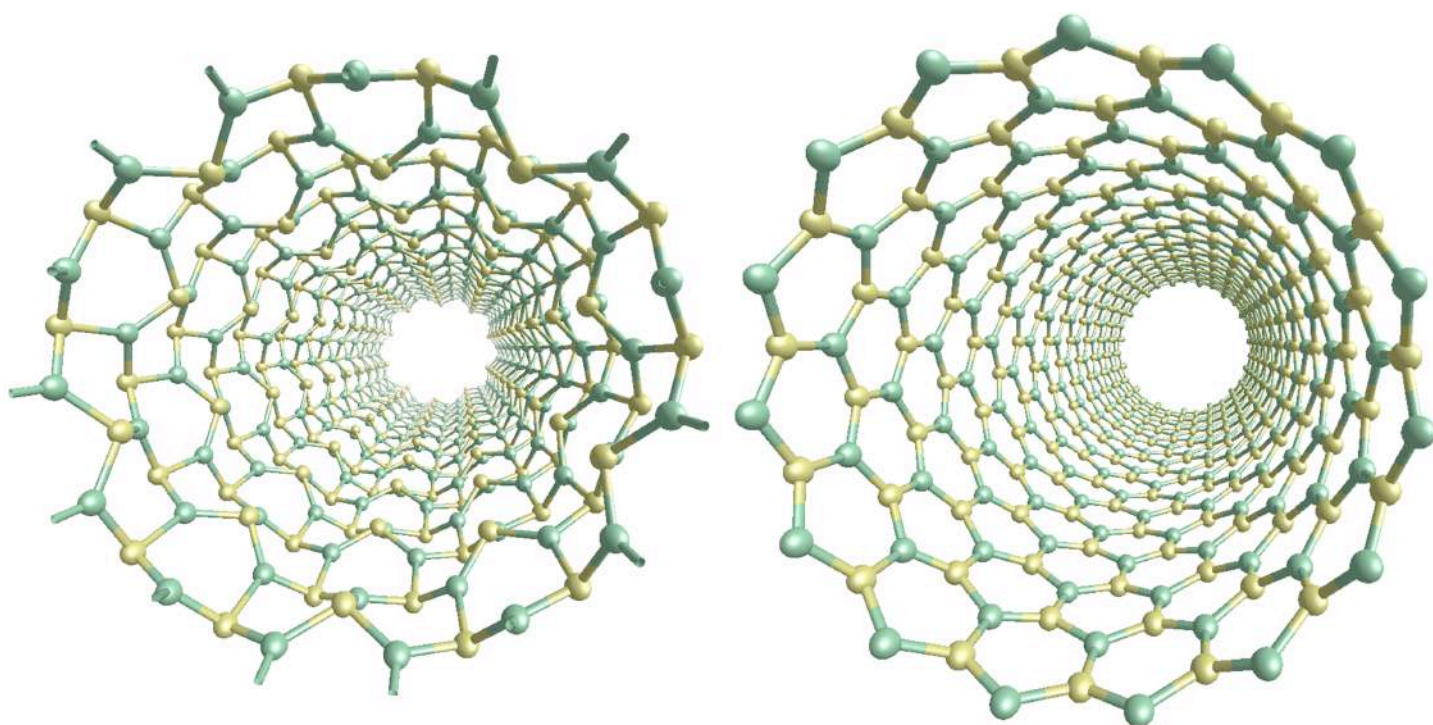


Institut de Química Teòrica i Computacional de la Universitat de Barcelona (IQTCUB)



Memòria d'activitats 2011



L'Institut de Química Teòrica i Computacional de la Universitat de Barcelona (IQTCUB), creat per decisió del Consell de Govern en sessió ordinària el dia 21 de novembre de 2007, agrupa professors i investigadors de diferents departaments de la Facultat de Química de la Universitat de Barcelona que tenen com a denominador comú en la seva recerca la utilització de mètodes de la química quàntica, de la física d'estat sòlid o d'altres mètodes de la química computacional i rep el suport

