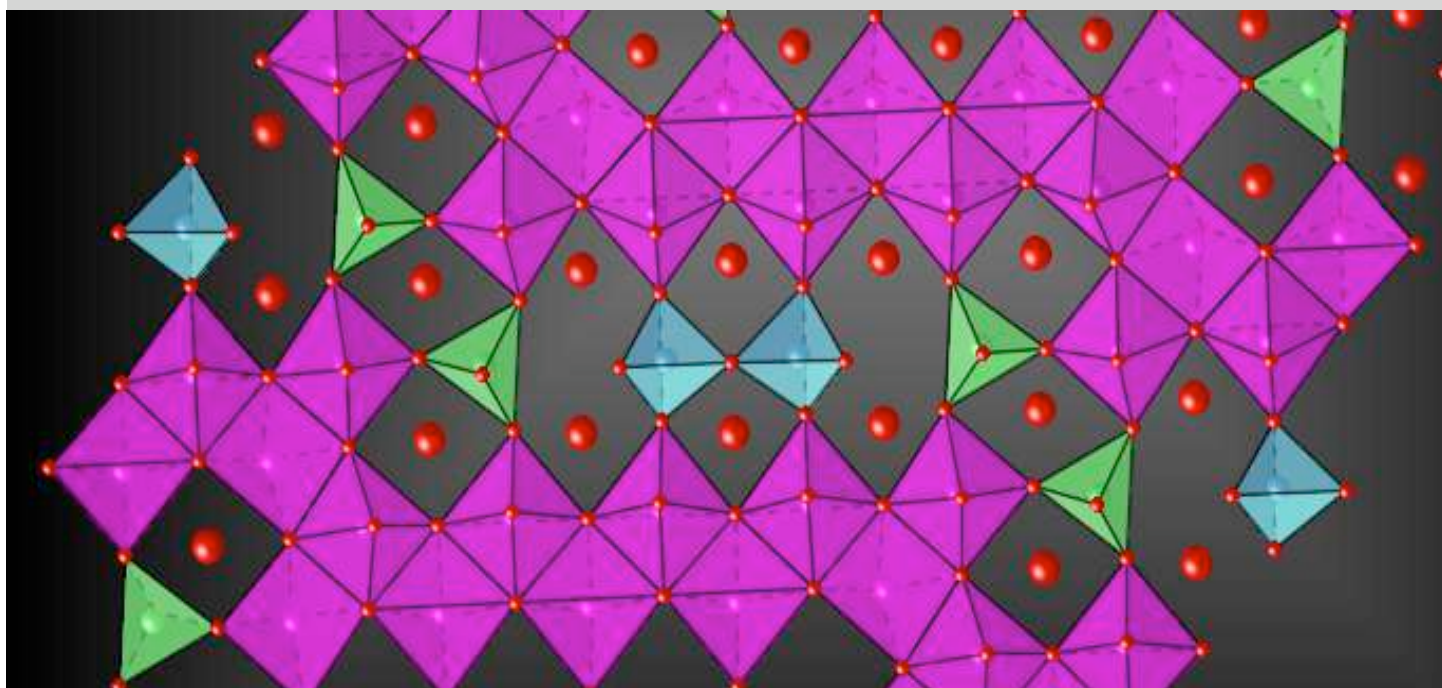


Institut de Química Teòrica i Computacional de la Universitat de Barcelona (IQTCUB)



Memòria d'activitats 2010

CONTINGUTS DE LA MEMÒRIA

I. Descripció de l'IQTCUB

- I.1. Equip directiu
- I.2. Equip tècnic
- I.3. Equipaments
- I.4. Grups de recerca
- I.5. Membres permanents i no permanents

II. Activitats de l'IQTCUB

- II.1. Activitats de tipus general
- II.2. Seminaris i conferències de l'IQTCUB
- II.3. Investigadors convidats per l'IQTCUB

III. Activitat científica dels membres de l'IQTCUB

- III.1. Descripció de les línies de recerca
- III.2. Activitats en cada línia de recerca
- III.3. Resultats més rellevants
- III.4. Llista de publicacions
 - Articles
 - Capítols de llibres i proceedings
- III.5. Altres activitats
 - Tesis doctorals
 - Màsters oficials
 - Participació a congressos
 - Estades en centre de prestigi
 - Participació en projectes d'investigació

I. DESCRIPCIÓ DE L'IQTCUB

L'IQTCUB, va ser aprovat pel Consell de Govern del 27 de Novembre del 2007, i té com a objectius principals potenciar la recerca en els àmbits de la Química Teòrica i Computacional al sí de la UB mitjançant la vertebració de l'activitat científica 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. Frances 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 | <i>Tècnic informàtic</i> |
| Raul Porcel Martínez | <i>Tècnic informàtic</i> |

I. DESCRIPCIÓ DE L'IQTCUB

I.3. Equipaments

Actualment el IQTCUB consta de 7 clústers de càlcul distribuïts en dos sales dins de la facultat de Física i Química.

La primera sala es la sala VAX que es troba al soterrani (planta 0) la qual encabeix els clústers de DELL hades i cerqt i te dos aires condicionats amb la potencia 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> | Master + 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 master 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> | Cluster DELL (2 armaris). |
| <i>Sistema Operatiu</i> | Debian 3.0. |
| <i>Serveis</i> | Cluster de càlcul. Servidor DHCP intern. |
| <i>Estructura</i> | Master + 15 nodes en cluster |
| <i>Comentaris</i> | Cluster idèntic a cerqt pertanyent al grup 4 (francesc illas). Conté una pantalla+teclat-mouse per gestionar totes les màquines. |

I. DESCRIPCIÓ DE L'IQTCUB

Especificacions 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 master 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) |

La resta de clústers estan a la sala situada darrera el pàrquing de la facultat on actualment esta refrigerada per dos maquines d'aire acondicionat de 44K frigories y 66K frigories respectivament.

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 |
| <i>de 64 bits Suse 9.2.</i> | |
| <i>Serveis</i> | Clúster de càlcul i servidor de discos (raid amb master fent un total de 2.5TB). Servidor DHCP intern. |
| <i>Estructura</i> | Master + 111 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. |

Especificacions: MASTER

| | |
|-------|--|
| CPU | Xeon Dual a 1.8GHz (64bits) |
| RAM | 8GB |
| HD | 1 disc de 146GB + cabina discos amb 2.5TB |
| Xarxa | 2 targetes de xarxa. Una 10/100 que comunica amb l'exterior i una 100/1000 que permet interconnectar master i nodes (xarxa interna). |

I. DESCRIPCIÓ DE L'IQTCUB

7 NODES 32 bits a 3.06GHz SUN V60X

CPU Xeon Dual a 3.06GHz (32 bits)
RAM 3GB
HD 2 discos de 36GB
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).

11 NODES 64 bits a 1.80GHz SUN V20Z

CPU Operton Dual a 1.80GHz (64 bits)
RAM: 10 nodes a 8GB, 2 nodes a 16GB
HD 10 nodes de 2 discos de 73GB, 2
nodes de 2 discos 73Gb 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 146GB
Xarxa: 2 targetes 100/1000 (xarxa interna) +
2 targetes lom 100 (administració
interna entre nodes).

iqtc01 (valor aproximat 250.000 euros)

Tipus de màquina Clúster HP
Sistema Operatiu Debian Stable.
Serveis Clúster de càlcul
Estructura 80 nodes en clúster
Comentaris Sala nova (soterrani del pàrquing). Tots els
processadors son de 64 bits
Especificacions

80 NODES AMD HP Proilant DL-145 G2:

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

I. DESCRIPCIÓ DE L'IQTCUB

Xarxa d'administració ILO

iqtc02: (valor aproximat 78.000 euros)

Tipus de màquina: Clúster HP
Sistema Operatiu: SLES10.
Serveis: Clúster de càlcul.
Estructura: 26 nodes en clúster
Comentaris: Sala nova (soterrani del pàrquing). Tots els processadors son de 64 bits
Especificacions:

-26 NODES INTEL HP Proliant DL-160G5:

- CPU:2 Xeon QuadCore 2,66Ghz
- RAM:16-32GB
- HD: 2-4 discos de 250GB
- Xarxa: 2 targetes 100/1000 (xarxa interna)
- Xarxa d'administració ILO

iqtc03: (valor aproximat 33.000 euros)

Tipus de màquina: Clúster HP
Sistema Operatiu: SLES10.
Serveis: Clúster de càlcul.
Estructura: 11 nodes en clúster
Comentaris: Sala nova (soterrani del pàrquing).Tots els processadors son de 64 bits
Especificacions:

-11 NODES INTEL HP Proliant DL-140G3:

- CPU:2 Xeon QuadCore 2,33Ghz
- RAM:16-32GB
- HD: 2 discos de 80GB
- Xarxa: 2 targetes 100/1000 (xarxa interna)
- Xarxa d'administració ILO

iqtc04: (valor aproximat 360.000 euros)

Tipus de màquina: Clúster HP
Sistema Operatiu: SLES11.
Serveis: Clúster de càlcul.
Estructura: 80 nodes en clúster
Comentaris: Sala nova (soterrani del pàrquing). Tots els

I. DESCRIPCIÓ DE L'IQTCUB

processadors son de 64 bits. Xarxa Infiniband
Especificacions:

-80 NODES INTEL HP Proliant DL-160G6:

- CPU:2 Xeon SixCore 2,66Ghz
- RAM:48GB
- HD: 1 disc de 1TB
- Xarxa: 2 targetes 100/1000 (xarxa interna)
- Xarxa: 2 targetes Infiniband (xarxa calcul)
- 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 2300 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 Xeon Dual Core 2.33GHz |
| | RAM 8GB |

I. DESCRIPCIÓ DE L'IQTCUB

| | |
|-------|--|
| HD | 1 disc 160GB (Sistema operatiu) (raid0) |
| Xarxa | 2 targetes 100/1000 xarxa interna |

Servidors de virtualització (*valor aproximat 2300euros*)

| | |
|--------------------------|--|
| <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 del IQTCUB (SGE, dhcp, servidor llicències etc.). Suportada per un SAI conjuntament amb portals |

Especificacions:

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 |

Servidor de visualització (*valor aproximat 3000 euros*)

Tipus de màquina: 1 màquina HP Proliant DL-385
Sistema Operatiu: SLES10
Serveis: Màquina per utilització d'aplicacions gràfiques
Estructura: 1 màquina
Comentaris: Suportada per un SAI.
Especificacions:

- MASTER HP Proliant 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 master i nodes (xarxa interna).

I. DESCRIPCIÓ DE L'IQTCUB

Altres (valor aproximat 20.000 euros)

A part dels serveis anteriors tenim altres màquines (pc's a mode de servidors temporals) i maquinari de computació per donar xarxa a tot el conjunt dels serveis del iqt cub:

- Màquina Backup ACER Altos G350 (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 pública des de la xarxa del iqt cub)
- Switch Layer 3 HP Proliant de 48 ports (dona cobertura a tota la infraestructura dels CPD del IQTCUB).
- 8 Switchs Layer 2 Dlink de 48 ports (xarxa interna clústers cerqt2,iqtc01,iqtc02,iqtc03)
- 2 Switchs Layer 2 HP de 48 ports (xarxa interna clúster iqt c04)
- 2 Switchs Infiniband Voltaire de 36 ports (xarxa càlcul iqt c04)
- Switch modulable HP (8 mòduls per xarxa interna clúster iqt c01,iqt c02,iqt c03)

En total, la **POTÈNCIA** de càlcul en el IQTCUB podem dir que és:

TOTAL CPU'S: 1856 CPU's

TOTAL MEMÒRIA= 5558 GB RAM

TOTAL DISC CÀLCUL = 122.07 TB de disc

TOTAL DADES USUARI = 20 TB de disc

Valor aproximat total (comptabilitzant consumibles com cablejat de xarxa etc.)= 1.273.600 euros*

* no es contempla les màquines d'aire condicionat ni els quadres elèctrics de les sales

I. DESCRIPCIÓ DE L'IQTCUB

I.4. Grups de l'IQCTUB

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

Grup d'Estructura Electrònica (EE)

Eliseo Ruiz, Química Inorgànica (UB).

Grup d'Estructura de Materials Moleculars (GEM2)

Juan José Novoa Vide, Química Física (UB).

Simulació computacional de dinàmica de reaccions en superfície

Ramon Sayós Ortega, Química Física (UB).

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

Francesc Illas Riera, Química Física (UB).

Dinàmica de Reaccions Atmosfèriques i Sistemes Complexos (DRASC)

Miguel González Pérez, Química Física (UB).

Modelización de Sistemas Biológicos y Diseño de Fármacos

Jaime Rubio Martínez, Química Física (UB).

Química Teòrica i Computacional

Albert Solé Sabaté, Química Física (UB).

Electronic Structure and Symmetry (ESS)

Pere Alemany i Cahner, Química Física (UB).

Estructura i Dinàmica de Sistemes Moleculars Complexes

Josep Maria Bofill Villà, Química Orgànica (UB).

I. DESCRIPCIÓ DE L'IQTCUB

Grup de Dinàmica de Reaccions Químiques

Antonio Aguilar Navarro, Química Física (UB).

Simulació Quàntica de Processos Biològics

M. Carme Rovira Virgili, Parc Científic de Barcelona.

Dinàmica de Reaccions en Sistemes Poliatòmics (RDPOLSYS)

Fermín Huarte Larrañaga, Química Física (UB).

Biofísicoquímica de Macromolècules i Col·loides

Francesc Mas Pujadas, Química Física (UB).

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

Ramon Reigada Sanz, Química Física (UB).

I. DESCRIPCIÓ DE L'IQTCUB

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 Físcica |
| Alvarez Reverter | Santiago | Química Inorgànica |
| Bofill Villà | Josep Maria | Química Orgànica |
| Gonzalez Perez | Miguel | Química Físcica |
| Illas Riera | Francesc | Química Físcica |
| Mas Pujades | Francesc | Química Físcica |
| Novoa Vide | Juan José | Química Físcica |
| Rubio Martínez | Jaime | Química Físcica |
| Sayós Ortega | Ramón | Química Físcica |
| <i>Professors titulars</i> | | |
| Albertí Wirsing | Margarita | Química Físcica |
| Alemaný Cahner | Pere | Química Físcica |
| Costa Sala | Ramón | Química Inorgànica |
| De Andrés Llopis | Jaime | Química Físcica |
| de P. R. Moreira | Ibério | Química Físcica |
| Garcia Bach | Maria Àngels | Física Fonamental |
| Giménez Font | Xavier | Química Físcica |
| Llunell Marí | Miquel | Química Físcica |
| Lucas Alcorta | Josep Maria | Química Físcica, |
| Mota Valeri | Fernando | Química Físcica |
| Ruiz Sabín | Eliseo | Química Inorgànica |
| Solé Sabaté | Albert | Química Físcica |
| Sousa Romero | Carme | Química Físcica |
| Vilaseca Font | Eudald | Química Físcica |
| <i>Professors Agregats i Lectors</i> | | |
| Aullón López | Gabriel | Química Inorgànica |
| Deumal Solé | Mercè | Química Físcica |

I. DESCRIPCIÓ DE L'IQTCUB

| | | |
|------------------|--------|----------------|
| 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 | P. C. de Barcelona |

Investigadors Postdoctorals

| | | |
|------------------|-----------|----------------|
| Casanova Casas | David | IQCTUB |
| Flores Yepes | Elizabeth | Química Física |
| Migani | Annapaola | Química Física |
| Pastor del Campo | Isabel | Química Física |
| Radilla | Juan | Química Física |
| Ribas Ariño | Jordi | Química Física |
| Suárez Corujo | Jaime | Química Física |
| Zwijnenburg | Martijn | Química Física |

Estudiants de Doctorat

| | | |
|---------------------|----------|--------------------|
| Aguilar Fargas | Javier | Química Física |
| Aguilar Mogas | Antoni | Química Orgànica |
| Alfonso Prieto | Mercedes | P. C. de Barcelona |
| Aracena Ponce | Daniel | Química Inorgànica |
| Ardevol Grau | Albert | P. C. 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 |
| Conejeros Espíndola | Sergio | Química Física |
| D'Oria | Emiliana | Química Física |
| Delgado Soler | Laura | Química Física |
| Demiroglu | Ilker | Química Física |

I. DESCRIPCIÓ DE L'IQTCUB

| | | |
|-------------------|-----------|--------------------|
| Norawit | Krainara | Química Física |
| Echeverría López | Jorge | Química Inorgànica |
| Gómez Coca | Sílvia | Química Inorgànica |
| Gomez Llobregat | Jordi | Química Física |
| Jornet Somoza | Joaquim | Química Física |
| López Marne | Estefanía | Química Física |
| Merchán Fernández | Norma | Química Física |
| Moix Teixidor | Marc | Química Física |
| Morón Tejero | Víctor | Química Física |
| Peigné | Benjamin | Química Inorgànica |
| Rivero | Pablo | Química Física |
| Roldán | Alberto | Química Física |
| Ruiz Martínez | Antonio | Química Inorgànica |
| Vela Llausi | Sergi | Química Física |

Estudiants de Màster

| | | |
|-----------------|--------------|----------------|
| Asara | Gian Giacomo | Química Física |
| Martínez Suárez | Luis | Química Física |
| Fdez Santamaría | Iker | Química Física |

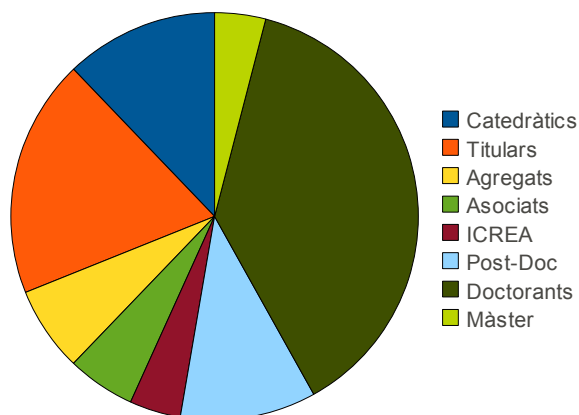


Figura.1 Percentatge d'investigadors de l'IQCTUB segons categoria acadèmica.

II. ACTIVITATS DE L'IQTCUB

II.1. Activitats de tipus general

A continuació es detallen les accions i activitats de tipus general dutes a terme per l'IQTCUB al llarg de l'any 2010.

1. Realització de la *1ª Jornada de l'IQTCUB*. El dia 14 de maig del 2010 l'Institut va organitzar, per primera vegada, una jornada en la que membres de l'IQTCUB i altres conferenciantes de reconegut prestigi internacional exposaren els seus treballs més recents. En aquesta Jornada hi participà el professor Matthias Scheffler del Fritz Haber Institut de Berlín. Les despeses totals de la Jornada es corresponen al cost de l'estada del professor Scheffler i al servei de catering pels assistents.

