi d'enllaços a llarga distància.
2009 (1 mes)
- R. Reigada **Weizmann Institute, Rehovot (Israel)**
Inserció i efecte de proteïnes integrals en membranes lipídiques.
2009 (1 mes)
- P. Rivero **University College of London Londres (UK)**
Dopatge en òxids magnètics.
2009 (3 mesos)
- A. Roldán **Universita Milano-Bicocca, Milà (Itàlia)**
Catalytic activity of gold nanoparticles supported on MgO step.
2009 (3 mesos)
- Eudald Vilaseca **University of West Timisoara, Tlisoara (Romania)**
Computational Biophysics.
2009 (1 setmana)

PARTICIPACIÓ EN PROJECTES D'INVESTIGACIÓ

Materiales moleculares magnéticos: estudio teórico de su arquitectura y del mecanismo de la interacción magnética.

Juan J. Novoa, Universitat de Barcelona.

CTQ2005-02329/BQU, 2005-2008.

Ministerio de Educación y Ciencia (MEC).

Mecanismos de las reacciones de transferencia de hidrógeno en la química de la atmósfera. Transferencia de átomo de hidrógeno (HAT) versus transferencia de electrón acoplada a protón (PCET).

Josep Maria Anglada Rull, CSIC.

CTQ2005-07790, 2005-2008.

Ministerio de Educación y Ciencia (MEC).

Modelización ab initio a escala molecular, nanoscópica y macroscópica de materiales de interés tecnológico.

Francesc Illas Riera, Universitat de Barcelona.

CTQ2005-08459-C02-01/BQU, 2005-2008.

Ministerio de Ciencia e Innovación (MICINN).

Estudio teórico y experimental de la dinámica y cinética de reacciones químicas. Química atmosférica, procesos de combustión y algunas aplicaciones a sistemas con un número elevado de átomos.

Miguel González Pérez, Universitat de Barcelona.

CTQ2005-09334-C02-01, 2005-2008.

Ministerio de Educación y Ciencia (MEC).

Grup d'Estructura Electrònica.

Santiago Álvarez, Universitat de Barcelona.

2005SGR00036, 2005-2009.

Generalitat de Catalunya.

Química Teòrica i Computacional.

Santiago Olivella Nel.lo, CSIC.

2005SGR00111, 2005-2008.

Generalitat de Catalunya.

Dinàmica de reaccions químiques.

Antonio Aguilar Navarro, Universitat de Barcelona.

2005SGR00126, 2005-2009.

Generalitat de Catalunya.

Ajut pel desenvolupament de projectes d'investigació en curs.

Miguel González Pérez, Universitat de Barcelona.

2005SGR00175, 2005-2008.

Generalitat de Catalunya.

Fisicoquímica de sistemas macromoleculares o col·loids d'interès ambiental.

Jaume Puy Llorens, Universitat de Lleida.

2005SGR00616, 2005-2009.

Generalitat de Catalunya.

Grup de Química Quàntica de Materials (GQQM).

Francesc Illas Riera, Universitat de Barcelona.

2005SGR00697, 2005-2009.

Generalitat de Catalunya.

Estructura electrónica y propiedades de moléculas y sólidos inorgánicos.

Pere Alemany i Cahner, Universitat de Barcelona.

BQU2005-08123-C02-01, 2006-2008.

Plan Nacional de I+D+I (2004-2007).

Fisicoquímica de las interacciones de los metales con biogeles en medios acuáticos naturales.

Francesc Mas Pujadas, Universitat de Barcelona.

CTM2006-13583-C02-02, 2006-2009.

Ministerio de Educación y Ciencia (MEC).

Estructura, dinámica y mecánica bohmianna: del enlace químico a la constante de velocidad de sistemas orgánicos y bioorgánicos.

Josep Maria Bofill Villà, Universitat de Barcelona.

CTQ2005-01117, 2006-2008.

Ministerio de Educación y Ciencia (MEC).

Dinámica molecular de reacciones gas-superficie sólida: modelización y estudio teórico en condiciones de no equilibrio térmico.

Ramón Sayós Ortega, Universitat de Barcelona.