institucional de la Universitat de Barcelona a través del Vicerectorat de Recerca, suport que des d'aquí volem agrair especialment en aquests moments difícils i de retallades. La recerca de l'IQTCUB, si bé es mou dins l'àmbit de la química, es distingeix doncs del que hom espera d'un químic, ja que els instruments emprats pels investigadors de l'IQTCUB no es troben en un laboratori típic sinó potser en un laboratori de càlcul que sovint només és el punt d'entrada a un centre de supercomputació que disposi de centenars sinó milers de processadors. L'objectiu fonamental de la química teòrica i computacional és arribar a entendre els processos químics la qual cosa permet fer prediccions comprovables experimentalment, interpretar resultats experimentals i, així, construir conceptes que permeten dissenyar nous materials amb propietats fetes a mida, nous medicaments, noves reaccions per obtenir productes necessaris amb millors eficiència i selectivitat, millorar processos fent-los més eficients i més respectuosos amb el medi ambient i aportar solucions als problemes de la societat millorant i proposant noves fonts d'energia sostenible. És clar que aquest és també un objectiu compartit per altres disciplines científiques i és per aquesta interdisciplinarietat precisament que un coneixement a nivell teòric és fonamental.

Durant els darrers anys l'existència de l'IQTCUB, seguint una iniciativa que començà el 1997 amb la creació del Centre especial de Recerca en Química Teòrica, ha estat possible instal·lar i mantenir una infraestructura de càlcul que permet que els investigadors i professors de l'IQTCUB duguin a terme una recerca competitiva i de qualitat. La memòria de recerca que es presenta a continuació mostra la vitalitat de l'IQTCUB i la gran productivitat científica dels seus membres en línies de recerca tan diverses com el disseny de fàrmacs, la catàlisi heterogènia, l'estudi de nanoestructures o la química atmosfèrica. L'impacte de l'activitat científica de l'IQTCUB serà sens dubte visible en els propers anys i esperem mostrar que el projecte mereix la confiança que tenim de la institució.

Francesc Illas
Director de l'IQTCUB

CONTINGUTS DE LA MEMÒRIA

I. DESCRIPCIÓ DE L'IQTCUB	3
I.1 Equip directiu	3
I.2 Grups de l'IQTCUB	4
I.3 Membres de l'IQTCUB	6
I.4 Equip tècnic	9
I.5 Equipaments	9
II. ACTIVITATS DE L'IQTCUB.....	16
II.1 Activitats de tipus general	16
II.2 Seminaris i conferències de l'IQTCUB	18
II.3 Investigadors convidats per l'IQTCUB	19
III. ACTIVITAT CIENTÍFICA DELS MEMBRES DE L'IQTCUB.....	21
III.1 Descripció de les línies de recerca	21
III.2 Activitats en cada línia de recerca	25
III.3 Resultats més rellevants	61
III.4 Llista de publicacions	75
Articles publicats	
Capítols de llibres i proceedings	
III.5 Altres activitats	86
Tesis doctorals	
Màsters oficials	
Estades en centres 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 17 grups de recerca que en formen part i afavorir, així mateix, les activitats interdisciplinàries que permetin abordar nous reptes en aquesta disciplina.

I.1 EQUIP DIRECTIU

Prof. Francesc Illas Riera	<i>Director</i>
Prof. Pere Alemany Cahner	<i>Secretari</i>
Prof. Ramón Sayós Ortega	<i>Tresorer</i>
Prof. Fermín Huarte Larrañaga	<i>Vocal</i>

I.2 GRUPS DE L'IQTCUB

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

Estructura Electrònica

Eliseo Ruiz Sabin / Santiago Alvarez Reverter (Dept. Química Inorgànica)

Estructura dels Materials Moleculars

Juan José Novoa Vide (Dept. Química Física)

Dinàmica de Reaccions en Superfície

Ramon Sayós Ortega (Dept. Química Física)

Biofísicoquímica de Macromolècules i Col·loides

Francesc Mas Pujadas (Dept. Química Física)

Química de Superfícies

Francesc Illas Riera (Dept. Química Física)

Nanoclústers i Materials Nanoestructurats

Stefan T. Bromley (Dept. Química Física)

Reactivitat de Nanoestructures

Konstantin M. Neyman (Dept. Química Física)

Materials Fortament Correlacionats

Carme Sousa / Ibério de P. R. Moreira (Dept. Química Física)

Dinàmica de Reaccions Atmosfèriques i Sistemes Complexos

Miguel González Pérez (Dept. Química Física)

Modelització de Sistemes Biològics i Disseny de Fàrmacs

Jaime Rubio Martínez (Dept. Química Física)

Química Teòrica i Computacional

Albert Solé Sabaté (Dept. Química Física)