Despesa associada: 2.038 €

2. Promoció i incentivació a la recerca. L'IQTCUB ha concedit un total de tres *Ajuts d'iniciació a la recerca* consistents en beques personals per valor de 1800 €. Aquests ajuts estan destinats a estudiants que estiguin acabant o que hagin finalitzat els seus estudis de grau o llicenciatura. Els ajuts tenen una durada de 6 mesos i el seu objectiu és el de facilitar la realització d'un màster oficial de la UB i la col·laboració en les tasques de recerca dels grups de l'IQTCUB. Aquestes beques han recaigut als senyors Josep Oriol Lamiel Garía, Jordi Toda Calderon i Arnau Vilà Casanovas.

Despesa associada: 3.400 €

II. ACTIVITATS DE L'IQTCUB

II.2. Seminaris i Conferències de l'IQTCUB

D'ençà des de principis del 2010 i fins a la data, l'IQTCUB ha organitzat 7 seminaris i conferències:

1. Coen de Graaf, (Dept. Química Física, URV)

"Extraction of the zero-field anisotropy tensor in mono- and bi-metallic Ni(II) complexes by effective hamiltonian theory"

13 de gener de 2010

2. Ricard Gelabert, (Dept. Química, UAB)

"Quantum dynamics simulations of the operation of the proton relay in the Photoactive Excited State"

4 de març de 2010

3. Gianfranco Pacchioni, (Dip. Scienza Materiali, Univ. Milano-Bicocca, Italy)

"UV and Visible photoactivity of titania: nature of reduced and doped TiO₂"

9 de març de 2010

4. Antonija Tomic, (Institute Rudger Boskovic, Zagreb, Croatia)

"Computational study of the ligands binding into the active site of the human dipeptidyl-peptidase III"

29 d' abril de 2010

5. Jaime Suárez, (Inst. of Electronic Structure and Laser, FORTH, Creta)

"A parallel code for cartesian coordinate-based wavepacket propagation"

10 de Juny de 2010

II. ACTIVITATS DE L'IQTCUB

6. Laurent Bonnet, (CNRS Bordeaux, France

"Classical reactive scattering in a quantum spirit"

6 de Juliol de 2010

7. Andrey Belyaev, (Dept. Theoretical Physics, Herzen State University, Russia).

The Multiple-branching classical trajectory surface-hopping method for non-adiabatic nuclear dynamics.

11 de Novembre de 2010

8. W. Gawelda, (European XFEL GmbH, Hamburg, Germany

"Femtosecond X-Ray science with current and future light sources"

11 de Novembre de 2010

II. ACTIVITATS DE L'IQTCUB

II.3. Investigadors convidats per l'IQTCUB

D'ençà del Setembre de 2010 i fins a la data, l'IQTCUB ha tingut els següents visitants destacables:

1. Prof. Fariba Nazari

Institute for Advanced Studies in Basic Sciences (Iran)

| | |
|--------------|-----------------------|
| <i>Inici</i> | 1 de Juliol de 2010 |
| <i>Final</i> | 1 de Setembre de 2010 |

2. Dr. Joao Paulo

Universidade de Évora (Portugal)

| | |
|--------------|-----------------------|
| <i>Inici</i> | 22 d'octubre de 2009 |
| <i>Final</i> | 3 de decembre de 2009 |

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.

III. ACTIVITAT CIENTÍFICA DELS MEMBRES DE L'IQTCUB

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. Fisicoquímica 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.

III. ACTIVITAT CIENTÍFICA DELS MEMBRES DE L'IQTCUB

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

Línia 1

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 potencials d'aquestes mesures en estudis estructurals.

III. ACTIVITAT CIENTÍFICA DELS MEMBRES DE L'IQTCUB

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 *refinement* optimitzant-les i comparant-les per a descartar les que es consideren iguals entre elles segons uns valors llidars. 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 ampliament modificat i millorada la seva convergència i eficiència. El codi ha estat refinat millorant la comunicació entre subrutines, sent paral·litzat 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.

III. ACTIVITAT CIENTÍFICA DELS MEMBRES DE L'IQTCUB

B. Pla de treball

Estudi sistemàtic i molt detallat a nivell quasiclàssic i centrat en la cinètica de tots els canals de reacció possibles de les reaccions d'interès en combustió $\text{CH}(v=0,1) + \text{H}_2, \text{D}_2$. Aquests sistemes són força difícils d'estudiar, fins i tot a nivell QCT (cal fer servir recursos de supercomputació), donada la presència d'un mínim molt profund (radical metil) en el camí de mínima energia que connecta reactius i productes. Aquest mínim és responsable de la formació de complexos de col·lisió de molt llarga vida i de l'enorme violació de l'energia vibracional de punt zero (ZPE) en els productes formats. L'anàlisi del grau de violació de la ZPE pels diversos canals possibles i la consideració d'alguns resultats experimentals (constants de velocitat) de qualitat, ha permès proposar estratègies senzilles i a la vegada acurades per solucionar el greu problema abans esmentat. Aquestes estratègies són també útils pels sistemes poliatòmics en general, es a dir per reaccions implicant quatre o més àtoms.

C. Objectius assolits

El desenvolupat d'estratègies per solucionar a nivell pràctic el greu problema de la violació de la ZPE en els estudis de dinàmica quasiclàssica, que és particularment important en sistemes reactius amb presència de mínims profunds a la superfície de potencial, ha estat el principal objectiu assolit en aquesta línia. Un treball està en fase de redacció ($\text{CH}(v=0,1) + \text{D}_2$) i un altre treball sobre la reacció $\text{CH} + \text{H}_2$, d'importància en combustió, ha estat sotmès al Phys Chem Chem Phys. Aquestes estratègies tenen caire essencialment general i per això poden ser també útils en el context, més general, de les reaccions poliatòmiques, es a dir per sistemes reactius que impliquen quatre o més àtoms.

Electronic Structure and Symmetry (ESS)

Pere Alemany i Cahner, Química Física (UB).

A. Activitat dins la línia de recerca

a) Mesures Contínues de Simetria La recerca del nostre grup en aquest àmbit té dues vessants. Per una banda, estem desenvolupant el formalisme matemàtic necessari per quantificar les propietats de simetria d'objectes d'interès en química com ara l'estructura molecular, la densitat electrònica, els orbitals moleculars i les funcions d'ona o els hamiltonians associats a un sistema. De manera paral·lela, treballem també en el desenvolupament d'algorismes matemàtics eficients per calcular les mesures contínues de forma i de simetria. Fruit del treball combinat d'aquestes dues línies són els programes SHAPE, SYMOP i eSYMOP, desenvolupats al nostre grup i distribuïts lliurement a tota la

III. ACTIVITAT CIENTÍFICA DELS MEMBRES DE L'IQTCUB

comunitat acadèmic-científica.

b) 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.

c) Estereodinàmica 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 y objectius assolits

a) Mesures Contínues de Simetria El treball principal en aquesta línia de recerca s'ha centrat en l'establiment del formalisme matemàtic per poder aplicar les mesures contínues de simetria en la quantificació de la simetria per a densitats electròniques, orbitals moleculars i funcions d'ona polieletròniques. En aquest sentit, hem trobat molt útil introduir el concepte de valor esperat d'una operació de simetria. A partir d'aquest desenvolupament teòric s'ha preparat una versió preliminar d'un nou programa, eSYMOP, que permet calcular les mesures contínues de simetria per a orbitals moleculars i funcions d'ona polieletròniques obtingudes en un càlcul mecanoquàntic standard realitzat amb el programa Q-Chem.

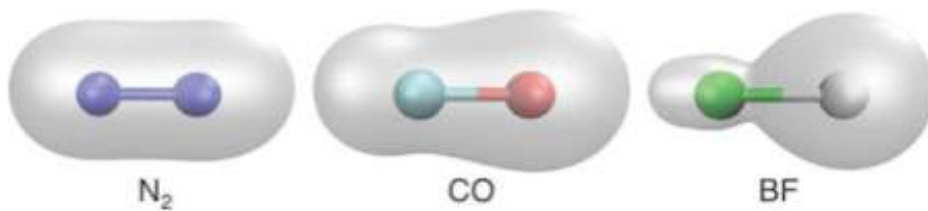


Figura 2. Isosuperfícies per a la densitat electrònica d'una sèrie de molècules diatòmiques isoelectròniques mostrant com la diferència d'electronegativitat entre els dos àtoms indueix una assimetria en la densitat electrònica que es pot quantificar amb les mesures contínues d'inversió.

III. ACTIVITAT CIENTÍFICA DELS MEMBRES DE L'IQTCUB

b) 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. Aquest mètode s'ha emprat en l'estudi dels dimers de PBPB, resultant en la publicació d'un article al Journal of the American Chemical Society.

c) Estereodinàmica d'Engranatges Moleculars En aquest àmbit s'està treballant en l'estudi de la dinàmica d'engranatge moleculars senzills, com ara cadenes de fenils, emprant el model de clústers i frontisses, on les equacions de la dinàmica es resolten de forma recursiva. S'està desenvolupant un programa per al seguiment de la dinàmica de sistemes formats per fragments rígids emprant com a superfície de potencial l'ajust numèric d'un conjunt finit de punts dins de l'espai de conformacions de la nanoestructura.

Estructura y Dinàmica de Sistemes Moleculars Complexes

Josep Maria Bofill Villà, Química Orgànica (UB)

A. Activitat dins la línia de recerca

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. L'activitat més representativa duta a terme durant els últims dos anys, es pot classificar en sis subprojectes, que són: Estructura Electrònica aplicada a sistemes moleculars orgànics, 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, la mecànica de Madelung - de Broglie - Bohm i l'equació de Schrödinger Clàssica.

B. Pla de treball

Durant aquest període s'ha portat a terme, pel que es refereix al treball en estructura electrònica, la implementació, en diferents paquets de programes, d'algorismes multireferencials basats en la construcció de la funció d'ona a partir d'àlgebres de Lie. Pel que respecta als camins de reacció, es va desenvolupar la metodologia en la que es demostra que es pot expressar qualsevol corba, damunt una superfície qualsevol, en funció de l'energia potencial com a variable independent. També es va

III. ACTIVITAT CIENTÍFICA DELS MEMBRES DE L'IQTCUB

proposar investigar nous algorismes d'integració. En el subprojecte de dinàmica, a) es van analitzar certs efectes quàntics (principalment efecte túnel i ressonàncies) 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 b) es va finalitzar la formulació del Hamiltonià quàntic de camí de reacció, per tal d'estudiar efectes quàntics en reaccions químiques de complexitat creixent.

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, també s'ha estudiat molècules orgàniques que tenen un feble caràcter magnètic i presenten òptica no lineal. Els nous algorismes d'integració de camins de reacció s'han introduït en el paquet de programes GAMESS. Finalment, s'ha conseguit programar i utilitzar el Hamiltonià quàntic de camí de reacció en reaccions on l'efecte túnel és molt important. Dins del mateix contexte 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. Finalment s'ha derivat, formulat i programat l'equació de Schrödinger Clàssica.

Grup de Dinàmica de Reaccions Químiques

Antonio Aguilar Navarro, Química Física (UB)

A. Pla de treball

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 molt 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

III. ACTIVITAT CIENTÍFICA DELS MEMBRES DE L'IQTCUB

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 tractat 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 del sistema 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.

B. Objectius assolits

Durant l'actual any del que s'informa s'han assolit diversos dels objectius, tant pel que fa a la línia experimental com a la teòrica. En relació amb la primera d'elles, per una banda s'han realitzat estudis detallats i acurats de la reactivitat del sistema $\text{Li}^+ + n\text{-ClC}_3\text{H}_7$, havent-ne mesurat les seccions eficaces de reacció dels dos canals corresponents a la deshidrohalogenació del *n*-clorur d'isopropil en un ampli interval d'energies de col·lisió a partir d'uns 0,05 eV. Tanmateix, també s'han determinat les seccions corresponents a altres reaccions del sistema a energies superiors. Cal assenyalar que amb l'objectiu de poder proporcionar les seccions eficaces reactives en unitats absolutes, s'han realitzat diversos experiments de calibratge de l'aparell experimental

III. ACTIVITAT CIENTÍFICA DELS MEMBRES DE L'IQTCUB

que, en una primera aproximació, ens proporcionen informació sobre els seus valors absoluts. El calibratge definitiu, que es preveu realitzar més endavant, comporta una modificació de la font iònica utilitzada.

Un punt importat en quant a la sensibilitat de les mesures realitzades en els experiments, ha estat la substitució del detector inicial (copa de Faraday) per un multiplicador d'electrons secundaris que ha permès realitzar mesures amb un guany del senyal de tres a quatre ordres de magnitud, la qual cosa a la seva volta, ha permès poder reduir la pressió dels reactius a la cel·la de reacció, amb la consegüent disminució de la possibilitat d'encontres secundaris.

A més dels esmentats estudis amb ions liti, també se n'han realitzat amb altres ions alcalins, així com també considerant altres tipus de reaccions, com per exemple, les formacions d'adductes dels ions amb benzè, estudis que han permès la redacció d'una memòria de Treball de Màster. Tota l'activitat de recerca experimental ha estat complementada, en diferent mesura, amb els pertinents estudis teòrics siguin de tipus de química quàntica electrònica o de dinàmica de reaccions. Ens aquest sentit s'han estudiat a nivell *ab initio* MP2, i molt detalladament, les superfícies d'energia potencial (SEP) de les reaccions de deshidrohalogenació amb ions liti i sodi, i encara que no del tot finalitzada, la corresponent amb potassi. Per un altra banda, s'han començat a realitzar els estudis de trajectòries "*on the fly*" del sistema reactiu $\text{Li}^+ + n\text{-ClC}_3\text{H}_7$ en el que degut als elevats requeriments de temps de CPU exigits en el càlcul de la SEP a nivell MP2, s'ha tingut que recorre a càlculs DFT-B3LYB, que proporcionen una topologia i energètica de la SEP molt propera a la caracteritzada a nivell MP2. Respecte de les reaccions de formació d'adductes amb benzè, s'han realitzat també estudis a nivell MP2 per tal de caracteritzar el comportament de les vibracions del sistema al llarg del camí de reacció dissociatiu de mínima energia per tal de poder fer una estimació de les constants de descomposició unimolecular. Utilitzant les SEP analítiques prèviament obtingudes en el grup per als diversos adductes ió alcalí-benzè, molt útils per ser utilitzades en programes de Dinàmica Molecular, s'han obtingut les funcions d'excitació per a la seva formació a qual cosa ha permès poder comparar-les amb les experimentals, de manera que s'ha pogut modelar tant el procés de formació dels adductes com el corresponent a la seva descomposició.

En la línia teòrica de desenvolupament de potencials per ser usats en simulacions de Dinàmica Molecular, també s'han assolit els objectius que s'havien fixat. Per una banda s'ha comprovat que la construcció del potencial d'interacció basant-se en la descomposició de la polaritzabilitat molecular permet transferir els paràmetres corresponents a grups semblants de molècules diferents, la qual cosa s'ha investigat considerant la interacció entre els ions alcalins i els ions halogenurs amb el benzè, trifluorobenzè i hexafluorobenzè. Els resultats s'han enviat a la

III. ACTIVITAT CIENTÍFICA DELS MEMBRES DE L'IQTCUB

revista J. Phys. Chem. A. Per altra banda, s'han establert les bases que permetran l'estudi de la molècula d'Nmetilacetamida (NMA) en dissolució, per a la qual cosa s'han construït els potencials intermoleculars que descriuen la interacció dels dímers d'NMA i dels adductes NMA-H₂O, els resultats corresponents han estat enviats a la revista Phys. Chem. Chem. Phys.

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

Seguint la línia encetada l'any anterior, 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. Durant l'any 2009 es va desenvolupar el mètode sota la limitació de moment angular total zero ($J=0$). Tasques que s'han realitzat en l'any 2010:

- Extensió del mètode combinat captura-mctdh per valors de moment angular total diferent de zero.

C. Objectius assolits

- Extensió del codi computacional "captura estadística - MCTDH" per valors del moment angular total més grans que un.
- Desenvolupament d'un codi computacional que permeti la propagació

III. ACTIVITAT CIENTÍFICA DELS MEMBRES DE L'IQTCUB

simultània de molts estats vibracionals tot emprant una sola base de funcions, dins de l'esquema MCTDH.

- Tot i que no era inclòs dins dels objectius, es vol esmentar el desenvolupament d'un esquema (i el codi computacional associat) per a l'anàlisi de trajectòries de dinàmica molecular sota un sistema de referència inercial que permet obtenir anàlisis tridimensional valuosos.

Biofísicoquímica de Macromolècules i Col·loides

Francesc Mas Pujadas, Química Física (UB).

A. Activitat dins la línia de recerca

Desenvolupament de metodologies basades en models de simulació que tinguin en compte els processos de difusió restringida.

S'ha desenvolupat un algorisme de simulació de dinàmica browniana per a estudiar l'efecte de la difusió en mitjans d'elevada densitat, com els que ocorren en l'interior de les cèl·lules (crowding macromolecular).

B. Pla de treball

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

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

III. ACTIVITAT CIENTÍFICA DELS MEMBRES DE L'IQTCUB

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 millor 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

S'han desenvolupat esquemes de simulació mixtes que combinen descripcions discretes Monte Carlo per partícules 'grosses' (proteïnes) i esquemes continus per aquells components més petits (lípids de la membrana). La correcta sincronització temporal dels dos tipus de descripció és el punt complicat d'aquesta línia de recerca. Hem aplicat aquests esquemes als següents tipus de sistemes:

-) Bicapa lipídica amb proteïnes estàtiques de diferent grandària.
-) Bicapa lipídica amb proteïnes mòbils de diferent grandària.
-) Bicapa lipídica amb proteïnes (mòbils o estàtiques) amb diferent afinitat per fases lipídiques ordenades o desordenades.

C. Objectius assolits

S'han assolit els objectius d'aquesta línia ja que s'han desenvolupat i explotat els algorismes per l'estudi dels diferents tipus de sistemes.

- 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

III. ACTIVITAT CIENTÍFICA DELS MEMBRES DE L'IQTCUB

d'empaquetament lateral excepcionals.

Línia 2

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 quasiclàssiques, emprant SEPs analítiques o interpolades basades en les dades DFT.

B. Pla de treball

Hem realitzat estudis dinàmics en condicions tèrmiques amb trajectòries quasiclàssiques dels processos: $O + b$ -cristobalita, $O_2 + b$ -cristobalita i $O + O$ -b-cristobalita (reacció Eley-Rideal) usant dues PESs contruïdes 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. Aquestes dades han servit per determinar constants de velocitat tèrmiques a partir d'expressions derivades de la teoria de col·lisions.

També s'està treballant en el desenvolupament del mètode d'interpolació de Shepard i també en el mètode FPLEPS per poder construir les SEPs dels sistemes O /grafit i O_2 /grafit, emprant coordenades cartesianes. Ambdós mètodes segueixen filosofies molt diferents.

C. Objectius assolits

L'ús del mètode d'interpolació CRP ha mostrat que calia desenvolupat 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 y FPLEPS.

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

Dinàmica de Reaccions Atmosfèriques i Sistemes Complexos (DRASC)

Miguel González Pérez, Química Física (UB).