CTQ2006-02195, 2006-2009.

Ministerio de Educación y Ciencia (MEC).

Obtención de compuestos con actividad farmacológica mediante la disrupción de las interacciones proteína-proteína e implementación de software para su estudio.

Jaime Rubio Martínez, Universitat de Barcelona.

CTQ2006-06588/BQU, 2006-2009.

Ministerio de Educación y Ciencia (MEC).

Modelización de procesos reactivos en proteínas y de interacción biomolécula-superficie mediante métodos de primeros principios.

M. Carme Rovira Virgili, Parc Científic de Barcelona.

FIS2005-00655, 2006-2008.

Ministerio de Educación y Ciencia (MEC)

Grup d'estructura electrònica, ajut per a grup de recerca consolidat.

Santiago Álvarez Reverter, Universitat de Barcelona.

2005SGR00036, 2006-2008.

Generalitat de Catalunya.

Dinàmica de reaccions atmosfèriques i sistemes complexos.

Miguel González Pérez, Universitat de Barcelona.

2005SGR00175, 2006-2008.

Generalitat de Catalunya.

Utilización de oxitelenuros de iones trivalentes como redes anfitrionas en la obtención de fósforos inorgánicos.

Jaime Llanos Silva, Universidad Católica del Norte (Xile).

CONICYT, 2007-2008.

GRIDCHEM.

H.P. Lüthi, EPFL (Lausanne).

COST-D37, 2007-2010.

European Science Foundation (COST).

Dinámica de reacciones: Haces moleculares y dinámica de procesos químicos.

Antonio Aguilar Navarro, Universitat de Barcelona.

CTQ2007-61109, 2007-2010.

Ministerio de Educación y Ciencia (MEC).

Acció Integrada Hispano-Alemanya.

Konstantin M. Neyman, Universitat de Barcelona.

HA2006-0102, 2007-2009.

Ministerio de Ciencia e Innovación (MICINN).

Autoorganización en materia blanda: materiales autoensamblantes, fluidos complejos y sistemas biológicos.

Francesc Sagués Mestre, Universitat de Barcelona.

Proyecto Eje-C / CONSOLIDER, 2007-2012.

Ministerio de Ciencia y Tecnología (MITYC).

Processos catalítics en fluxes hipersònics: estudi teòric des de primers principis.

Ramón Sayós Ortega, Universitat de Barcelona.

CESCA2008, 2008.

Ajuts a la Recerca (Universitat de Barcelona)

Utilización de oxitelenuros de iones trivalentes como redes anfitrionas en la obtención de fósforos inorgánicos.

Jaime Llanos Silva, Universidad Católica del Norte (Xile).
CONICYT, 2008-2009.

Controlling Selectivity via Nanostructuring of Multifunctional Model Catalysts.

Francesc Illas Riera, Universitat de Barcelona.
CTQ2007-30547-E/BQU, 2008-2011.
Ministerio de Ciencia e Innovación (MICINN).

Teoría y modelización de reacciones poliatómicas y simulación de procesos heterogéneos.

Fermín Huarte Larrañaga, Parc Científic de Barcelona.
CTQ2008-06000/BQU, 2008-2009.

Ministerio de Ciencia e Innovación (MICINN).

Acció integrada entre Espanya i Portugal.

Francesc Illas Riera, Universitat de Barcelona.
HP2007-0042, 2008-2010.

Ministerio de Ciencia e Innovación (MICINN).

Elementary gas-surface processes from first principles.

Ramón Sayós Ortega, Universitat de Barcelona.

2007ITT00002, 2008-2009.

Generalitat de Catalunya.

Estudio de reacciones de inserción mediante métodos cuánticoestadísticos.

Fermín Huarte Larrañaga, Parc Científic de Barcelona.

Programa ICTS, 2008-2009.

Ministerio de Ciencia e Innovación (MICINN).

Fisicoquímica de las interacciones de ligandos con polielectrolitos de interés ambiental y fisiológico.

Francesc Mas Pujadas, Universitat de Barcelona.

CTM2009-14612-C02-02, 2009-2012.