Estructura Electrònica i Simetria

Pere Alemany i Cahner (Dept. Química Física)

Estructura i Dinàmica de Sistemes Moleculars Complexes

Josep Maria Bofill Villà (Dept. Química Orgànica)

Dinàmica de Reaccions Químiques

Antonio Aguilar Navarro (Dept. Química Física)

Simulació Quàntica de Processos Biològics

Carme Rovira Virgili (Parc Científic de Barcelona)

Dinàmica de Reaccions en Sistemes Poliatòmics

Fermín Huarte Larrañaga (Dept. Química Física)

Estructura i Xarxes Cel·lulars

Ramon Reigada Sanz (Dept. Química Física)

I.3 MEMBRES DE L'IQTCUB

L'IQTCUB està constituït per un total de 70 docents/investigadors. A continuació es mostra la llista completa de membres segons la seva categoria acadèmica.

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

Professors Agregats i Lectors

Aullón López	Gabriel	Química Inorgànica
Deumal Solé	Mercè	Química Física
Madurga Díez	Sergio	Química Física
Reigada Sanz	Ramón	Química Física

Professors Associats

Gamallo Belmonte	Pablo	Química Física
Tercero Mohedano	Javier	Química Inorgànica
Lamiel Garcia	J. Oriol	Química Física

Professors d'Investigació ICREA

Bromley	Stefan	Química Física
Neyman	Konstantin M.	Química Física
Rovira Virgili	M. Carme	Parc Científic

Investigadors Postdoctorals*Juan de la Cierva*

Pastor del Campo	Isabel	Química Física
Viñes Solana	Francesc	Química Física

Ramón y Cajal

Casanova Casas	David	IQTCUB
Ribas Ariño	Jordi	Química Física
Serrano Moral	Mariangels	Química Física

Altres

Aleksandrov	Hristiyan A.	Química Física
Flores	Elizabeth	Química Física
Tosoni	Sergio	Química Física

Investigadors Predoctorals*Beca FPI*

Aguilar Fargas	Javier	Química Física
Bruix Fusté	Albert	Química Física
Caballero Puig	Marc	Química Orgànica
Carreras Conill	Abel	Química Física
Jurado Sáez	Manuel	Química Física
Morón Tejero	Victor	Química Física
Rivero Moreno	Pablo	Química Física
Vela Llausi	Sergi	Química Física

Beca FPU

Ardevol Grau	Albert	Parc Científic
Capdevila Cortada	Marçal	Química Física
Gómez Coca	Silvia	Química Inorgànica
Kozlov	Sergey	Química Física
Rojas Cervellera	Victor	Parc Científic

Beca UB

Fumanal Quintana	Maria	Química Física
Gomez Llobregat	Jordi	Química Física
Vilà Casanovas	Arnau	Química Física

Altres

Aracena Ponce	Daniel	Química Inorgànica
Asara	Gia Giacomo	Química Física
Climent Biescas	Clàudia	Química Física
Conejeros Espíndola	Sergio	Química Física
Cremades Martí	Eduard	Química Inorgànica
Delgado Soler	Laura	Química Física
Demiroglu	Ilker	Química Física
Iglesias Fernández	Javier	Parc Científic
López Marne	Estefanía	Química Física
Moix Teixidor	Marc	Química Física
Peigné	Benjamin	Química Inorgànica
Ruiz Martínez	Antonio	Química Inorgànica

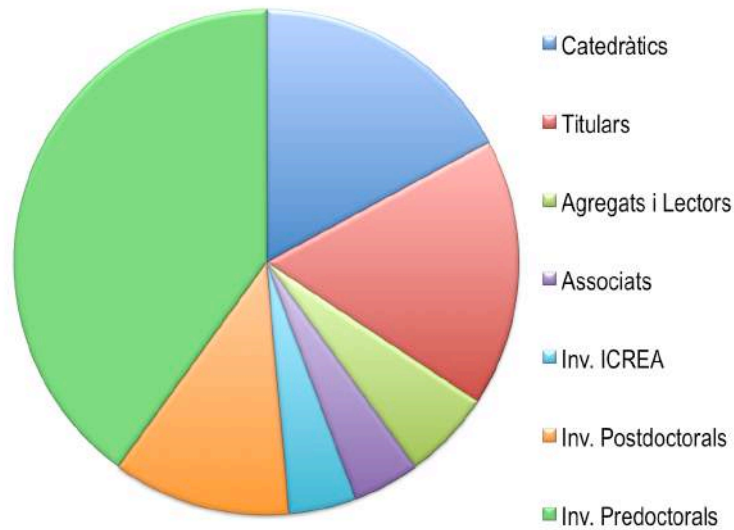


Figura. Distribució de membres docents/investigadors de l'IQTCUB segons categoria acadèmica.