III. ACTIVITAT CIENTÍFICA DELS MEMBRES DE L'IQTCUB

A. Activitat dins la línia de recerca y pla de treball

Estudi de la dinàmica i cinètica de varies reaccions químiques en fase gasosa, d'interès en química atmosfèrica, processos de combustió i astroquímica, realitzat utilitzant mètodes dinàmics clàssics i quàntics [exacte o amb l'aproximació CS ("centrifugal sudden")] i emprant superfícies de potencial basades en càlculs *ab initio* d'elevat nivell. En algun cas també s'ha tingut en compte (a nivell quàntic exacte) l'influència de l'acoblament entre superfícies de potencial en la dinàmica i cinètica, posant de manifest la necessitat de disposar d'acoblements determinats a nivell *ab initio*.

C. Objectius assolits

A nivell quasiclàssic (mètode QCT) s'ha completat i publicat l'estudi dinàmic i cinètic de la reacció atmosfèrica $N + NO \rightarrow N_2 + O$, i també s'han completat els estudis de les reaccions $O + H_2^+ \rightarrow OH^+ + H$, $OH + H^+$, i $OH + D_2(v=0-2) \rightarrow HOD + D$, d'interès en Astroquímica i en combustió, respectivament. Aquests resultats teòrics (principalment la part cinètica) juntament amb els obtinguts a nivell QCT sobre les reaccions abans esmentades $CH(v=0,1) + H_2 \rightarrow CH_3$ (captura), $CH_2 + H$, etc., i $CH(v=0,1) + D_2 \rightarrow CHD_2$ (captura), $CHD + D$, $CD_2 + H$, etc. serviran per millorar els models cinètics disponibles, donat que la informació experimental és molt limitada per un nombre elevat de canals de reacció. En el sistema H_2O^+ (sorprenentment oblidat a la literatura tot i el seu interès), l'estudi teòric, que inclou també un estudi quàntic a nivell CS, mostra que els efectes quàntics són poc importants. D'altra banda la reacció de transferència de protó domina (aprox. factor 3:1 en la constant de velocitat) respecte la transferència d'hidrogen en un ampli interval de temperatures.

A nivell de dinàmica quàntica exacte s'ha completat i publicat l'estudi de les reaccions $C(^1D) + HD, D_2$, on s'ha posat de manifest les dificultats que implica la descripció teòrica de sistemes químics amb mínims profunds a la superfície de potencial. En aquest context, de particular interès és l'estudi quàntic exacte que hem publicat sobre la reacció $NH(a^1 \Sigma) + H$ inclouen els acoblaments no adiabàtics entre les dos superfícies de més baixa energia induïts per l'efecte Renner-Teller, i on es mostra, entre altres coses, la necessitat de disposar d'acoblements calculats a nivell *ab initio*. La reacció $NH(a^1 \Sigma) + H$ també presenta mínims profunds en les seves superfícies de potencial. Aquest treball és complementari de dos treballs molt recentment realitzats per nosaltres sobre la reacció inversa ($N(^2D) + H_2$ i $N(^2D) + HD$). En el seu conjunt, es tracta dels primers tres estudis dinàmics quàntics exactes duts a terme sobre l'efecte Renner-Teller en reaccions químiques, que es força difícil de descriure teòricament i cada vegada resulta més evident el seu interès en dinàmica, es a dir, més enllà dels aspectes purament espectroscòpics.

III. ACTIVITAT CIENTÍFICA DELS MEMBRES DE L'IQTCUB

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 mecànic-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

S'ha aconseguit reproduir computacionalment amb molta exactitud el valor de l'energia de la dissociació del radical hidrotroxil ($\text{HO}\cdot$) en el radical hidroxil ($\text{HO}\cdot$) i l'oxigen molecular (O_2). Així s'ha obtingut un valor de D_0 (energia de dissociació a 0 K) de 3.0 kcal/mol mentre que el valor experimental reportat molt recentment per Le Picard i col.laboradors és de 2.9 ± 0.1 kcal/mol. També s'ha trobat que aquesta dissociació té lloc sense cap més barrera que la deguda a la endoergicitat de la reacció, en completa concordança amb el mateix treball experimental (*J. Chem. Theory Comput.*, **2010**, 6, 2743).

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

III. ACTIVITAT CIENTÍFICA DELS MEMBRES DE L'IQTCUB

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.

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'aductes 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

III. ACTIVITAT CIENTÍFICA DELS MEMBRES DE L'IQTCUB

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 2010 hem realitzat el càlcul mecano-quàntic de la constant de reacció $N + N_2$ emprant una superfície d'energia potencial millorada (SEP-LAG4) que ha manifestat importants efectes mecano-quàntics. Un altre sistema que s'ha estudiat i encara s'estudia al grup és el procés de adsorció dissociativa: $CH_4 + Ni(111) \rightarrow CH_{3(ad)} + H_{(ad)}$. En aquest any 2010 hem investigat l'efecte que la vibració de la superfície metàl·lica té sobre la reactivitat.

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

- Càlcul mecano-quàntic exacte de la constant de velocitat per a la reacció $N + N_2$, emprant la superfície d'energia potencial LAG4.
- En col·laboració amb la Dra. Albertí de la Universitat de Barcelona i del mateix IQTCUB s'ha estudiat la dinàmica de solvatació en dimers anió-benzè, tot emprant Ar com a dissolvent.
- S'ha inclòs la vibració de la superfície metàl·lica en el nostre estudi sobre l'adsorció dissociativa del metà sobre una superfície 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.
- S'ha estudiat la fisissorció de metà sobre agregats de nanotubs de carboni d'una sola paret, emprant simulacions de dinàmica molecular.

Línia 3

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 intermoleculars, 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 intermoleculars, 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 intermoleculars s'ha caracteritzat la naturalesa d'enllaços a llarga distància entre dímers cations-radicals (tetratiafulvalè i tertiofè) i anions-radicals (tetracianoquinodimetà, tetracianopirazidina, cianil i fenalenil), així com la naturalesa de les interaccions C-H...F. També ha estat analitzat a fons que les interaccions intermoleculars 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

III. ACTIVITAT CIENTÍFICA DELS MEMBRES DE L'IQTCUB

dependents de les distàncies internuclears basades en expansions en sèrie a molts cossos.

B. Pla de treball

Estudi *ab initio* MRCI de les dues superfícies d'energia potencial de més baixa energia del sistema tetratòmic H_3O^+ , que és força rellevant en Astroquímica (reaccions $\text{OH}^+ + \text{H}_2$ i $\text{O} + \text{H}_3^+$). S'ha calculat una xarxa de punts (geometries del sistema H_3O^+) prou densa, per fer possible l'obtenció posterior de representacions analítiques adients (basades en expansions en sèrie a molts cossos, com és habitual en el nostre grup), per dur a terme els estudis dinàmics i cinètics. Mentre que s'ha tingut temps de completar l'estudi *ab initio*, l'ajust analític està resultant més difícil del que es pensava.

C. Objectius assolits

El càlcul *ab initio* MRCI de les superfícies d'energia potencial de més baixa energia del sistema tetratòmic H_3O^+ (sistema de particular interès en Astroquímica; reacció $\text{O} + \text{H}_3^+$) ja s'ha finalitzat. No obstant, el seu ajust (obtenció d'una representació analítica per aquestes superfícies) mitjançant la utilització d'una expressió matemàtica adient està resultant força més complicat del que s'havia previst inicialment, tot i la simplicitat (aparent) d'aquest sistema.

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

En aquesta línia s'ha treballat bàsicament en l'establiment de relacions senzilles entre l'energia i la desviació de la simetria perfecta per a diferents conjunts de molècules senzilles, introduint les constants de deformació, que, de manera anàloga a les constants de força en una anàlisi harmònica de l'energia, ens indiquen les direccions preferents de pèrdua de simetria per part d'una molècula amb una simetria ideal.

C. Objectius assolits

S'han estudiat les relacions de simetria en estructures cristal·lines amb empaquetaments cúbics de fragments icosaèdrics, descobrint,

III. ACTIVITAT CIENTÍFICA DELS MEMBRES DE L'IQTCUB

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.

Línia 4

Biofísicoquímica de Macromolècules i Col·loides

Francesc Mas Pujadas, Química Física (UB).

A. Activitat dins la línia de recerca

S'han desenvolupat tècniques experimentals, principalment basades en fluorescència, les quals ens permeten obtenir informació sobre la cinètica i la termodinàmica dels processos de reacció-difusió en situacions de crowding macromolecular. S'ha estudiat en detall el procés de difusió d'una proteïna model (alfa-quimiotripsina) usant FRAP (recuperació de la fluorescència després del fotoblanqueig) en medis altament confinats.

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 l'alfa-quimiotripsina en situacions de crowding macromolecular utilitzant FRAP.

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.

A partir dels resultats de simulació de dinàmica molecular de diferents sistemes peptídics s'ha realitzat un model de formació i creixement dels cossos proteics.

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

Ramon Reigada Sanz, Química Física, (UB).

A. Activitat dins la línia de recerca

Es realitzen dues línies de recerca dedicades a l'estudi de fenòmens d'autorganització en membranes lipídiques com a models simples de la membrana cel·lular. Per un costat desenvolupem models coarse-grained continus o també combinats amb esquemes Monte Carlo per estudiar el comportament dinàmic de les proteïnes de membranes pel que fa al seu comportament col·lectiu (formació de clusters, formació d'estructures

III. ACTIVITAT CIENTÍFICA DELS MEMBRES DE L'IQTCUB

lipídiques o rafts, etc.). En aquests models s'estudien situacions d'equilibri i de no equilibri (fluxe de lípids, transport de proteïnes, etc.).

Per un altre costat s'estudien les membranes lipídiques des d'una perspectiva atomística mitjançant simulacions de Dinàmica Molecular. Amb aquest tipus de simulacions estudiem l'efecte del colesterol, d'agents fluiditzants, d'anestèsics en bicapes de lípids i també processos d'electroporació quan s'aplica un camp elèctric extern.

B. Pla de treball

S'ha fet l'estudi de l'efecte de l'organització dels lípids i les proteïnes en la membrana cel·lular, particularment en el context de la hipòtesi 'raft' que proposa una distribució heterogènia dels components de la membrana en estructures de tamany nanomètric. Per fer-ho s'han usat els tres nivells de descripció detallats en la secció anterior (L1).

També s'han estudiat les membranes lipídiques mitjançant simulacions de Dinàmica Molecular, i per tant amb un detall més atòmico-molecular. Amb aquest tipus de simulacions hem estudiat:

-) l'efecte del colesterol en les propietats estructurals de la membrana cel·lular.
-) processos d'electroporació quan s'aplica un camp elèctric extern perpendicular a la bicapa.
-) l'efecte d'agents fluiditzants (DMSO) i d'anestèsics en bicapes de lípids.

C. Objectius assolits

-) Estudi de l'efecte de l'organització dels lípids i les proteïnes en la membrana cel·lular: s'ha comprovat com la interacció entre proteïnes i lípids pot donar lloc a una estructuració de la bicapa en agregats nanomètrics amb diferent tipus d'estabilitat en funció de la mobilitat de les proteïnes i de la seva afinitat pels lípids. S'han vist com aquestes estructures poden explicar determinades observacions experimentals.

-) Efecte del colesterol en les propietats estructurals de la membrana cel·lular: hem caracteritzat la capacitat que té el colesterol per organitzar els lípids amb un ordre posicional i orientacional bastant clar fins a distàncies d'uns pocs nanometres. Els colesterols entre ells i els lípids amb els colesterols mostren orientacions clarament preferides que van en el sentit de compactar el sistema i expliquen per primer cop el mecanisme de condensació del colesterol a escala molecular.

-) Processos d'electroporació quan s'aplica un camp elèctric extern perpendicular a la bicapa: hem estudiat com l'aplicació d'un camp elèctric perpendicular al pla d'una membrana lipídica pot formar porus. Hem caracteritzat aquest fenomen i hem calculat els camps elèctrics mínims necessaris per poder porar la membrana en funció de la

III. ACTIVITAT CIENTÍFICA DELS MEMBRES DE L'IQTCUB

quantitat de colesterol que la forma. Veiem com el colesterol rigidifica la membrana i en dificultat la seva electroporació. L'electroporació és una tècnica emprada en medicina pel tractament de determinats tipus de càncer (electroquimioteràpia).

-) Efecte d'agents fluiditzants (DMSO) i d'anestèsics en bicapes de lípids: resultats encara per publicar.

Línia 5

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 algunas 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 sites 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.

Modelització de sistemes biològics i disseny de fàrmacs

Jaime Rubio Martínez (UB)

A. Activitat dins la línia de recerca

Diseny de fàrmacs mitjançant tècniques de Modelització Molecular.

III. ACTIVITAT CIENTÍFICA DELS MEMBRES DE L'IQTCUB

B. Pla de treball

S'ha treballat en el disseny de inhibidors de diferents proteïnes involucrades en la malaltia del càncer, així com la implementació de mètodes computacionals per millorar el procés del disseny dels fàrmacs.

C. Objectius assolits

Mitjançant tècniques de modelització molecular, s'han aconseguit inhibidors de les proteïnes CDK4/6, Trascetolasa y Glucosa 6-fosfato deshidrogenasa.

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.

III. ACTIVITAT CIENTÍFICA DELS MEMBRES DE L'IQTCUB

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 pogut manifestar 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.

Dinàmica de Reaccions Atmosfèriques i Sistemes Complexos (DRASC)

Miguel González Pérez, Química Física (UB).

A. Activitat dins la línia de recerca

Fisicoquímica de biosistemes i disseny de fàrmacs

B. Pla de treball

L'estudi QM/MM a nivell MP2c AM1/MM del mecanisme de reacció de la proteasa NS3/NS4A del virus de la hepatitis C amb els seus substrats principals (varies unions peptídiques de la poliproteïna vírica), s'ha finalitzat en el primer trimestre d'aquest any. També s'està augmentant el nivell de càlcul partint de geometries DFTB/MM (superfície d'energia potencial i superfície d'energia lliure) i duent a terme correccions *ab initio*, per tal de fer possible una millor caracterització de les etapes de reacció [prioritzant l'etapa limitat de la velocitat (etapa 1; procés d'acilació)], així com per la predicció teòrica de constants de velocitat (teoria variacional de l'estat de transició) i la determinació de possibles inhibidors no convencionals ("TS analogs").

C. Objectius assolits

L'estudi QM/MM, principalment a nivell MP2c AM1/MM, del mecanisme de reacció (etapes de reacció, estructura de punts estacionaris, i perfils d'energia i d'energia lliure) de les reaccions de la proteasa NS3/NS4A del virus de la hepatitis C amb el seus tres substrats principals s'ha completat i publicat durant aquest any. Es tracta del punt de partida necessari per dur a terme estudis encara més sofisticats, alguns d'ells amb força projecció aplicada. Aquests estudis estaran adreçats, primer de tot, a augmentar el nivell de càlcul i, després, es plantejarà d'una banda la predicció teòrica de constants de velocitat en aquests sistemes enzimàtics (en fase de realització) i, d'altra banda, la caracterització de

III. ACTIVITAT CIENTÍFICA DELS MEMBRES DE L'IQTCUB

“TS analogs”, que podrien actuar com a inhibidors no convencionals d'aquesta proteasa, principal diana terapèutica contra la hepatitis C.

Simulació Quàntica de Processos Biològics

M. Carme Rovira Virgili, Parc Científic de Barcelona.

A. Activitat dins la línia de recerca

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 l'any 2010 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 clàssica i emprant nous algorismes de metadinàmica, hem determinat el paper d'una molècula d'aigua en el cicle catalític de la peroxidasa de rave picant (Vidossich i col. *J. Phys. Chem.* 2010). El nostre estudi presenta un exemple de sistema on les conformacions reactives (és a dir, estructures que donen lloc a una reacció química de baixa barrera energètica) corresponen a una petita població dels estats accessibles del sistema (Vidossich et al. *Arch. Biophys. Biochem.* 2010). Per altra banda, la simulació del mecanisme de l'enzim Golgi α -mannosidase (GMII) mitjançant tècniques QM/MM i metadinàmica (Petersen i col. *J. Am. Chem. Soc.* 2010) ha permès la indentificació de la conformació del substrat durant tot el camí de reacció i els resultats s'han emprat per explicar la potencia relativa d'inhibidors anticancer GMII formulats recentment. Mitjançant l'anàlisi de les conformacions d'una molècula de sucre aïllada (fucosa i mannososa) hem introduït un protocol que permet predir l'estructura del substrat en el complex de Michaelis (Lammerts van Bueren i col. *J. Am. Chem. Soc.* 2010; Ardèvol i col. *Manuscript en revisió*).

C. Objectius assolits

1) S'ha demostrat que el canal principal de l'enzim horseradish peroxidasa es troba hidratat i que una d'aquestes molècules d'aigua té

III. ACTIVITAT CIENTÍFICA DELS MEMBRES DE L'IQTCUB

un paper catalític (Vidossich i col. J. Phys. Chem. B 2010).

2) S'ha determinat l'itinerari conformacional del substrat durant la catàlisi en les α -L-fucosidases (Lammerts van Bueren i col. J. Am. Chem. Soc. 2010).

3) S'ha investigat els mecanismes de reconeixement de substrat en el canal d'amoni Amtb d'*Escherichia coli* (Nygaard i col. J. Phys. Chem. B 2010).

4) S'ha proposat un nou mecanisme per al trencament de l'enllaç cobalt-carboni en el coenzim de la vitamina B12, basat en una transferència electrònica prèvia a l'escisió de l'enllaç (Alfonso-Prieto i col. J. Phys. Chem. B 2010).

5) S'ha proposat que la interacció de sucres amb pèptids amiloides controla el procés de fibrillogènesi.

Biofísicoquímica de Macromolècules i Col.loides

Francesc Mas Pujadas, Química Física (UB).

A. Activitat i pla de treball

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 en primer lloc la dependència temporal del coeficient de difusió de l'alfa-quimiotripsina en situacions de crowding macromolecular, i posteriorment l'efecte sobre la seva reactivitat. També, s'han realitzat càlculs de docking de diferents sistemes peptídics relacionats amb el receptor d'estrogen.

Línia 6

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 sites 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 o grafit. El models microcinètics han permès finalment confirmar els processos més importants en cada cas i a la vegada determinar els recobriments finals de la superfície i els coeficients de recambinació atòmica a diferents condicions de pressió i temperatura, en bon acord amb les poques dades experimentals existents.

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

III. ACTIVITAT CIENTÍFICA DELS MEMBRES DE L'IQTCUB

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 CO_2 i CH_4 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'han demostrat les diferències en el comportament redox de nanopartícules d'òxid de ceri respecte a les superfícies exteses. S'han estudiat les interaccions entre clústers de Pt i superfícies i partícules d'òxid de ceri. S'ha estudiat la reactivitat de sistemes formats per capes fines o petits clusters d'alguns metalls de transició sobre carbur de titani envers la dissociació de molècules d'oxigen.

Línia 7

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 intermoleculars $\text{Br}\cdots\text{Br}$ 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 basat en pnictur tipus LaOAsFe .