Ministerio de Ciencia e Innovación (MICINN).

Desarrollo de nuevos paradigmas teóricos de la naturaleza clásica, semiclásica y mecanocuántica, para el estudio de reacciones químicas y su aplicación a sistemas moleculares bioorgánicos.

Josep Maria Bofill Villà, , Universitat de Barcelona.

CTQ2008-02856, 2009-2011.

Ministerio de Ciencia e Innovación (MICINN).

Reacciones de oxidación de interés en química atmosférica, en química ambiental y en procesos biológicos. Estudio teórico.

Josep Maria Anglada Rull, CSIC.

CTQ2008-06536, 2009-2011.

Ministerio de Ciencia e Innovación (MICINN).

Estructura electrónica y propiedades de moléculas y sólidos inorgánicos.

Pere Alemany i Cahner, Universitat de Barcelona.

CTQ2008-06670-C02-02/BQU, 2009-2011.

Ministerio de Ciencia e Innovación (MICINN).

Estudio teórico y experimental de la dinámica y cinética de reacciones químicas. Química atmosférica, procesos de combustión y aplicaciones a sistemas enzimáticos.

Miguel González Pérez, Universitat de Barcelona.

CTQ2008-06805-C02-01, 2009-2011.

Ministerio de Ciencia e Innovación (MICINN).

Modelización ab initio de materiales de importancia tecnológica basados en óxidos, metales y las combinaciones de ambos: de la escala nanométrica al sistema extendido.

Francesc Illas Riera, Universitat de Barcelona.

FIS2008-02238/, 2009-2013.

Ministerio de Ciencia e Innovación (MICINN).

Simulación de procesos reactivos en proteínas y enzimas mediante métodos de dinámica molecular ab initio.

M. Carme Rovira Virgili, Parc Científic de Barcelona.

FIS2008-03845, 2009-2011.

Ministerio de Ciencia e Innovación (MICINN)

Estudio mecano-quántico exacto de la dinámica de reacción en $O(^3P) + CH_4$: Uso del MCTDH multicapa.

Fermín Huarte Larrañaga, Parc Científic de Barcelona.

Programa ICTS, 2009-2010.

Ministerio de Ciencia e Innovación (MICINN).

Diseño de materiales moleculares con propiedades de interés tecnológico.

Juan J. Novoa, Universitat de Barcelona.

MAT2008-02032/MAT, 2009-2011.

Ministerio de Ciencia e Innovación (MICINN).

Planetary entry integrated models.

Mario Capitelli (Bari University), Ramon Sayós Ortega (Universitat de Barcelona).

PHYS4ENTRY – FP7-SPACE-2009-1, 2009-2013.

7th Framwork Programme RTD, European Union.

Dinàmica de reaccions químiques.

Antonio Aguilar Navarro, Universitat de Barcelona.

2009SGR00017. 2009-2013.

Generalitat de Catalunya.

Fisicoquímica de sistemes macromoleculars d'interès ambiental

Jaume Puy Llorens, Universitat de Lleida.

2009SGR465, 2009-2013.

Generalitat de Catalunya.

Laboratori de Ciència de Materials Computacional/Computational Materials Science Laboratory.

Francesc Illas Riera, Universitat de Barcelona.

2009SGR1041, 2009-2013.

Generalitat de Catalunya.

Grup d'Estructura de Materials Moleculars (GEM2).

Juan J. Novoa, Universitat de Barcelona.

2009SGR1203, 2009-2014.

Generalitat de Catalunya.

Obtención de compuestos con actividad farmacológica mediante la disrupción de las interacciones proteína-proteína e implementación de software para su estudio.

Marta Cascante Serratosa, Universitat de Barcelona.

2009SGR1308, 2009-2013.

Generalitat de Catalunya .

Grup d'estructura electrònica, ajut per a grup de recerca consolidat.

Santiago Álvarez Reverter, Universitat de Barcelona.

2009SGR1459, 2009-2013.

Generalitat de Catalunya.

Química Teòrica i Computacional.

Santiago Olivella Nel.lo, CSIC.

2009SGR1472, 2009-2013.

Generalitat de Catalunya.