I.4 EQUIP TÈCNIC

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

I.5 EQUIPAMENTS

Actualment, el gruix principal dels equipaments computacionals dels que disposa l'IQTCUB està format per cinc clústers de càlcul disposats en una sala condicionada dins la facultat de Física i Química. L'espai destinat als clúster de càlcul es troba refrigerat per dues màquines d'aire condicionat de 44K i 66K frigories respectivament.

CLÚSTERS DE CÀLCUL

cerqt2 (valor aproximat 400.000 €)

Tipus de màquina Clúster SUN (4 armaris).

Sistema Operatiu Red Hat Enterprise Server 2.1 i en els nodes de 64 bits Suse 9.2.

Serveis Clúster de càlcul i servidor de discos (raid amb màster fent un total de 2.5TB).
Servidor DHCP intern.

Estructura Màster + 111 nodes en clúster.

Comentaris 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

Màster

CPU: Opteron Dual a 1.80GHz (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).

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: Opteron 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 de 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 V20Z

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 €)*Tipus de màquina* Clúster HP*Sistema Operatiu* Debian Stable.*Serveis* Clúster de càlcul.*Estructura* 80 nodes en clúster*Comentaris* Tots els processadors son de 64 bits*Especificacions***80 nodes AMD HP Proliant 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)

Xarxa d'administració ILO

iqtc02 (valor aproximat 78.000 €)*Tipus de màquina* Clúster HP*Sistema Operatiu* SLES10.*Serveis* Clúster de càlcul.*Estructura* 26 nodes en clúster*Comentaris* 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 €)*Tipus de màquina* Clúster HP*Sistema Operatiu* SLES10.*Serveis* Clúster de càlcul.*Estructura* 11 nodes en clúster*Comentaris* 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 460.000 €)

Tipus de màquina Clúster HP

Sistema Operatiu SLES11.

Serveis Clúster de càlcul.

Estructura 101 nodes en clúster

Comentaris Tots els processadors son de 64 bits. Xarxa Infiniband

Especificacions:

101 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

SERVIDORS

Servidor GPU (valor aproximat 1500 €)

Tipus de màquina 1 màquina desktop

Sistema Operatiu SLES11

Serveis Càlculs amb GPU

Estructura 1 màquina

Especificacions:

Node

CPU: 1 Intel Core i7 950 3.06GHz

RAM: 16GB

HD: 1 disc de 1TB (Sistema operatiu)

Xarxa: 1 targeta 100/1000 xarxa interna

Servidors de discos glusterfs (valor aproximat: 35.000 €)

Tipus de màquina Clúster DELL

Sistema Operatiu SLES 10.2.

Serveis Clúster de discos formant 15TB de disc per exportar mitjançant GlusterFS les dades d'usuari a tots els clústers.

Estructura 5 nodes en clúster

Comentaris Servei crític amb un sai dedicat i fonts redundants.

Especificacions

Node PowerEdge 2950

CPU:2 Xeon QuadCore E5540

RAM:8GB

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

Xarxa: 2 targetes 100/1000 xarxa interna

Tipus de màquina HP DL180 G6

Sistema Operatiu SLES 11.

Serveis Amplia a 32TB de disc per exportar mitjançant GlusterFS les dades d'usuari a tots els clústers.

Estructura 1 node

Comentaris Servei crític amb un sai dedicat i fonts redundants.

Especificacions

Node Proliant DL180 G6

CPU:2 Xeon QuadCore E5520

RAM:56GB

HD: 12 discs 2TB (raid 5)

Xarxa: 2 targetes 100/1000 xarxa interna

Servidors d'entrada portals (valor aproximat 2300 €)

Tipus de màquina 2 màquines redundants HP Proliant DL-120

Sistema Operatiu Debian stable

Serveis SGE Execution Host, Heartbeat, ssh server

Estructura 2 nodes redundants

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

Especificacions

Node HP Proliant DL-120

CPU:1 Xeon Dual Core 2.33GHz.