III. ACTIVITAT CIENTÍFICA DELS MEMBRES DE L'IQTCUB

B. Pla de treball

Per a l'estudi de l'estructura electrònica de sòlids fortament correlacionats s'han combinat models periòdics i de *cluster* 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 explorat el material precursor del superconductor de més elevada temperatura crítica, (el cuprat de mercuri y bari) observant importants diferències a la densitat electrònica d'estats respecte altres òxids de coure superconductors. S'ha dopat el cuprat precursor de calci mitjançant substitucions explícites d'àtoms de sodi, aconseguint sistemes superconductors de diferent grau de dopatge. S'ha explorat el nou funcional híbrid "HSE" mitjançant funcions d'ones planes en un model periòdic

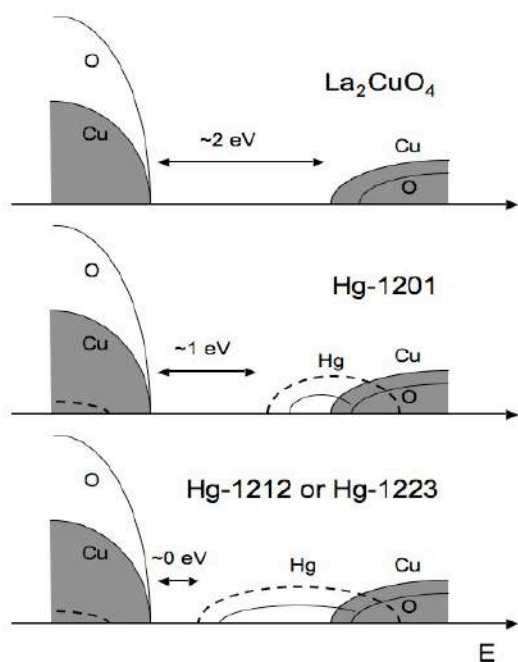


Figura 3. Gap aillant en la família de cuprats de mercuri comparada amb el cuprat prototípic de La₂CuO₄. S'observa que els àtoms dels plans Hg-O juguen un paper important als estats de conducció.

Electronic Structure and Symmetry (ESS)

Pere Alemany i Cahner, Química Física (UB).

A. Activitat dins la línia de recerca

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 o les propietats magnètiques observades amb les característiques de l'estructura atòmica dels materials. En concret, pel que fa a les propietats de transport, estem interessats tant en metalls de baixa dimensionalitat com en les fases de Zintl amb propietats elèctriques anòmales, mentre que, en el camp del magnetisme, la nostra atenció se centra en l'acoblament magnètic en vanadats complexos.

B. Pla de treball y objectius assolits

El treball en aquesta línia s'ha centrat, per una part, en l'estudi de la migració dels ions Cu^+ en les fases CuFeS_2 obtingudes per la delitiació completa del LiCuFeS_2 . S'ha estudiat també la influència de l'estructura cristal·lina en les magnituds relatives de les constants d'acoblament en dos compostos, el $\text{Sr}_2\text{V}_3\text{O}_9$ i el $\text{Ba}_2\text{V}_3\text{O}_9$, que malgrat presentar la mateixa estequiometria cristal·litzen en estructures força diferents, raó per la qual presenten també uns comportaments magnètics clarament diferenciats.

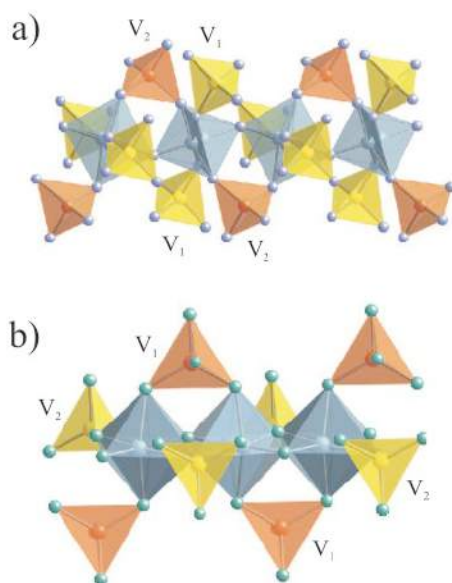


Figura 4. Estructures cristal·lines de a) $\text{Sr}_2\text{V}_3\text{O}_9$ i b) $\text{Ba}_2\text{V}_3\text{O}_9$ mostrant com les cadenes d'octaedres paramagnètics V^{4+}O_6 (en blau) s'acoblen de diferent manera a través de tetraedres pont V^{5+}O_4 (en groc i taronja).

III. ACTIVITAT CIENTÍFICA DELS MEMBRES DE L'IQTCUB

III.3. Resultats més rellevants

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

L1. MÈTODES TEÒRICS I ALGORISMES

Symmetry Operation Measures of the Electron Density

D. Casanova, P. Alemany, S. Alvarez, *J. Comp. Chem.*, 31 (2010), 2389 - 2404.

En aquest treball s'estén el formalisme de les mesures contínues de simetria a l'estudi de les propietats de simetria de la densitat electrònica, presentant tant els algorismes necessaris per a calcular les CSM com alguns exemples il·lustratius de les seves aplicacions.

Implementation of an Algorithm Based on the Runge-Kutta-Fehlberg Technique and the Potential Energy as a Reaction Coordinate to Locate Intrinsic Reaction Paths

A. Aguilar-Mogas, X. Giménez, J. M. Bofill, *J. Comp. Chem.*, 31 (2010) 2510 - 2525.

Es proporciona un algorisme molt estable basat en l'energia potencial com a variable independent. Es mostra que aquest algorisme és aplicable sense dificultat a Superfícies d'Energia Potencial "patològiques", és a dir, que presenten dificultats, en quant a la presència de punts notables, molt superiors a les superfícies usals. Es discuteix a més com altres tècniques, molt utilitzades a la literatura, poden dur a descripcions errònies si la superfície és suficientment complexa.

The Reaction between HO and (H₂O)_n, (n=1,3) clusters. Reaction Mechanisms and Tunnel Effects.

J. González, M. Caballero, A. Aguilar-Mogas, M. Torrent-Sucarrat, R. Crehuet, A. Solé, X. Giménez, S. Olivella, J. M. Bofill, J. M. Anglada, *Theor. Chem. Acc.* (en premsa).

Es duu a terme un estudi combinat d'estructura electrònica i

III. ACTIVITAT CIENTÍFICA DELS MEMBRES DE L'IQTCUB

dinàmica quàntica, en processos de transferència d'hidrogen dins clusters d'aigua de diferent tamany. Els càlculs referits a l'estructura electrònica són de qualitat molt elevada, mostrant que l'addició de cada molècula d'aigua té un efecte estabilitzador sobre els complexos pre- i post-estat de transició. Per altra banda, els càlculs dinàmics s'efectuen mitjançant el mètode Q-RPH, recentment desenvolupat dins el grup, i que ha mostrat la seva bondat en reaccions elementals de referència. La transferència d'hidrogen mostra reactivitat a la regió túnel força inusual, pel fet de ser més elevada del que cabria esperar, i per la importància de la simetria de l'estat de transició.

A solution algorithm for the Classical Schrödinger Equation: how quantum can be classical mechanics?

X. Giménez, J. M. Bofill, *J. Chem. Phys.* (enviat).

Es proporciona, per primera vegada, un algorisme capaç de resoldre, per a un sistema molecular genèric, l'anomenada Equació Clàssica de Schrödinger, és a dir, l'equació d'ones clàssica que presenta una estructura més propera a la Mecànica Quàntica. L'algorisme, basat en la conversió de l'equació original en una equació matricial de valors propis que s'ha de resoldre mitjançant cicles autoconsistents, es mostra capaç d'arribar a la solució final amb relativament pocs cicles iteratius. Sorprenentment, l'equació de Schrödinger clàssica es mostra capaç de descriure l'efecte túnel profund en processos de transmissió, allí on resultaven insuficients sofisticats mètodes semiclàssics.

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

DFT and kinetics study of O/O₂ mixtures reacting over a graphite (0001) basal surface

V. Morón, P. Gamallo i R. Sayós, *Theor. Chem. Acc.* (2010) (en premsa).

En aquest treball hem realitzat càlculs DFT per investigar la interacció d'oxigen atòmic i molecular amb la superfície basal de grafit per a diferents recobriments atòmics. Dues capes de carboni han estat prou per representar acuradament la superfície de grafit. Els àtoms d'oxigen s'adsorbeixen principalment sobre els ponts de C, formant una estructura tipus epoxi amb un *puckering* dels carbonis, amb energies d'adsorció en l'interval 0.95-1.28 eV, segons el recobriment atòmic. L'oxigen molecular només mostra una molt dèbil fisisorció. Hem estudiat la difusió i l'adsorció atòmica juntament amb la recombinació atòmica, via els mecanismes Eley-Rideal i Langmuir-Hinshelwood. Tots aquests processos són activats amb barreres energètiques menors per als recobriments més baixos. Els efectes de relaxació del grafit són poc importants. Hem proposat un model microcinètic amb sis processos heterogenis elementals per poder veure el comportament global de diverses mescles d'O/O₂ interaccionant amb una superfície de grafit entre 300-1000 K. Les constants de velocitat han estat calculades mitjançant la Teoria de l'Estat de Transició. S'ha observat un recobriment final molt baix ($\theta_o < 0.5 \%$) i també uns coeficients de recombinació atòmica molt petits ($\gamma_o < 5 \times 10^{-4}$). La reacció Eley-Rideal juntament amb l'adsorció i desorció atòmica són els processos més importants, seguint la reacció Langmuir-Hinshelwood menyspreable.

Quasiclassical dynamics and kinetics of the N + NO → N + O, NO + N atmospheric reactions

P. Gamallo, R. Martínez, R. Sayós, M. González., *J. Chem. Phys.* 132 (2010), 144304-1/9

III. ACTIVITAT CIENTÍFICA DELS MEMBRES DE L'IQTCUB

Aquest treball completa l'estudi teòric de la dinàmica i cinètica d'aquesta important reacció atmosfèrica (T: 10-5000 K), utilitzant representacions analítiques de les dues superfícies d'energia potencial de més baixa energia del sistema, basades en càlculs *ab initio*, i desenvolupades en el nostre grup. La producció de $N_2 + O$ domina la reactivitat del sistema $N + NO$, com es d'esperar en base a les importants barreres implicades en el cas de la reacció de bescanvi d'oxigen ($N' + NO \rightarrow N + N'O$). Tant els resultats obtinguts a altes com a baixes temperatures des de una perspectiva pràctica. Els primers en el context dels processos de combustió i els segons en el context de l'astroquímica, mentre que les temperatures intermèdies són d'interès en química atmosfèrica. A més a més del bon acord existent en les condicions on és possible comparar amb dades cinètiques experimentals, cal destacar que les superfícies d'energia potencial utilitzades poden ser útils per determinar constants de velocitat (en condicions d'equilibri o de no equilibri) a molt altes temperatures (p. ex., 5000-15000 K), que avui dia són impossibles de determinar experimentalment i són rellevants, p. ex., en el context de la re-entrada de vehicles espacial a l'atmosfera terrestre, i més en general en el context dels vols en condicions hipersòniques. Les constants de velocitat sobre ambdues superfícies de potencial, obtingudes a diversos nivells de càlcul, i la constant de velocitat global es mostren a la Figura 5.

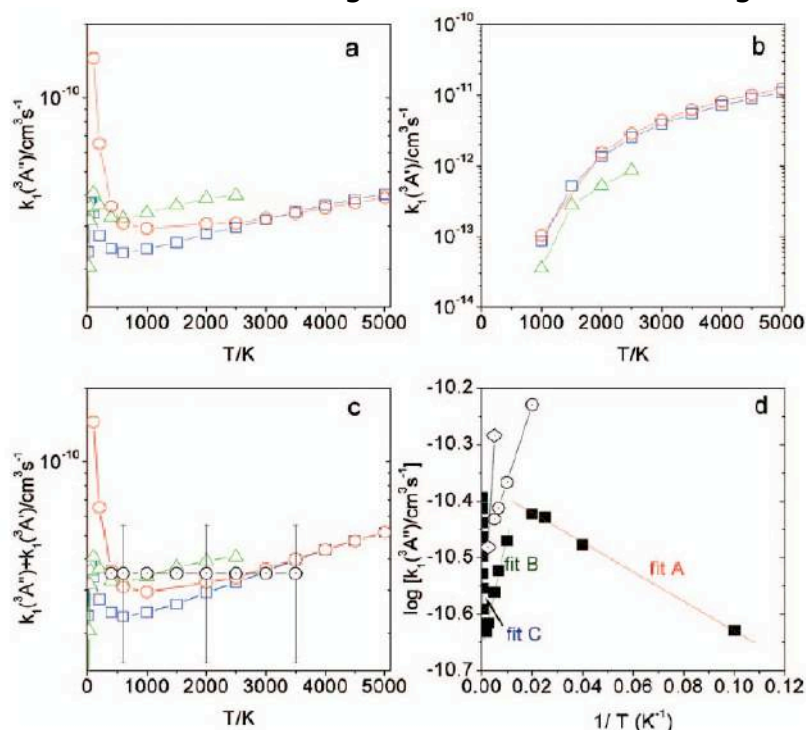


Figura 5. Constant de velocitat per la reacció $N + NO \rightarrow N_2 + O$ segons els mètodes teòrics QCT (“quasiclassical trajectories”), VTST (“variational transition state theory”) i RWP-J shifting (“real wave packet” amb

III. ACTIVITAT CIENTÍFICA DELS MEMBRES DE L'IQTCUB

l'aproximació "J shifting") per les superfícies de potencial fonamental ($^3A''$) (a) i primera excitada ($^3A'$) (b). La constant de velocitat global, es a dir, tenint en compte la contribució d'ambdues superfícies es mostra a la subfigura (c) i la representació d'Arrhenius per la superfície fonamental es mostra a la subfigura (d). A (c) i (d) també s'han inclòs resultats experimentals (cercles amb punt central i rombes amb punt central).

Renner-Teller quantum dynamics of the $NH(a^1 \sigma)$ + H reactions on the $NH_2 A^2A_1$ and X^2B_1 coupled surfaces.

P. Defazio, P. Gamallo, M. González, C. Petrongolo, *J. Phys. Chem. A* 114 (2010), 9749-9754.

Primer estudi dinàmic-quàntic exacte d'aquesta important 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, donada l'eficiència d'aquesta estratègia de càlcul. Es tracta d'un estudi complementari del realitzat per nosaltres molt recentment sobre la reacció inversa ($N(^2D) + H_2$) i, que va ser el primer estudi quàntic exacte que es va publicar inclouen l'efecte Renner-Teller. Entre altres coses, mostra la necessitat de determinar a nivell *ab initio* el acoblaments entre les dues superfícies de potencial implicades en la reacció, i abandonar els esquemes de treball semi-empírics utilitzats fins ara. Tot i això els resultats cinètics obtinguts són, generalment, força satisfactoris. El diagrama de correlació electrònica pels estats electrònics X^2B_1 i A^2A_1 del NH_2 , mostrant les seves connexions amb les diverses asímtotes possibles, es mostra a la Figura 6.

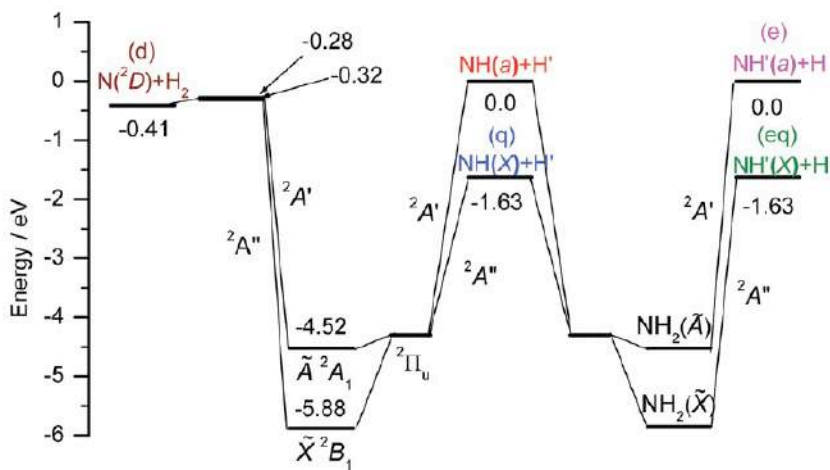


Fig. 6. Diagrama de correlació electrònica pels estats electrònics X^2B_1 i A^2A_1 del NH_2 , mostrant les seves connexions amb les diverses

III. ACTIVITAT CIENTÍFICA DELS MEMBRES DE L'IQTCUB

asíptotes possibles ($N(2D) + H_2$, $NH(X) + H$, i $NH(a) + H$), via les dos superfícies d'energia potencial de més baixa energia. L'efecte Renner-Teller és el responsable de l'acoblament entre les superfícies de potencial $12A''$ i $12A'$ i es produeix, principalment, al voltant de geometries del sistema properes a l'estructura lineal $HNH(2 \sigma_u)$ del NH_2 , situació on els estats X^2B_1 i A^2A_1 són degenerats.

On the Dissociation of Ground State trans-HOOO Radical: A Theoretical Study.

J. M. Anglada, S. Olivella, A. Solé, *J. Chem. Theory Comput.*, 6 (2010) 2743-2750.

El radical hidrotrioxil ($HOOO\bullet$) exerceix un paper crucial en els processos atmosfèrics en que participen el radical hidroxil ($HO\bullet$) i l'oxigen molecular (O_2). La geometria d'equilibri de l'estat electrònic fonamental (X^2A'') del conformer trans del $HOOO\bullet$ i la seva dissociació unimolecular en $HO\bullet$ ($X^2\Pi$) i O_2 ($X^3\Sigma_g^-$) s'han estudiat teòricament amb les metodologies CASSCF i CASPT2 amb la base aug-cc-pVTZ. D'una banda els càlculs CASSCF(19,15) prediuen per al trans- $HOOO\bullet$ una estructura d'equilibri amb una distància de l'enllaç central O-O de 1.674 Å i donen una energia clàssica de dissociació D_e de 1.1 kcal/mol. En aquest nivell de teoria es troba que la dissociació té lloc a través d'una estructura de transició amb una barrera d'energia baixa (1.5 kcal/mol). D'altra banda els càlculs CASPT2(19,15) prediuen per al trans- $HOOO\bullet$ una longitud de l'enllaç central O-O de 1.682 Å, que està en excel.lent acord amb el valor experimental de 1.688 Å, i donen un valor de D_e de 5.8 kcal/mol. La inclusió de la correcció de l'energia del punt zero (determinada a partir de les freqüències vibracionals harmòniques calculades a nivell CASSCF(19,15)/aug-cc-pVTZ) dóna lloc a una energia de dissociació a 0 K de $D_0 = 3.0$ kcal/mol. Aquest valor de D_0 està en excel.lent acord amb el valor experimental de $D_0 = 2.9 \pm 0.1$ kcal/mol determinat recentment per Le Picard i col.laboradors (*Science* 2010, 328, 1258-1262). A nivell de teoria CASPT2 no hem trobat per a la dissociació del trans- $HOOO\bullet$ una barrera energètica que no sigui la imposada per la endoergicitat de la reacció. Aquesta predicció està d'acord amb els resultats experimentals de Le Picard i col.laboradors, que indiquen que la reacció de l' $HO\bullet$ amb O_2 per donar $HOOO\bullet$ és un procés d'associació que té lloc sense barrera.

Computational Study of Promising Organic Dyes for High-Performance Sensitized Solar Cells.

D. Casanova, F. P. Rotzinger, M. Grätzel, *J. Chem. Theory Comput.*, 6 (2010), 1219 - 1227.

En aquest article s'han analitzat a nivell computacional 4 molècules orgàniques potencialment aptes per al seu ús com a sensititzadors en cel·les solars. L'estudi analitza els punts clau per entendre les característiques fotoquímiques d'aquestes molècules, posant èmfasi en els paràmetres més importants a l'hora d'entendre el diferent comportament dels 4 sistemes estudiats. A més, en aquest treball s'intenta sistematitzar l'estudi computacional d'aquest tipus de sistemes.

L3. ESTRUCTURA MOLECULAR I QUÍMICA QUÀNTICA

Experimental cross-sections energy dependence and ab initio electronic structure survey of the ground singlet potential surface for reactive $\text{Li}^+ + n\text{-ClC}_3\text{H}_7$ collisions at low energies.

J. M. Lucas, J. De Andrés, M. Albertí, J.M. Bofill, D. Bassi, A. Aguilar.,
Phys. Chem. Chem. Phys. (en premsa).

En aquest treball s'estudien utilitzant la tècnica RF-GIB [1] els diversos processos reactius que tenen lloc en la col·lisió de ions Li^+ amb $n\text{-C}_3\text{H}_7\text{Cl}$ (isòmer del $n\text{-C}_3\text{H}_7\text{Cl}$, estudiat amb anterioritat [2]), en particular les reaccions de d'eliminació de HCl tot formant-se simultàniament propè C_3H_6 [3]. Els ions liti inductors de la reacció de deshidrohalogenació poden aparèixer lligats a una (LiC_3H_6^+) o altra molècula de productes (reaccions 1 (LiC_3H_6^+) i 2 (LiHCl^+), respectivament) i ésser caracteritzats per espectrometria de massa. Les funcions d'excitació per la formació d'ambdós productes presenta la forma típica de les reaccions ió-molècula de manera a les energies més elevades la reactivitat del procés tendeix a desaparèixer completament (Fig. 1). Paral·lelament a les reaccions esmentades, també s'ha pogut observar i mesurar la secció eficaç de formació de ions C_3H_7^+ que es poden formar per descomposició, en aquest cas del adducte (M0) ió-molècula [$\text{Li}^+ - i\text{-C}_3\text{H}_7\text{Cl}$] $^+$ a energies suficients per a dissociar heterolíticament en C_3H_7^+ i HCl. Augmentant l'energia de col·lisió els ions C_3H_7^+ es descomponen havent-ne observat el canal de formació de en $\text{C}_2\text{H}_3^+ + \text{CH}_4$. Els estudis han estat duts a terme en l'interval 0.05 - 7.00 eV d'energies de col·lisió al centre de masses del sistema. L'estudi ha estat complementat amb un ab initio a nivell MP2 que ha permès obtenir informació tant qualitativa com quantitativa de la superfície d'energia potencial (SEP) que de manera adiabàtica correlaciona els reactius en els seus estat electrònic fonamental amb el corresponent de productes, produint-se tota la reacció de manera adiabàtica sobre la SEP singlet fonamental del sistema (Fig. 7). Aquest estudi ha posat de manifest que la reacció que porta als productes de reacció (1) i (2) des del adducte M0, comporta prèviament una isomerització del complex ió-molècula [$\text{Li}-n\text{-ClC}_3\text{H}_7$] $^+$ inicialment format a l'adducte [$\text{Li}-n\text{-ClC}_3\text{H}_7$] $^+$, tot seguint a partir d'aquest moment el mateix camí de reacció que en el cas de la reacció $\text{Li}^+ + n\text{-C}_3\text{H}_7\text{Cl}$ (Figura 7).

Els resultats obtinguts posen de manifest que les reaccions de deshidrohalogenació estudiades presenten un camí de reacció força complex, tot caracteritzant-se la SEP global per la seva planaritat llevat dels pous atractius de potencial associats a les interaccions del tipus ió-

III. ACTIVITAT CIENTÍFICA DELS MEMBRES DE L'IQTCUB

molècula tant en la part asimptòtica de la superfície corresponent a reactius com a productes .

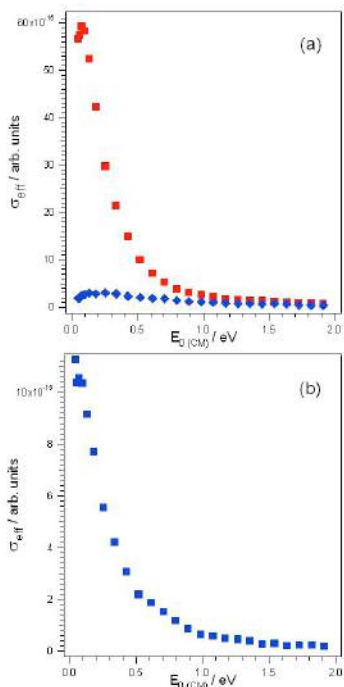


Fig. 7 (a) Dependència amb l'energia de les seccions eficaces de les reaccions de deshidrohalogenació en els canals 1 (■) i 2 (◆) de reacció. (b) Dependència amb l'energia de la secció eficaç per la formació de l'adducte ió-molècula $[\text{Li-n-C}_3\text{H}_7]^+$ (■).

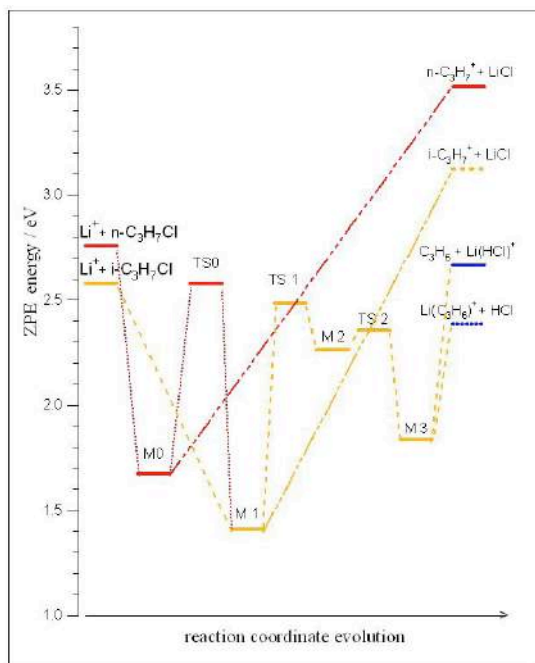


Fig. 8 Representació esquemàtica del perfil de reacció a nivell MP2/TVZ per a energies de punt zero (ZPE) dels diferents punts estacionaris caracteritzats sobre la SEP singlet fonamental del sistema $[\text{Li-C}_3\text{H}_7]^+$ incloent els dos possibles canals d'entrada de reactius al llarg dels camins de reacció de mínima energia des de reactius fins a productes (l'energia electrònica total de reactius es pren com origen d'energies).

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

Cholesterol Induces Specific Spatial and Orientational Order in Cholesterol/Phospholipid Membranes

H.Martinez-Seara, T. Róg, M. Karttunen, I. Vattulainen, R. Reigada, *PLoS One*, 5 (2010), e11162.

En aquest treball hem estudiat els efectes organitzatius del colesterol en les membranes lipídiques a un nivell molecular mitjançant l'ús de Dinàmica Molecular. Hem pogut caracteritzar la capacitat que té el colesterol per organitzar els lípids dels seu voltant i crear estructures fluides però malgrat tot amb un ordre posicional i orientacional bastant clar fins a distàncies d'uns pocs nanometres. Aquestes estructures mostren per exemple una ordenació triangular pels colesterols en el pla de la bicapa, amb un lípid encaixat entre cadascuna de les parelles de colesterols. Els colesterols entre ells i els lípids amb els colesterols mostren orientacions clarament preferides que van en el sentit de compactar el sistema i expliquen per primer cop el mecanisme de condensació del colesterol a escala molecular.

Direct mapping of nanoscale compositional connectivity on intact cell membranes.

T.S. van Zanten, J. Gómez, C. Manzo, A. Cambi, J. Buceta, R. Reigada, M. F. García-Parajó, *PNAS* (en premsa).

En aquest treball hem posat a disposició del grup experimental de la Dra.García-Parajó (Parc Científic de Barcelona) els nostres coneixements en modelització per tal d'explicar unes observacions experimentals sobre la distribució d'unes determinades proteïnes en membranes cel·lulars. Concretament les observacions experimentals constataren una proximitat entre tipus de proteïnes diferents molt més curta que el que seria d'esperar per una distribució aleatòria. Nosaltres, mitjançant models Monte Carlo i descripcions contínues pels lípids de la membrana vam aconseguir capturar també aquestes observacions, i predir-ne d'altres que van donar lloc a noves observacions experimentals que comparaven amb èxit amb els resultats del model. El model va ajudar a entendre que les proteïnes estudiades es movien en un medi lipídic en absolut homogeni, i si en canvi organitzat en petites estructures formades per lípids saturats i colesterol de tamany característic de 100-120 nanometres.

L5. FÍSICOQUÍMICA DE BIOSISTEMES I DISSENY DE FÀRMACS

A comparative QM/MM study of the reaction mechanism of the hepatitis C virus NS3/NS4A protease with the three main natural substrates.

A. Rodríguez, C. Oliva, M. González, *Phys. Chem. Chem. Phys.* 12 (2010), 8001-8015.

Aquest treball completa el primer estudi teòric dut a terme sobre les tres reaccions principals de la proteasa NS3/NS4A del virus de la hepatitis C. Aquest enzim és, amb diferència, la molècula diana més important en la lluita contra aquesta malaltia. A nivell pràctic, es a dir en el context de la futura cerca d'inhibidors no convencionals (p. ex., "TS analogs"), com a resultats principals es pot destacar, d'una banda, la caracterització de l'estructura de l'estat de transició de l'etapa limitat de la velocitat (primera etapa del mecanisme, que es correspon al procés d'acilació). D'altra banda, finalment, s'ha aconseguit clarificar el paper especial que juga el residu Arg-155 de la proteasa. Concretament, la protecció de la interacció estabilitzant entre els residus Asp-81 i His-57, respecte de la possible afectació negativa d'aquesta interacció per molècules d'aigua de solvatació. Això ha permès entendre l'aparició de subtipus del virus de l'hepatitis C on l'Arg-155 apareix mutada amb un altre aminoàcid voluminos. Els resultats de la simulació MD (basada en el nivell de càlcul MM) que posen de manifest el paper que juga aquesta arginina es mostren a la Figura 9.

III. ACTIVITAT CIENTÍFICA DELS MEMBRES DE L'IQTCUB

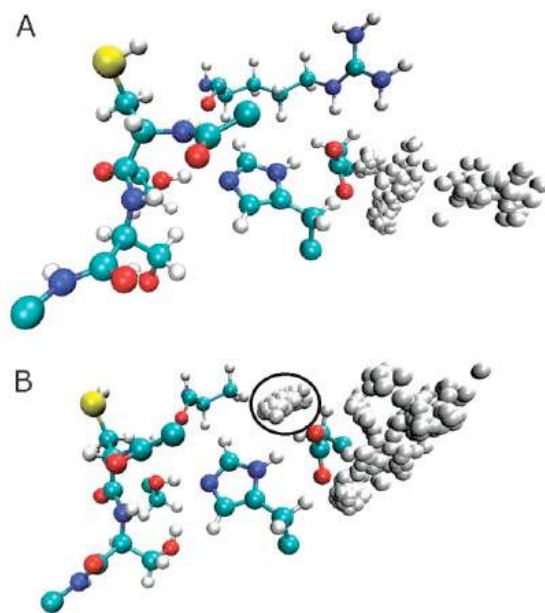


Figura 9. Àrea accessible per les molècules d'aigua al voltant de la regió d'interacció His-57-Asp-81, obtinguda a partir de simulacions MD pel complex de Michaelis de la proteasa amb el substrat (unió peptídica) NS5A/5B: enzim natural (A); enzim amb la mutació R155A (B). En el darrer cas les molècules d'aigua situades en el lloc anteriorment ocupat per la cadena lateral de la Arg-155 (molècules d'aigua encerclades) estan afectant la interacció His-57-Asp-81.

Molecular Mechanism of the Glycosylation Step Catalyzed by Golgi α -Mannosidase II. A QM/MM Metadynamics Investigation.

L. Petersen, A. Ardèvol, C. Rovira, P. Reilly, *J. Am. Chem. Soc.*, 132 (2010), 8291.

És conegut que la inhibició de l'enzim Golgi α -mannosidase (GMII) bloqueja la formació anormal d'oligosacàrids complexos, la qual cosa redueix la metastasi i el creixement tumoral en determinats tipus de càncer (mama, colon i pell). Per tal de trobar millors inhibidors d'aquest enzim, és molt important conèixer quina és la conformació del substrat en l'estat de transició de la reacció que aquest enzim catalitza (el trencament de dos residus de manosa d'un substrat GlcNAcMan5GlcNAc2, que és part del camí de glicosilació enzimàtica). La modelització del mecanisme de reacció mitjançant tècniques QM/MM i metadinàmica ha permès la identificació de la conformació del substrat durant tot el camí de reacció. Es tracta d'un itinerari on s'alternen conformacions de tipus *boat* i *skew-boat* de l'anell de sucre Man5,

III. ACTIVITAT CIENTÍFICA DELS MEMBRES DE L'IQTCUB

concretament l'itinerari és ${}^0S_2/B_{2,5} \rightarrow B_{2,5} \rightarrow {}^1S_5$ (complex de Michaelis \rightarrow estat de transició \rightarrow producte). Els resultats s'han emprat per explicar la potencia relativa d'inhibidors de GMII anticancer ígens proposats recentment.

Analysis of the reaction coordinate of α -L-fucosidases: a combined structural and quantum mechanical approach.

A. Lammerts van Bueren, A. Ardèvol, J. Fayers-Kerr, B. Luo, Y. Zhang, M. Sollogoub, Y. Blériot, C. Rovira, G. J. Davies, *J. Am. Chem. Soc.*, 132 (2010), 1804.

L'enzim α -L-fucosidasa te un paper en la regulació de les infeccions bacterianes i ha estat identificada com a possible diana en teràpia del càncer. La deficiència aquest enzim provoca una malaltia congènita d'acumulació lisosòmica anomenada fucosidosi. Entendre el mecanisme catalític de la α -L-fucosidasa és clau per entendre la seva funció. Em aquest treball conjunt experimental-teòric hem determinat l'itinerari conformacional que segueix el substrat de l'enzim durant la catàlisi. Mitjançant tècniques de raigs X s'ha aconseguit atrapar el complex de Michaelis i el principal intermedi de la reacció (l'anomenat l'intermedi covalent glicosil-enzim), predint que la reacció té lloc en l'hemisferi Sud de l'itinerari conformacional, concretament a través d'un itinerari 1C_4 (complex de Michaelis) \rightarrow 3H_4 (estat de transició) \rightarrow 3S_1 (intermedi covalent). Els càlculs de metadinàmica d'un anell de α -L-fucopiranosà mostren que la conformació 1C_4 és la més estable energèticament i que hi ha un segon mínim en la regió 3S_1 . Per tant, teoria i experiment donen suport a que el substrat evoluciona segons un itinerari ${}^1C_4 \rightarrow {}^3H_4 \rightarrow {}^3S_1$ en les reaccions catalitzades per α -L-fucosidasa.

On the role of water in peroxidase catalysis: A theoretical investigation of HRP compound I formation.

P. Vidossich, G. Fiorin, M. Alfonso-Prieto, E. Derat, S. Shaik, C. Rovira, *J. Phys. Chem. B*, 114 (2010), 5161.

En aquest treball es mostra com una molècula d'aigua actua de biocatalitzador en el cicle catalític de la peroxidasa de rave picant (horseradish peroxidase). Per una banda, s'investiga la dinàmica de les molècules d'aigua al centre actiu de l'enzim, amb la finalitat de desxifrar el seu paper en la formació del principal intermedi de reacció, l'anomenat compost I ($\text{Por}^{\bullet+}\text{-Fe}^{\text{IV}}=\text{O}$) per reacció de l'enzim en l'estat normal (Fe^{III}) amb el peròxid d'hidrogen (H_2O_2). Les simulacions de dinàmica molecular d'equilibri mostren que, d'acord amb els experiments, el centre actiu de

III. ACTIVITAT CIENTÍFICA DELS MEMBRES DE L'IQTCUB

l'enzim està hidratat, amb un promig de 2-3 molècules d'aigua situades a menys de 5 Å del peròxid d'hidrogen enllaçat. Les conformacions on una molécula d'aigua fa de pont entre l'H₂O₂ i la histidina distal (conformacions reactives), tot i ser rellevants en l'escala de temps de la catàlisi, es donen amb una probabilitat molt baixa. Per altra banda, les simulacions de metadinàmica permeten identificar varis llocs d'interacció preferents, separats per petites barreres energètiques i, el més important, conformacions reactives que es troben a només 1 kcal/mol d'un dels mínims locals i que per tant són fàcilment accessibles. Això representa un escenari ideal per una eficient formació de l'intermedi compost I, on una xarxa de ponts d'hidrogen que involucren els reactius i els residus catalítics (incloent la molécula d'H₂O que intervé en la reacció) s'han de reorganitzar per tal de transferir un protó a un dels oxígens del peròxid d'hidrogen. El nostre estudi presenta un exemple de sistema on les conformacions reactives (és a dir, estructures caracteritzades per una baixa barrera energètica de la reacció química) corresponen a una petita població dels estats accessibles del sistema.

Diffusion of alpha-Chymotrypsin in solution crowded media. A fluorescence recovery after photobleaching study.

I. Pastor, E. Vilaseca, S. Madurga, J.L. Garcés, M. Cascante, F. Mas, *Journal of Physical Chemistry B*, 114 (2010), 4028.

S'estudia amb la tècnica FRAP (Fluorescence recovery after photobleaching) el procés de difusió de la alpha-Chymotripsina en diferents medis aglomerats (crowded) deguts a la presència de Dextrans que mimetitzen un entorn intercel·lular. Els resultats obtinguts permeten identificar i quantificar el procés difusiu normal o anòmal d'aquesta proteïna en funció de la mida i de la concentració dels agents crowder.

III. ACTIVITAT CIENTÍFICA DELS MEMBRES DE L'IQTCUB

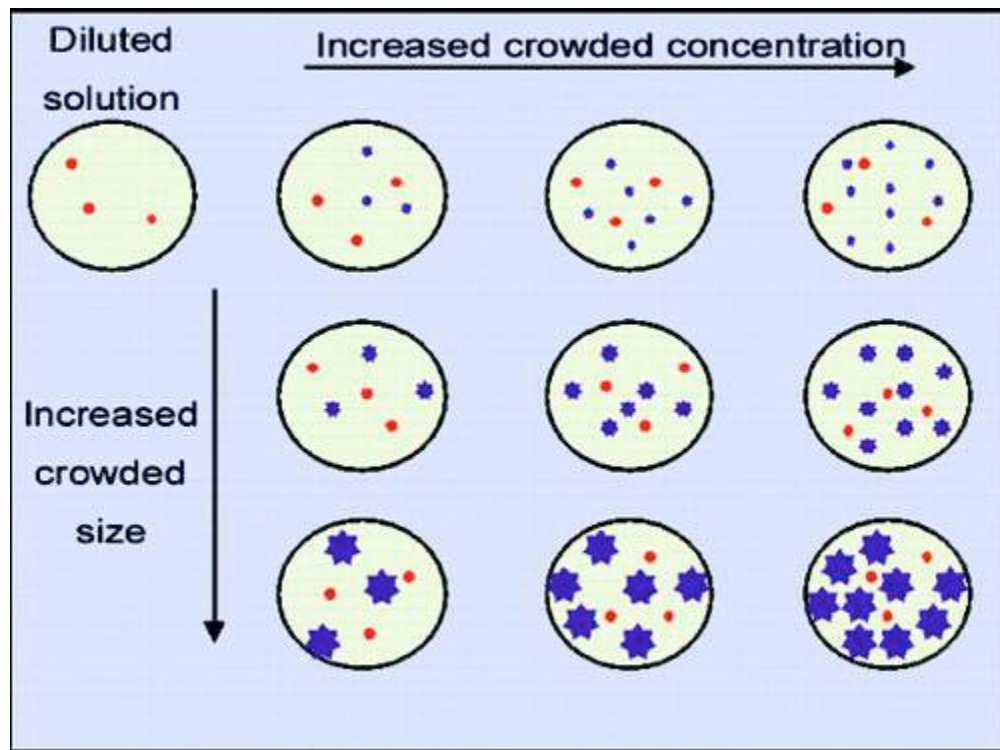


Figura 10.

L6. NANOESTRUCTURES, SUPERFÍCIES, INTERFASES I CATÀLISI

Role of Au-C interactions on the catalytic activity of Au nanoparticles supported on TiC(001) towards molecular oxygen dissociation.

J. A. Rodriguez, L. Feria, T. Jirsak, Y. Takahashi, K. Nakamura and F. Illas, *J. Am. Chem. Soc.*, 132 (2010), 3177-3186.

La fotoemisió d'elevada resolució i els càlculs del funcional de la densidad en models de superfície s'han utilitzat per a l'estudi de la interacció i subsegüent disociació de O₂ amb nanopartícules de Au suportades en TiC (001). Càlculs mitjançant el funcional de la densidad en grans supercel.les mostren que el contacte Au-TiC(001) és essencial per a la polarització de carga i millora en l'activitat química del Au.

Prospective Role of Multicenter Bonding for Efficient and Selective Hydrogen Transport.

Stradi, F. Illas, S. T. Bromley, *Phys. Rev. Lett.*, 105 (2010), 045901.

Els enllaços multicentrics són capaços de reduir les barreres de transport en sòlids. L'anàlisi teòric d'àtoms d'hidrogen en un polimorf nanoporòs de ZnO (SOD-ZnO) ha mostrat que radicalment redueix la barrera de transport quan es situa aprop de membranes de paladi i a més a més indueix dopatge de tipus d. El SOD-ZnO també destaca per ser termodinàmicament favoregut en tensió triaxial i selectiu per encapsular els àtoms d'hidrogen dèbilment perturbats. Aquests materials tenen un us potencial en el transport nuclear, el control y la depuració.

III. ACTIVITAT CIENTÍFICA DELS MEMBRES DE L'IQTCUB

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

Theoretical Study of Substituted PBPB Dimers: Structural Analysis, Tetraradical Character, and Excited States.

F. Bell, D. Casanova, M. Head-Gordon, *J. Am. Chem. Soc.*, 132 (2010), 11314 - 11322.

En aquest estudi s'han aplicat un ampli ventall de metodologies per a l'estudi de dimers PBPB. L'estudi conté un anàlisi detallat de la diferent estabilitat de les possibles estructures moleculars, així com de la seva estructura electrònica. L'estudi racionalitza la suposada interacció entre unitats PBPB a partir del càlcul de l'energia de deslocalització, les interaccions magnètiques intramoleculars i l'estudi d'estats excitats. Els resultats obtinguts aporten una explicació clara i completa dels fenòmens experimentals observats.

III. ACTIVITAT CIENTÍFICA DELS MEMBRES DE L'IQTCUB

ARTICLES PUBLICATS L'ANY 2010

1. *Antiferromagnetism or Delocalized Spin in a Cu₃S₂ Core?*
S. Alvarez, E. Ruiz.
Chemistry-A European Journal, 16, (2010) 2726.
2. *Two Temperature-independent Spinomers of the Dinuclear Mn(III) Compound [$\{Mn(H_2O)(phen)\}_2(\mu-2-CIC_6H_4COO)_2(\mu-O)](ClO_4)_2$*
V. Gómez, M. Corbella, G. Aullón.
Inorganic Chemistry, 49, (2010) 1471.
3. *Magnetic Coupling in Trinuclear partial Cubane Copper(II) Complexes with a Hydroxo Bridging Core and Peripheral Phenoxo Bridges from NNO-donor Schiff Base Ligand.*
C. Biswas, M. G. B. Drew, A. Figuerola, A.; S. Gómez-Coca, E. Ruiz, V. Tangoulis, A. Ghosh.
Inorganica Chimica Acta, 363, (2010) 846.
4. *A Novel Bipyridine-based Hexadentate Tripodal Framework with a Strong Preference for Trigonal Prismatic Co-ordination Geometries.*
J. C. Knight, S. Alvarez, A. J. Amoroso, P. G. Edwards, N. Singh.
Dalton Transactions, (2010) 3870.
5. *Extended Fe₄ Butterfly Complexes: Theoretical Analysis of Magnetic Properties and Magnetostructural Maps.*
S. Gómez-Coca, T. Cauchy, E. Ruiz.
Dalton Transactions, (2010) 4832.
6. *Synthesis of a novel Heptacoordinated Fe(III) Dinuclear Complex: Experimental and Theoretical Study of the Magnetic Properties.*
G. A. Graig, L. A. Barrios, J. Sánchez Costa, O. Roubeau, E. Ruiz, S. J. Teat, C. C. Wilson, L. Thomas, G. Aromí.
Dalton Transactions, (2010) 4874.
7. *Synthesis, Crystal Structure and Magnetic Properties of two Oxalato-bridged Dimetallic Trinuclear Complexes Combined with a Polar Cation.*
E. Pardo, C. Train, R. Lescouëzec, K. Boubekour, E. Ruiz, F. Lloret, M. Verdager.
Dalton Transactions, (2010) 4958.
8. *On the Electronic Structure and Stability of Icosahedral r-X₂Z₁₀H₁₂ and Z₁₂H₁₂₂- Clusters; r = {ortho, meta, para}, X = {C, Si}, Z = {B, Al}.*
J. M. Oliva, P. von R. Schleyer, G. Aullón, J. I. Burgos, I. Alkorta.
Physical Chemistry Chemical Physics, 12, (2010) 5101.

III. ACTIVITAT CIENTÍFICA DELS MEMBRES DE L'IQTCUB

9. *Ligand Association/Dissociation Paths and Ill Defined Coordination Numbers.*
A. Ruiz-Martínez, D. Casanova, S. Alvarez.
Chemistry-A European Journal, 16, (2010) 6567.
10. *Electronic Structure and Localization Properties of C₆₀Tan Clusters (n=1,3): A First-principles Study.*
M. Matsubara, C. Massobrio, L.M. Ramaniah, E. Ruiz, M. Boero.
Physical Review B, 81, (2010) 195433.
11. *Structural and Electronic Effects on the Exchange Interactions in Dinuclear Bis(phenoxo)-bridged Copper(II) Complexes.*
D. Venegas-Yazigi, D. Aravena, E. Spodine, E. Ruiz, S. Alvarez.
Coordination Chemistry Reviews, 254, (2010) 2086.
12. *A new Family of Oxime-based Hexanuclear Manganese(III) Single Molecule Magnets with High Anisotropy Energy Barriers.*
A. R. Tomsa, J. Martinez-Lillo, Y. Li, L.-M. Chamoreau, K. Boubekour, F. Farias, M. A. Novak, E. Cremades, E. Ruiz, A. Proust, M. Verdaguer, M. Gouzerh.
Chemical Communications, 46, (2010) 6106.
13. *Synthesis, Crystal Structure and Magnetic Properties of three Unprecedented Trinuclear and one very rare Tetranuclear Copper(II) Schiff-base Complexes supported by Mixed Azido/phenoxo/nitrato or Acetato Bridges.*
C. Biswas, M. G. B. Drew, E. Ruiz, M. Estrader, C. Diaz, A. Ghosh.
Dalton Transactions, (2010) 7484.
14. *Fatty Acid Carboxylate- and Anionic Surfactant-Controlled Delivery Systems That Use Mesoporous Silica Supports.*
C. Coll, E. Aznar, R. Martínez-Mañez, M. D. Marcos, F. Sancenón, J. Soto, P. Amorós, J. Cano, E. Ruiz.
Chemistry-A European Journal, 16, (2010) 10048.
15. *The Trigonal Prism in Coordination Chemistry.*
E. Cremades, J. Echeverría, S. Alvarez.
Chemistry-A European Journal, 16, (2010) 10389.
16. *Structural and Stability Studies of New σ -Diimine Complexes of Ag(I) and Cu(I): Experimental and Computational Comparison.*
V. Rosa, C. I. M. Santos, R. Welter, G. Aullón, C. Lodeiro, T. Avilès.
Inorganic Chemistry (en premsa).
17. *Magneto-Structural Correlation Studies and Theoretical Calculations*

III. ACTIVITAT CIENTÍFICA DELS MEMBRES DE L'IQTCUB

of a Unique Family of Single End-to-End Azide-Bridged Ni(II)₄ Cyclic Clusters.

S. Sasmal, S. Hazra, O. Kundu, S. Majumder, N. Aliaga-Alcalde, E. Ruiz, S. Mohanta.

Inorganic Chemistry (en premsa).

18. *Magnetic Properties of Largest-Spin Single Molecule Magnets: Mn₁₇ Complexes – A Density Functional Theory Approach.*

E. Cremades, E. Ruiz.

Inorganic Chemistry (en premsa).

19. *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.

Surface Science, 603 (2009) 2742-2751.

20. *Quasiclassical dynamics and kinetics of the $N + NO \rightarrow N_2 + O$, $NO + N$ atmospheric reactions.*

P. Gamallo, R. Martínez, R. Sayós, M. González.

Journal of Chemical Physics, 132 (2010) 144304-1-9.

21. *DFT and kinetics study of O/O₂ mixtures reacting over a graphite (0001) basal surface.*

V. Morón, P. Gamallo, R. Sayós.

Theoretical Chemistry Accounts (2010) (en premsa).

22. *Greatly facilitated oxygen vacancy formation in ceria crystallites at nanoscale*

A. Migani, G. N. Vayssilov, S. T. Bromley, F. Illas, K. M. Neyman.

Chem. Commun., (2010) 5936-5938.

23. *Methane Activation by Platinum: Critical Role of Edge and Corner Sites of Metal Nanoparticles.*

F. Viñes, Y. Lykhach, T. Staudt, M. P. A. Lorenz, C. Papp, H. P. Steinruck, J. Libuda, K. M. Neyman, A. Gorling.

Chem. A. European Journal, (2010), 16, 6530-6539.

24. *Hydrogen Diffusion into Palladium Nanoparticles: Pivotal Promotion by Carbon.*

K. M. Neyman and S. Schauerermann.

Ang. chem. Int. ed., (2010), 49, 4743-4746.

25. *Stabilization of Au at edges of bimetallic PdAu nanocrystallites.*

I. V. Yudanov, K. M. Neyman.

Phys. Chem. Chem. Phys., (2010) 12, 5094-5100.

III. ACTIVITAT CIENTÍFICA DELS MEMBRES DE L'IQTCUB

26. *Predicting Transition Pressures for obtaining Nanoporous Semiconductor Polymorphs: Oxides and Chalcogenides of Zn, Cd and Mg.*
W. Sangthong, J. Limtrakul, F. Illas, S.T. Bromley.
Phys. Chem. Chem. Phys., 12 (2010) 8513-8520.
27. *Prospective Role of Multicenter Bonding for Efficient and Selective Hydrogen Transport.*
D. Stradi, F. Illas, S. T. Bromley.
Phys. Rev. Lett., 105 (2010) 045901 (1-4).
28. *Electronic and magnetic structure of bulk cobalt: the a, b and e-phases from density functional theory calculations.*
V. A. de la Peña O'Shea, I. de P. R. Moreira, A. Roldán, F. Illas.
J. Chem. Phys., 133 (2010) 024701 (1-8).
29. *Monitoring the interaction of adsorbates on metal surfaces by surface site engineering: the case of ethoxy on Cu, Pd, Ag and Au regular and stepped surfaces.*
J. Radilla, M. Boronat, A. Corma, F. Illas.
Phys. Chem. Chem. Phys., 12 (2010) 6492 -6498.
30. *Thermodynamic and kinetic control on the formation of two novel MOFs based on Er(III) ion and the asymmetric dimethylsuccinate ligand.*
M. C. Bernini, V. A. de la Peña-O'Shea, M. Iglesias, N. Snejko, E. Gutierrez-Puebla, E. V. Brusau, G.E. Narda, F. Illas, M. Ángeles Monge.
Inorg. Chem., 49 (2010) 5063-5071.
31. *Structure and bonding of ethoxy species adsorbed on transition metal surfaces.*
J. Radilla, M. Boronat, A. Corma, F. Illas.
Theoret. Chem. Acc., 126 (2010) 223-229.
32. *Electronic structure of single layered undoped cuprates from hybrid density functional theory.*
P. Rivero, I. de P.R. Moreira, F. Illas.
Phys. Rev. B, 81 (2010) 205123 (1-12).
33. *On the Apparent Scarcity of Low Density Inorganic Materials.*
M.A. Zwijnenburg, F. Illas, S.T. Bromley.
Phys. Rev. Lett., 104 (2010) 175503 (1-4).
34. *Desulfurization Reactions on Surfaces of Metal Carbides:*

III. ACTIVITAT CIENTÍFICA DELS MEMBRES DE L'IQTCUB

Photoemission and Density-Functional Studies.

J. A. Rodríguez, P. Liu, Y. Takahashi, K. Nakamura, F. Viñes, F. Illas.
Topics in Catal., 52 (2010) 393-402.

35. *Theoretical confirmation of the enhanced facility to increase oxygen vacancy concentration in TiO₂ by iron doping.*
A. Roldán, M. Boronat, A. Corma, F. Illas.
J. Phys. Chem. C, 114 (2010) 6511-6517.
36. *Unexpected Persistence of Magic Cluster Stability in Ultrathin Semiconductor Nanorods.*
W. Sangthong, J. Limtrakul, F. Illas, S.T. Bromley.
Nanoscale, 2 (2010) 72-77.
37. *Theoretical simulation of temperature programmed desorption of molecular oxygen on isolated Au nanoparticles from density functional calculations and microkinetics models.*
A. Roldán, G. Novell-Leruth, J. M. Ricart, F. Illas.
J. Phys. Chem. C, 114 (2010) 5101-5106.
38. *Density functional study of CO and NO adsorption on Ni-doped MgO(100).*
R. Valero, J. R. B. Gomes, D. G. Truhlar,, F. Illas.
J. Chem. Phys., 132 (2010) 104701 (1-13).
39. *Role of Au-C interactions on the catalytic activity of Au nanoparticles supported on TiC(001) towards molecular oxygen dissociation.*
J. A. Rodríguez, L. Feria, T. Jirsak, Y. Takahashi, K. Nakamura, F. Illas.
J. Am. Chem. Soc., 132 (2010) 3177-3186.
40. *Density functional theory study of the interaction of Cu, Ag and Au atoms with the regular CeO₂ (111) surface.*
M. M. Branda, N. C. Hernández, J. F. Sanz, F. Illas.
J. Phys. Chem. C, 114 (2010) 1934-1941.
41. *Theoretical analysis of the adsorption of late transition metal atoms on the (001) surface of early transition metal carbides.*
T. Gómez, E. Florez, J. A. Rodríguez, F. Illas.
J. Phys. Chem. C, 114 (2010) 1622-1626.
42. *Adsorption of Xe atoms on the TiO₂(110) surface: a density functional study.*
J. R. B. Gomes, J. P. Prates Ramalho, F. Illas.
Surf. Sci., 604 (2010) 428-434.

III. ACTIVITAT CIENTÍFICA DELS MEMBRES DE L'IQTCUB

43. *Towards the design of ferromagnetic molecular complexes: magnetostructural correlations in ferromagnetic triply-bridged dinuclear Cu(II) compounds containing carboxylato and hydroxo bridges.*
R. Costa, I. de P.R. Moreira, S. Youngme, K. Siriwong, N. Wannarit, F. Illas.
Inorg. Chem., 49 (2010) 285-294.
44. *Born-Oppenheimer and Renner-Teller coupled-channel quantum dynamics of the $N(^2D) + HD$ reactions.*
P. Gamallo, P. Defazio.
J. Chem. Phys., 131 (2009) 044320-1/7
45. *Quantum dynamics of the $C(^1D) + HD$ and $C(^1D) + n-D_2$ reactions on the $a\ ^1A'$ and $b\ ^1A''$ surfaces.*
P. Defazio, P. Gamallo, M. González, S. Akpınar, B. Bussery-Honvault, P. Honvault, C. Petrongolo.
J. Chem. Phys., 132 (2010) 104306-1/8.
46. *A comparative QM/MM study of the reaction mechanism of the hepatitis C virus NS3/NS4A protease with the three main natural substrates.*
A. Rodríguez, C. Oliva, M. González.
Phys. Chem. Chem. Phys., 12 (2010) 8001-8015.
47. *Renner-Teller quantum dynamics of the $NH(a^1\Delta) + H$ reactions on the $NH_2\ A^2A_1$ and X^2B_1 coupled surfaces.*
P. Defazio, P. Gamallo, M. González, C. Petrongolo.
J. Phys. Chem. A 114 (2010) 9749-9754.
48. *Capture and dissociation in the complex-forming $CH + H_2 \rightarrow CH_2 + H$, $CH + H_2$ reactions.*
M. González, A. Saracibar, E. García.
Phys. Chem. Chem. Phys. (en premsa).
49. *Computational chemistry: a useful tool in the fight against hepatitis C.*
M. González, A. Rodríguez, R. Martínez.
European Infectious Disease (enviat).
50. *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.
Journal of Molecular Modelling, 16 (2010) 1061-1073.

III. ACTIVITAT CIENTÍFICA DELS MEMBRES DE L'IQTCUB

51. *Design of novel ligands of CDP-methylerythritol kinase by mimicking direct protein-protein and solvent-mediated interactions.*
V. Giménez-Oya, Ó. Villacañas, C. Obiol-Pardo, M. Antolín-Llovera, J. Rubio-Martinez, S. Imperial.
Journal of Molecular Recognition (en premsa).
52. *On the Dissociation of Ground State trans-HOOO Radical: A Theoretical Study.*
J. M. Anglada, S. Olivella, A. Solé.
J. Chem. Theory Comput., 6 (2010) 2743-2750.
53. *The Reaction Between HO and (H₂O)_n (n=1,3) Clusters. Reaction Mechanisms and Tunneling Effects.*
J. González, M. Caballero, A. Aguilar-Mogas, M. Torrent-Sucarrat, R. Crehuet, A. Solé, S. Olivella, J. M. Bofill, J. Anglada.
Theor. Chem. Acc. (en premsa).
54. *Symmetry Operation Measures of the Electron Density.*
D. Casanova, P. Alemany, S. Alvarez.
J. Comp. Chem., 31 (2010), 2389 - 2404.
55. *Tuning the Magnetic Moment of [Ru₂(DPhF)₃(O₂CMe)L]⁺ Complexes (DPhF = N,N'-Diphenylformamidinate): A Theoretical Explanation of the Axial Ligand Influence.*
M. C. Barral, D. Casanova, S. Herrero, R. Jiménez-Aparicio, M. R. Torres, F. A. Urbanos.
Chem. Eur. J., 16 (2010), 6203 - 6211.
56. *Ligand Association/Dissociation Paths and Ill-Defined Coordination Numbers.*
A. Ruiz-Martinez, D. Casanova, S. Alvarez.
Chem. Eur. J., 16 (2010), 6567 - 6581.
57. *Computational Study of Promising Organic Dyes for High-Performance Sensitized Solar Cells.*
J. Chem. Theory Comput., 6 (2010), 1219 - 1227.
58. *Theoretical Study of Substituted PBPB Dimers: Structural Analysis, Tetraradical Character, and Excited States.*
F. Bell, D. Casanova, M. Head-Gordon.
J. Am. Chem. Soc., 132 (2010), 11314 - 11322.
59. *Quantifying the Symmetry Content of the Electronic Structure of Molecules: Molecular Orbitals and the Wave Function.*
D. Casanova, P. Alemany.
Phys. Chem. Chem. Phys. (en premsa).

III. ACTIVITAT CIENTÍFICA DELS MEMBRES DE L'IQTCUB

60. *Concurrent Symmetries: The Interplay Between Local and Global Molecular Symmetries.*
J. Echeverría, A. Carreras, D. Casanova, P. Alemany, S. Alvarez.
Chem. Eur. J. (en premsa).
61. *An ab initio Theoretical Study Approach to the Gas Phase Decomposition of $C_3H_7^+$ Produced in Ground State Li^+ - iso-ClCH₃ Collisions.*
J. M. Lucas, J. de Andrés, M. Albertí, J. M. Bofill, A. Aguilar.
Int. J. Quantum Chem. (en premsa).
62. *Implementation of an Algorithm Based on the Runge-Kutta-Fehlberg Technique and the Potential Energy as a Reaction Coordinate to Locate Intrinsic Reaction Paths.*
A. Aguilar-Mogas, X. Giménez, J. M. Bofill.
J. Comp. Chem., 31 (2010) 2510 – 2525.
63. *A Comment to the Nudged Elastic Band Method.*
W. Quapp, J. M. Bofill.
J. Comp. Chem., 31 (2010) 2526 – 2531 (2010).
64. *2,2,4,6,7-Pentamethyl-2,3-dihydrobenzofuran-5-methyl (Pbfm) as Alternative to Trityl Group for the Side-chain Protection of Cysteine and Asparagine/Glutamine.*
O. García, J. M. Bofill, E. Nicolás, F. Albericio.
Eur. J. Org. Chem., 2010 (2010) 3631 – 3640.
65. *Differential behavior of amino-imino constitutional isomers in non-linear optical processes: experimental and theoretical studies of second order polarizability of benzothiazole-acridine amines.*
S. Latorre, I. de P. R. Moreira, B. Villacampa, Ll. Julià, D. Velasco, J. M. Bofill, F. López-Calahorra.
Chem. Phys. Chem., 11 (2010) 912 – 919.
66. *Bipyridyl Derivatives as Photomemory Devices. A Comparative Electronic-Structure Study.*
J. M. Ortiz-Sánchez, R. Gelabert, M. Moreno, J. M. Lluch, J. M. Anglada, J. M. Bofill.
Chem. Eur. J., 16 (2010) 6693 – 6703.
67. *Erratum to 'Understanding chemical reactions within a generalized Hamilton-Jacobi framework' [Chem. Phys. Lett. 478 (2009) 89].*
A. S. Sanz, X. Giménez, J. M. Bofill, S. Miret-Artés.
Chem. Phys. Lett., 488 (2010) 235 – 236.
68. *Experimental cross-sections energy dependences and an ab initio*

III. ACTIVITAT CIENTÍFICA DELS MEMBRES DE L'IQTCUB

electronic structure survey of the ground singlet potential energy for reactive Li^+ + n-C₁C₃H₇ collisions at low energies.

J. M. Lucas, J. de Andrés, M. Albertí, J. M. Bofill, D. Bassi, A. Aguilar.
Phys. Chem. Chem. Phys. (en premsa).

69. *A solution algorithm for the Classical Schrödinger Equation: how quantum can be classical mechanics?*
X. Giménez, J. M. Bofill.
J. Chem. Phys. (enviat).
70. *Accurate deep tunneling description by the Classical Schrödinger Equation.*
X. Giménez, J. M. Bofill.
CCP6 Booklet Series (enviat).
71. *Rare Gas-Benzene-Rare Gas Interactions: Structural Properties and Dynamic Behavior.*
M. Albertí.
J. Phys. Chem. A, 114 (2010), 2266-2274.
72. *A 3D-analysis of the Cl-benzene dimer solvation by Ar atoms.*
F. Huarte-Larrañaga, A. Aguilar, J.M. Lucas, M. Albertí.
Theor. Chem. Acc. (en premsa).
73. *A generalized formulation of ion- π electron interactions: role of the non electrostatic component and probe of the potential parameter transferability.*
M. Albertí, A. Aguilar, J.M. Lucas, F. Pirani.
J. Phys. Chem. A (enviat).
74. *A portable intermolecular potential for molecular dynamics studies of NMA-NMA and NMA-H₂O.*
M. Albertí, N. Faginas Lago, A. Laganà, F. Pirani.
Phys. Chem. Chem. Phys. (enviat).
75. *Substrate conformational changes in glycoside hydrolase catalysis. A first principles molecular dynamics study.*
X. Biarnés, A. Ardèvol, A. Planas, C. Rovira.
Biocat. Biotransf., 28 (2010), 33.
76. *Analysis of the reaction coordinate of α -L-fucosidases: a combined structural and quantum mechanical approach.*
A. Lammerts van Bueren, A. Ardèvol, J. Fayers-Kerr, B. Luo, Y. Zhang, M. Sollogoub, Y. Blériot, C. Rovira, G. J. Davies.
J. Am. Chem. Soc., 132 (2010), 1804.

III. ACTIVITAT CIENTÍFICA DELS MEMBRES DE L'IQTCUB

77. *On the role of water in peroxidase catalysis: A theoretical investigation of HRP compound I formation.*
P. Vidossich, G. Fiorin, M. Alfonso-Prieto, E. Derat, S. Shaik, C. Rovira.
J. Phys. Chem. B, 114 (2010), 5161.
78. *Molecular Mechanism of the Glycosylation Step Catalyzed by Golgi α -Mannosidase II. A QM/MM Metadynamics Investigation.*
L. Petersen, A. Ardèvol, C. Rovira, P. Reilly.
J. Am. Chem. Soc., 132 (2010), 8291.
79. *The dynamic role of distal side residues in heme hydroperoxidase catalysis. Interplay between X-ray crystallography and ab initio MD simulations.*
P. Vidossich, M. Alfonso-Prieto, X. Carpena, I. Fita, P. C. Loewen, C. Rovira.
Arch. Biochem. Biophys., 500 (2010), 37.
80. *Modulation of $A\beta_{42}$ fibrillogenesis by glycosaminoglycan structure.*
J. J. Valle-Delgado, M. Alfonso-Prieto, N. S. de Groot, S. Ventura, J. Samitier, C. Rovira, X. Fernández-Busquets.
FASEB J. (en premsa).
81. *Reductive Cleavage Mechanism of Co–C Bond in Cobalamin-Dependent Methionine Synthase.*
M. Alfonso-Prieto, X. Biarnés, M. Kumar, C. Rovira, P. M. Kozlowski.
J. Phys. Chem. B (en premsa).
82. *Substrate Recognition in the Escherichia coli Ammonia Channel AmtB: A QM/MM Investigation.*
T. P. Nygaard, M. Alfonso-Prieto, G. H. Peters, M. Ø. Jensen, C. Rovira.
J. Phys. Chem. B (en premsa).
83. *The conformational free energy landscape of β -D-mannopyranose. Evidence for a ${}^1S_5 - B_{2,5} - {}^0S_2$ catalytic itinerary in β -mannosidases.*
A. Ardèvol, X. Biarnés, A. Planas, C. Rovira.
J. Am. Chem. Soc. (enviat).
84. *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.
International Journal of Quantum Chemistry, 110 (2010), 422.
85. *A 3D-analysis of the Cl₂-benzene dimer solvation by Ar atoms.*
F. Huarte-Larrañaga, M. Albertí, J.M. Lucas, A. Aguilar.

III. ACTIVITAT CIENTÍFICA DELS MEMBRES DE L'IQTCUB

Theoretical Chemistry Accounts (en premsa).

86. *A Molecular Dynamics Simulation of Methane Adsorption in Single Walled Carbon Nanotube Bundles.*
S. Vela, F. Huarte-Larrañaga.
Carbon (en premsa).
87. *Flux correlation study of methane dissociation on a Nickel surface.*
M. Moix, F. Huarte-Larrañaga.
(en preparació).
88. *Competition effects in cation binding to Humic Acid. Conditional affinity spectra for fixed total metal concentration conditions .*
D. Calin, S. Mongin, C. Rey-Castro, J. Galceran, E. Companys, J.L. Garcés, J. Salvador, J. Puy, J. Cecília, P. Lodeiro, F. Mas.
Geochimica et Cosmochimica Acta, 74 (2010), 5216.
89. *Diffusion of alpha-Chymotrypsin in solution crowded media. A fluorescence recovery after photobleaching study.*
I. Pastor, E. Vilaseca, S. Madurga, J.L. Garcés, M. Cascante, F. Mas.
Journal of Physical Chemistry B, 114 (2010), 4028.
90. *Effect of crowding by dextrans on the hidrolisis of N-succinyl-L-phenyl-Ala-p-nitroanilide catalyzed by alpha-chymotrypsin upon addition of dextran with different concentration sizes.*
I. Pastor, E. Vilaseca, S. Madurga, J.L. Garcés, M. Cascante, F. Mas.
Journal of Physical Chemistry B (en premsa).
91. *Diffusion in macromolecular crowded media. Monte Carlo simulation of obstructed diffusion vs. FRAP experiments.*
E. Vilaseca, I. Pastor, A. Isvoran, S. Madurga, J.L. Garcés, F. Mas.
Theoretical Chemistry Accounts (en premsa).
92. *Relevant elements of a proline-rich tag involved in protein body biogenesis in nicotiana benthamiana.*
I. Llop-Tous, S. Madurga, E. Giralt, P. Marzabal, M. Torrent, M.D. Ludevid.
Journal of Biological Chemistry (en premsa).
93. *New insights into diffusion in 3D crowded media by Monte Carlo simulations: effect of size, mobility and spatial distribution of obstacles.*
E. Vilaseca, A. Isvoran, S. Madurga, I. Pastor, J.L. Garcés, F. Mas.
Physical Chemistry Chemical Physics (enviat).
94. *Cholesterol induces specific spatial and orientational order in*

III. ACTIVITAT CIENTÍFICA DELS MEMBRES DE L'IQTCUB

cholesterol/phospholipid membranes.

H. Martinez-Seara, T. Róg, M. Karttunen, I. Vattulainen, R. Reigada.
PLoS One, 5 (2010), e11162.

95. *Pattern formation in nonequilibrium lipid membranes: from membrane.*
R. Reigada, J. Gómez, J. Buceta, K. Lindenberg, F. Sagués.
Biophysical Reviews and Letters, 5 (2010), 1.
96. *Structural and kinetic molecular dynamics study of electroporation in cholesterol-containing bilayers.*
M. L. Fernández, G. Marshall, F. Sagués, R. Reigada.
J. Phys. Chem. B, 114 (2010), 6855.
97. *Effect of integral proteins in the phase stability of a lipid bilayer: Application to raft formation in cell membranes.*
J. Gómez, F. Sagués, R. Reigada.
J. Chem. Phys., 132 (2010), 135104.
98. *Direct mapping of nanoscale compositional connectivity on intact cell membranes.*
T.S. van Zanten, J. Gómez, C. Manzo, A. Cambi, J. Buceta, R. Reigada, M. F. García-Parajó.
PNAS (en premsa).
99. *Theoretical study of the electronic structure of [tetrathiafulvalene]₂²⁺ dimers and their long, intradimer multicenter bonding in solution and the solid state.*
I. Garcia-Yoldi, J. Miller, J. J. Novoa.
J. Phys. Chem. A, 113 (2009), 484.
100. *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), 1395.
101. *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 (invited Forum article).
102. *Long, multicenter bonding in π -[thiophene]₂²⁺ dimers.*

III. ACTIVITAT CIENTÍFICA DELS MEMBRES DE L'IQTCUB

I. Garcia Yoldi, J. S. Miller, J. J. Novoa.

Theor. Chem. Acc., 123 (2009), 137 (invited article).

103. *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.

104. *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.

105. *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.

106. *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.

107. *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.

108. *First-principles bottom-up study of 1D to 3D magnetic transformation in the copper pyrazine dinitrate $S = 1/2$ antiferromagnetic crystal.*

III. ACTIVITAT CIENTÍFICA DELS MEMBRES DE L'IQTCUB

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

Inorg. Chem., 49 (2010), 1750.

109. *Studying the origin of the antiferromagnetic to spin-canting transition in the β -p-NCC₆F₄CNSSNC molecular magnet.*

M. Deumal, J. M. Rawson, A. E. Goeta, J. A. K. Howard, R. C. B. Copley, M. A. Robb, J. J. Novoa.

Chem. Eur. J., 16 (2010), 2741 (front cover).

110. *A theoretical investigation on the oxidation states of palladium complexes and their role in carbonylation reaction.*

G. P. Miscione, A. Bottoni, M. A. Carvajal, J. J. Novoa.

Mol. Phys., 108 (2010), 1619.

111. *Design and preparation of co-crystals utilizing the R₄²(8) hydrogen-bonding motif.*

J. Bernstein, R. Boese, S. A. Cirkel, J. J. Novoa.

Chem. Eur. J., 16 (2010), 9047.

112. *The magnetism of (5MAP)₂CuBr₄ [5MAP = 5-methyl-2-aminopyridinium]: a quasi-2D or a 3D magnetic system?*

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

Inorg. Chem., 49 (2010), 8017.

113. *Theoretical evaluation of the nature and strength of the F...F intermolecular interactions present in fluorinated hydrocarbons.*

R. Malave-Osuna, V. Fernandez, J. T. López-Navarrete, E. D'Oria, J. J. Novoa.

Theor. Chem. Acc., (en premsa).

114. *The origin of the magnetic bistability in molecule based magnets. A first-principles bottom-up study of the TTTA crystal.*

C. S. Clarke, J. Jornet-Somoza, F. Mota, J. J. Novoa, M. Deumal.

J. Am. Chem. Soc., (en premsa).

III. ACTIVITAT CIENTÍFICA DELS MEMBRES DE L'IQTCUB

III. ACTIVITAT CIENTÍFICA DELS MEMBRES DE L'IQTCUB

CAPÍTOLS DE LLIBRES I *PROCEEDINGS* (2010)

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

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

Proceedings of the Sixth European Symposium on Aerothermodynamics for Space Vehicles, Versailles (France, 2008); ESA SP-659, S28 (2009) 1-7.

2. *Design of peptidomimetics.*

J. J. Perez, F. J. Corcho, J. Rubio-Martinez.

Burger's Medicinal Chemistry and Drug Discovery, 7th Edition, Volume 1, John Wiley & Sons Inc., Singapore (Singapore, 2010) 205-247.

III. ACTIVITAT CIENTÍFICA DELS MEMBRES DE L'IQTCUB

III.5. Altres activitats

Tesis doctorals 2010

1. *Nuevos Conceptos y Relaciones de Simetría y Enlace en Moléculas Complejas y Sólidos Inorgánicos.*
Jorge Echeverría López
Facultat de Química, Universitat de Barcelona
Juliol 2010.
2. *Modelización de la estructura electrónica y propiedades magnéticas de compuestos de cobre: de los complejos dinucleares a los superconductores de alta temperatura crítica.*
Pablo Rivero Moreno
Facultat de Química, Universitat de Barcelona
Setembre 2010.
3. *Theoretical study of phospholipid membranes: the complex role of cholesterol and lipid unsaturation.*
Hector Martinez-Seara Monné
Facultat de Química, Universitat de Barcelona.
Maig 2010.

III. ACTIVITAT CIENTÍFICA DELS MEMBRES DE L'IQTCUB

Màsters 2010

1. *Introducció a l'estudi de sistemes moleculars que poden actuar com a engranatge mitjançant dinàmica molecular.*

Abel Carreras Conill

Facultat de Química, Universitat de Barcelona.

Setembre 2009

2. *Estudi Experimental i Teòric de la Formació d'Adductes de benzè amb Ions Alcalins.*

Estefanía López Marne

Facultat de Química, Universitat de Barcelona.

Setembre 2010

PARTICIPACIÓ A CONGRESSOS 2010

Metallophilic Interactions, A Combined Experimental and Theoretical Approach

Mittelwihr (França), 2010.

Orbital Picture of $d^n \cdots d^n$ Closed Shell Interactions.
S. Alvarez.

Departament de Cristal·lografia (Universitat de Barcelona)

Barcelona (Espanya), 2010.

Forma i Simetria: Conceptes, Aplicacions i Paradoxes.
S. Alvarez.

Solid State Chemistry of Inorganic Materials Symposium (XIX International Materials Research Congress).

Cancun (Mèxic), 2010.

Shape and Symmetry: Concepts, Applications and Paradoxes.
S. Alvarez.

8th European Conference on Computational Chemistry

Lund (Suècia), 2010.

Theoretical Study of Homonuclear Dihydrogen Bonds in Alkanes and Polyhedranes.
J. Echeverría, G Aullón, D. Danovich, S. Shaik, S. Alvarez.

International Conference Molecular Magnetism

Beijing (Xina), 2010.

Quantum Transport in Magnetic Molecules: a Density Functional Theory Study.
E. Ruiz.

Estudio teórico del cambio de dimensionalidad en magnetismo molecular.
J. Jornet, M. Deumal, S. Vela, J. J. Novoa.

III. ACTIVITAT CIENTÍFICA DELS MEMBRES DE L'IQTCUB

Girona Workshop on Theoretical Chemistry

Girona (Espanya), 2010.

New Reflections on Chemical Symmetries.

S. Alvarez.

The Classical Schrödinger Equation as Field Theory in Complex Space: The Revision of two Models and how Quantum can be Classical Mechanics?

J. M. Bofill

6th International Meeting on Photodynamics

La Habana (Cuba), 2010

Catalycity from first principles: atomic and molecular oxygen processes over a silica surface.

R. Sayós , P. Gamallo, V. Morón, C. Crespos i P. Larregaray.

Experimental Guided-Ion-Beam and ab initio study of the dehydrohalogenation reactions of the n-C₃H₇Cl induced by collision with lithium ions in their ground electronic state at low collision energies.

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

Static and Dynamic behaviour of Rare gas-benzene-Rare gas clusters.

M. Albertí, A. Aguilar, F. Huarte Larrañaga, J. M. Lucas.

MCTDH quantum dynamics in egee: advances made and improvements needed.

F. Huarte-Larrañaga, M. Moix.

10th Iberian joint meeting on atomic and molecular physics

Groningen (Holanda), 2010

Ab initio and kinetics studies of some elementary processes involving oxygen on graphite (0001) surface.

R. Sayós, P. Gamallo, V. Morón, C. Crespos i P. Larregaray.

Passion for knowledge: passion for interfaces

San Sebastián (España), 2010

III. ACTIVITAT CIENTÍFICA DELS MEMBRES DE L'IQTCUB

Catalycity from first principles: atomic and molecular oxygen processes over ZrB_2 (0001) surface

P. Gamallo i R. Sayós.

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

Berlin (Alemanya), 2010

Density functional studies of bimetallic nanosystems.

K. M. Neyman

7th Congress on Electronic Structure: Principles and Applications (ESPA)

Oviedo (Espanya), 2010

Theoretical study of photo-switching materials based on Fe(II) spin-crossover systems.

C. Sousa, C. de Graaf, A. Rudavsky, R. Broer.

The luminescence properties of AlQ₃. A theoretical study.

J. J. Serrano, J. J. Novoa.

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

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

Spectroscopy & Theory meeting

Països Baixos, 2010

Theoretical study of light-induced excited-spin state trapping in spin-crossover systems.

A. Rudavsky, C. Sousa, R. Broer.

IVth International Conference on Molecular Materials, MOLMAT

Montpellier (França), 2010

Theoretical study of switchable photo-magnetic materials based on Fe²⁺ spin-crossover systems.

A. Rudavsky, C. Sousa, R. Broer.

Study of the light-induced spin crossover in FeII-tri(bipyridine) and FeII(tetrazole)₆

III. ACTIVITAT CIENTÍFICA DELS MEMBRES DE L'IQTCUB

C. de Graaf, C. Sousa.

13th International Conference on Theoretical Aspects of Catalysis
Matsushima (Japó), 2010

Catalytic properties of Au nanoparticles supported on TiC(001).
F. Illas.

240th Meeting of the American Chemical Society
Boston (EUA), 2010

Tuning the catalytic properties of Au nanoparticles.
F. Illas.

II Jornadas de Jóvenes Investigadores en Física Atómica y Molecular

Barcelona (Espanya), 2010

DFT+U study of the interaction of Platinum atoms with the (111) surface of Cerium Dioxide.
A. Bruix, K. Neyman, F. Illas.

Implementation of an algorithm to locate reaction paths by using the potential energy as reaction coordinate.
A. Aguilar-Mogas, X. Giménez, J. M. Bofill.

Anual Meeting München 2010 “Inorganic Oxide Surfaces and Interfaces”

Munich (Alemanya), 2010

DFT+U study of the interaction of Platinum atoms with the (111) surface of Cerium Dioxide.
A. Bruix, K. Neyman, F. Illas.

VI Trobada de Joves Investigadors dels Països Catalans

València (Espanya), 2010

Estudi DFT+U de la interacció entre àtoms de platí i la superfície (111) del diòxid de ceri.
A. Bruix, K. Neyman, F. Illas.

Aplicacions del Hamiltonià Quàntic del Camí de Reacció.

III. ACTIVITAT CIENTÍFICA DELS MEMBRES DE L'IQTCUB

M. Caballero, J. M. Bofill, X. Giménez, A. S. Sanz

Masterquímica VI. UB - Facultat de Química

Barcelona (Espanya), 2010

Adsorció, estat d'oxidació i difusió d'àtoms de Pt sobre CeO₂(111)

A. Bruix, K. Neyman, F. Illas.

IQTCUB meeting. Universitat de Barcelona.

Barcelona (Espanya), 2010

DFT study of charge transfer and diffusion of Pt atoms over the (111) CeO₂ surface

A. Bruix, K. Neyman, F. Illas.

The NS3-NS4A hepatitis C virus protease: QM/MM investigation of the main reactions

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

Quasiclassical and quantum dynamics of the $O + H_2^+ \rightarrow OH^+ + H$, $OH + H^+$ proton transfer and hydrogen atom transfer reactions

M. Paniagua, A. Aguado, R. Martínez, J. Mayneris-Perxachs, M. González.

New methodologies for the study of molecular systems.

A. Aguilar-Mogas, M. Caballero, J. M. Bofill, X. Giménez.

Monte Carlo simulation of proton binding to ionizable surfaces.

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

Behaviour of alpha-chymotrypsin in macromolecular crowding situation.

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

XXVI Reunió de la Xarxa de Referència en Química Teòrica i Computacional

Bellaterra (Espanya), 2010

Sistemas Dinucleares con Anillos Fe₂S₂ y FeMoS₂.

III. ACTIVITAT CIENTÍFICA DELS MEMBRES DE L'IQTCUB

B. Peigne, G. Aullón.

Cálculo QM/MM del perfil de energía libre de la reacción de la proteasa NS3/NS4A del virus de la hepatitis-C con su sustrato principal.

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

Modelització de la dinàmica d'engranatges moleculars.

A. Carreras, J.M. Bofill, M. Llunell, P. Alemany.

Implementació d'un algoritme per localitzar camins de reacció emprant l'energia potencial com a coordenada de reacció.

A. Aguilar-Mogas, X. Giménez, J. M. Bofill.

Aplicació del Hamiltonià Quàntic de Camí de Reacció al conjunt de reaccions $(H_2O)_n + OH$ per a $n=1,2$.

M. Caballero, X. Giménez, J. M. Bofill.

Ab-initio and direct dynamics study of the $i-C_3H_7Cl + Na^+$ Reaction.

J. Aguilar, J.M. Lucas, F. Huarte-Larrañaga, M. Albertí, A. Aguilar.

Substrate preactivation mechanisms in glycoside hydrolase catalysis. An ab initio molecular dynamics investigation.

C. Rovira.

Estudi Monte Carlo de la difusió 3D amb crowding molecular.

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

21st International Symposium on Gas Kinetics

Leuven (Bèlgica), 2010

Theoretical study of the kinetics of the $CH + H_2 \rightarrow CH_2 + H$ complex-forming reaction.

A. Saracibar, E. García, J. D. Sierra, M. González.

XVIII European Conference on Dynamics of Molecular Systems (MOLEC 2010)

Curia/Anadia (Portugal), 2010

Nonadiabatic quantum dynamics of atom+diatom reactions.

III. ACTIVITAT CIENTÍFICA DELS MEMBRES DE L'IQTCUB

P. De Fazio, P. Gamallo, S. Akpınar, M. González, C. Petrongolo.

QCT study of the CH + D₂ complex-forming reaction kinetics.

E. García, A. Saracibar, J. D. Sierra, M. González.

Influence of D₂(v) excitation on the OH + D₂ → HOD + D reaction dynamics: QCT study at E_T=0.28 eV.

J. D. Sierra, J. Mayneris-Perxachs, M. González.

Quasiclassical and quantum dynamics of the O + H₂⁺ → OH⁺ + H, OH + H⁺ reactions.

M. Paniagua, A. Aguado, R. Martínez, J. Mayneris-Perxachs, M. González.

Gas-phase dynamical study of some dehydrohalogenations reactions induced by alkali ions.

J.M. Lucas, J. Aguilar, J. De Andrés, J. Aguilar, M. Albertí, J.M. Bofill, D. Bassi and A. Aguilar.

3rd International Symposium on Structure-Property Relationships in Solid State Materials

Stuttgart (Alemanya), 2010

The Phase Transition of CuFeS₂ from trigonal to a tetragonal structure.

S. Conejeros, P. Alemany.

Molecular Quantum Mechanics 2010

Berkeley (EUA), 2010

Computational Study of Promising Organic Dyes for High-Performance Sensitized Solar Cells.

D. Casanova, F. P. Rotzinger, M. Grätzel.

Molecular Quantum Dynamics Workshop on Quantum Trajectories

Wales (Anglaterra), 2010

The Classical Schrödinger Equation as Field Theory in Complex Space.

X. Giménez.

III. ACTIVITAT CIENTÍFICA DELS MEMBRES DE L'IQTCUB

10th European Conference on Atoms, Molecules and Photons (ecamp10)

Salamanca (Espanya), 2010

RF-GIB Experimental study of the Na++ i-C3H7Cl Reaction.

J.M. Lucas Alcorta, J. Aguilar, J. De Andrés, M. Albertí, A. Aguilar, D. Bassi.

Ab-initio and Direct Dynamics Study of the i-C3H7Cl + Na+ Reaction.

J. Aguilar, J.M. Lucas, F. Huarte-Larrañaga, M. Albertí, A. Aguilar.

Theoretical Approach to the Gas Phase Decomposition of the [LiC₃H₇]⁺ and C₃H₇⁺ Ions.

A. Aguilar, J.M. Lucas, J. De Andrés, J. Aguilar, M. Albertí, J.M. Bofill, F. Huarte-Larrañaga, E. Martinez-Núñez.

Atom-Bond Potentials: The C₆H₆-M⁺ (M=Li, Na, K, Rb, Cs) and C₆H₆-X⁻ (X=F, Cl, Br, I) Systems.

M. Albertí Wirsing, A. Aguilar, F. Pirani.

Gas storage in carbon nanotubes: molecular dynamics simulations.

F. Huarte-Larrañaga, M. Albertí.

International Soft Matter Conference 2010

Granada (Espanya), 2010

Study of in vitro diffusion and reaction of a model enzyme in macromolecular crowding situation.

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

A thermodynamic framework for the description of the binding of simple ions to polyelectrolytes and charfed surfaces in multicomponent mixtures.

C. Rey-Castro, C. David, P. Lodeiro, J.L. Garcés, J. Galceran, J. Salvador, S. Madurga, F. Mas, J Puy.

IV Spanish Portuguese Biophysical Congress

Zaragoza (Espanya), 2010

III. ACTIVITAT CIENTÍFICA DELS MEMBRES DE L'IQTCUB

Effect of crowding by Dextrans on the hydrolysis of N-succinyl-L-phenyl-Ala-p-nitroanilide catalyzed by alpha-chymotrypsin
I. Pastor, E. Vilaseca, S. Madurga, J.L. Garcés, M. Cascante, F. Mas.

Size-Dependent Effects in Materials for Environmental Protection and Energy Application (SIZEMAT2)

Nessebar (Bulgaria), 2010

Overcharging process of spherical nanostructures.
M. Nedyalkova, S. Pisov, S. Madurga, E. Vilaseca.

11th International Conference on Systems Biology

Edinburg (Regne Unit), 2010

Effect of crowding by Dextrans on the hydrolysis of N-succinyl-L-phenyl-Ala-p-nitroanilide catalyzed by alpha-chymotrypsin.
I. Pastor, E. Vilaseca, S. Madurga, J.L. Garcés, M. Cascante, F. Mas.

IRB Barcelona BioMed Conference on “Intrinsically disordered proteins in biomedicine”

Barcelona (Espanya), 2010

Effect of crowding by Dextrans on the hydrolysis of N-succinyl-L-phenyl-Ala-p-nitroanilide catalyzed by alpha-chymotrypsin.
I. Pastor, E. Vilaseca, S. Madurga, J.L. Garcés, M. Cascante, F. Mas.

I Congreso Iberoamericano de Estudiantes y II Jornadas de Ingeniería Química

Loja (Equador), 2010

Diseño de materiales con aplicaciones tecnológicas.
J. J. Novoa.

CHITEL-2010

III. ACTIVITAT CIENTÍFICA DELS MEMBRES DE L'IQTCUB

Anglet (França), 2010

Estudio teórico del magnetismo molecular.
J. J. Novoa.

European Conference in Molecular Magnetism ECMM-2009
Wroclaw (Polonia), 2009

Phase transitions in low dimensional magnetic materials.
J. Jornet, M. Deumal, J. J. Novoa.

III. ACTIVITAT CIENTÍFICA DELS MEMBRES DE L'IQTCUB

Estades en centres de prestigi 2010

- P. Gamallo **CNR-IMIP, Università di Bari (Itàlia)**
Superfícies d'energia potencial i dinàmica molecular per a sistemes aeroespacials.
2010 (1 setmana)
- Universidad de Burdeos (França)**
Desenvolupament del mètode FPLEPS per a la construcció de superfícies d'energia potencial analítiques en sistemes gas-superfície sòlida i construcció de models cinètics per a l'estudi de la interacció de fluxos d'aire sobre sílice.
2010 (12 setmanes)
- Centro de Fisica de Materiales (UPV/EHU) (Espanya)**
Estudi de processos elementals gas-superfície des de primers principis.
2009 (2 setmanes)
- M. Albertí **Università di Perugia (Itàlia)**
Modelització de l'aigua: Aplicacions a l'estudi de dissolucions i clatrats.
2010 (10 setmanes)
- J. J. Novoa **University of Utah (EUA)**
Estudi d'enllaços a llarga distància.
2009 (1 mes)
- University of Utah (EUA)**
Estudi d'enllaços a llarga distància.
2010 (1 mes)
- J. Jornet **Imperial College (Regne Unit)**
Programació d'un codi per a l'anàlisi de propietats magnètiques.
2009 (2 mesos)
- Imperial College (Regne Unit)**
Anàlisi microscòpic de propietats magnètiques.
2009 (3 mesos)

III. ACTIVITAT CIENTÍFICA DELS MEMBRES DE L'IQTCUB

PARTICIPACIÓ EN PROJECTES D'INVESTIGACIÓ

Estructura electrònica y propiedades de moléculas y sólidos inorgánicos.

Eliseo Ruiz Sabin, Universitat de Barcelona

CTQ2008-06670-C02-01/BQU, 2009-2011

Direcció General de Investigaci6n

Grup d'Estructura Electrònica.

Santiago Alvarez Reverte, Universitat de Barcelona

2009SGR1459, 2010-2012

Agència de Gestió d'Ajuts Universitaris i de Recerca

Synthesis of New Hemilabile Ligands and Their Complexation to Transition Metals: Application as Chemosensors.

Gabriel Aull6n L6pez, Universitat de Barcelona

HP2007-0040, 2008-2010

Acció integrada entre Espanya i Portugal

Modelos y simulaciones cinéticas y dinámicas de reacciones en entornos de gases disociados sobre cerámicas de interés en la industria aeroespacial.

Ram6n Say6s Ortega, Universitat de Barcelona

CTQ2009-07647, 2010-2013

Direcció General de Investigaci6n y Gestió del Plan nacional de I+D+I (MICINN)

Planetary entry integrated models (Phys4Entry).

Ram6n Say6s Ortega, Universitat de Barcelona i Mario Capitelli, Univ.

Bari (Italia)

242311, 2010-2014

7è Programa Marc, collaborative project, space exploration (Unió Europea)

Laboratorio de Ciencia de Materiales Computacional.

Francesc Illas Riera, Universitat de Barcelona

2009SGR1041, 2009-2013

Agència de Gestió d'Ajuts Universitaris i de Recerca. Generalitat de Catalunya

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

MICINN

III. ACTIVITAT CIENTÍFICA DELS MEMBRES DE L'IQTCUB

Controlling Selectivity via Nanostructuring of Multifunctional Model Catalysts.

Francesc Illas Riera, Universitat de Barcelona

CTQ2007-30547-E/BQU, 2008-2011

MICINN

Acció integrada entre Espanya i Portugal.

Francesc Illas Riera, Universitat de Barcelona

HP2007-0042, 2008-2010

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

Dirección General de Investigación, Ministerio de Ciencia e Innovación

Dinàmica de reaccions químiques.

Antonio Aguilar Navarro, Universitat de Barcelona

2005SGR00017, 2009-2013

Agència de Gestió d'Ajuts Universitaris i de Recerca, Generalitat de Catalunya

Ajuts de suport als grups de recerca de Catalunya.

Marta Cascante Serratosa, Universitat de Barcelona

2009SGR1308, 2009-2013

Agència de Gestió d'Ajuts Universitaris i de Recerca, Generalitat de Catalunya

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

Secretaría de Estado de Investigación, Ministerio de Ciencia e Innovación

Química Teòrica i Computacional.

Santiago Olivella Nel.lo, CSIC

2009SGR1472, 2009-2013

Agència de Gestió d'Ajuts Universitaris i de Recerca, Generalitat de Catalunya

Estructura electrónica y propiedades de moléculas y sólidos inorgánicos.

Pere Alemany i Cahner, Universitat de Barcelona

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

Plan Nacional de I+D+I (2008-2011)

III. ACTIVITAT CIENTÍFICA DELS MEMBRES DE L'IQTCUB

Desarrollo de nuevos paradigmas teóricos de 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 Educación y Ciencia

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

Dinámica de procesos químicos mediante haces moleculares y métodos teóricos.

Antonio Aguilar Navarro, Universitat de Barcelona

CTQ2010-16709/BQU, 2010-2013

Ministerio de Ciencia e Innovación

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)

Grup de recerca consolidat de cristallografia de proteïnes.

Miquel Coll Capella, Consell Superior d'Investigacions Científiques

2009SGR-1309, 2010-2014

Agència de Gestió d'Ajuts Universitaris i de Recerca, Generalitat de Catalunya

Dinamica cuantica de reacciones en sistemas poliatomicos y modelizacion de fisorcion de gases en nanoestructuras.

Fermin Huarte Larrañaga, Universitat de Barcelona

CTQ2009-12215/BQU, 2010-2012

Ministerio de Ciencia e Innovacion

GRIDCHEM.

H.P. Lüthi (EPFL, Lausanne), Parc Científic de Barcelona.

COST-D37, 2007-2010

European Science Foundation (COST)

Wave packets in cartesian coordinates: study of reactions.

J. Suárez (sponsor: F. Huarte), Universitat de Barcelona

III. ACTIVITAT CIENTÍFICA DELS MEMBRES DE L'IQTCUB

2010

HPC-Europa

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 Educación y Ciencia

Fisicoquímica de sistemas macromoleculares d'interès ambiental.

Jaume Puy Llorens, Universitat de Lleida

2009SGR465, 2009-2013

Agència de Gestió d'Ajuts Universitaris i de Recerca, Generalitat de Catalunya

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

Francesc Sagués, Universitat de Barcelona

FIS2006-03525, 2007-2010

Ministerio de Ciencia y Tecnología

Self-Organized Complexity and Self-Assembling Materials.

Francesc Sagués, Universitat de Barcelona

2009SGR-1055, 2009-2013

Secretaria General de la Recerca (Generalitat de Catalunya)

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)

Grup d'Estructura de Materials Moleculars (GEM2).

Juan J. Novoa, Universitat de Barcelona

2009SGR1203, 2009-2014

Agència de Gestió d'Ajuts Universitaris i de Recerca, Generalitat de Catalunya