RAM: 8GB.

HD: 1 disc de 160GB (Sistema operatiu).

Xarxa: 2 targetes 100/1000 xarxa interna.

Servidors de virtualització (valor aproximat 2300 €)

Tipus de màquina 2 màquines redundants HP Proliant DL-120.

Sistema Operatiu Debian stable.

Serveis Xenha i tots els serveis virtuals ofertats al IQTCUB.

Estructura 2 nodes redundants.

Comentaris Màquina que encabeix les màquines virtuals del IQTCUB (SGE, dhcp,

servidor llicències etc.). Suportada per un SAI conjuntament amb portals.

Especificacions

Node HP Proliant DL-120

CPU:1 Xeon Dual Core 2.33GHz

RAM:8GB

HD: 2 discos de 160GB (Sistema operatiu)

Xarxa: 2 targetes 100/1000 xarxa interna

Servidor de visualització (valor aproximat 3000 €)

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

Màster 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 màster i nodes (xarxa interna).

ALTRES _____

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

- Màquina Backup ACER Altos G540 (màquina de backup amb 5TB de disc i un SAI de suport).
- Màquina cintes HP MSL4048(maquina de cintes amb 48 cintes amb capacitat aproximada de 1TB/cinta).
- Màquina d'administració (pc amb 3 targetes de xarxa per suport a incidències crítiques).
- Màquina proxy (servidor que dona sortida a la xarxa publica des de la xarxa del iqtcb).
- Switch Layer 3 HP Procurve de 24 ports (dona cobertura a tota la infraestructura dels CPD del IQTCUB).
- 8 Switchs Layer 2 Dlink de 48 ports (xarxa interna clústers cerqt2, iqtcb01, iqtcb02, iqtcb03).
- 3 Switchs Layer 2 HP de 48 ports (xarxa interna clúster iqtcb04).

- 3 Switchs Infiniband Voltaire de 36 ports (xarxa càlcul iqtc04).
- Switch modulable HP (8 mòduls per xarxa interna clúster iqtc01,iqtc02,iqtc03).

El valor de l'equipament/maquinari addicional del que disposa l'IQTCUB és d'aproximadament 30.000 €

RESUM DEL POTENCIAL DE CÀLCUL _____

Processadors.....2050 CPU's

Memòria.....6600 GB RAM

Discs de Càlcul..... 140.332 TB

Discs d'Usuari..... 32 TB

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

1.500.600 €*



Imatge del clúster de càlcul de l'IQTCUB i el senyor Jordi Inglés Camats, responsable de sistemes de l'institut.

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

II. ACTIVITATS DE L'IQTCUB

II.1 ACTIVITATS DE TIPUS GENERAL

A continuació es detallen les accions i activitats de tipus general dutes a terme per l'IQTCUB al llarg de l'any 2011.

- a. *2ª Jornada de l'IQTCUB*. El dia 29 d'abril del 2011 l'Institut va organitzar, per segona vegada, una jornada en la que membres de l'IQTCUB i altres conferencians de reconegut prestigi internacional exposen els seus treballs més recents. En aquesta edició hi participà el professor Todd J. Martinez de la Universitat de Stanford, USA. Les despeses totals de la Jornada es corresponen al cost de l'estada del professor Martinez i al servei de catering pels assistents.

Despesa associada: 1.188 €



Imatge realitzada durant la participació del Prof. Todd Martinez en la 2ª Jornada de l'IQTCUB.

- b. *Promoció i incentivació a la recerca*. L'IQTCUB ha concedit un total de dos *Ajuts d'iniciació a la recerca* consistents en beques personals per valor de 1.800 €. Aquests ajuts estan destinats a estudiants que estiguin acabant o que hagin finalitzat els seus estudis de grau o llicenciatura i tenen una durada de 6 mesos amb l'objectiu de facilitar la realització d'un màster oficial de la UB i la col·laboració en les tasques de recerca dels grups de l'IQTCUB. Aquestes beques han recaigut a la senyora Maria Fumanal Quintana i al senyor Santiago Alonso Gil.

Despesa associada: 3.600 €

- c. *Curs d'Introducció a la Química Computacional*. L'objectiu principal del curs és ampliar els coneixements d'informàtica aplicada a la química computacional. El curs, que té una durada d'una setmana, està adreçat als alumnes dels graus de Química i d'Enginyeria Química de la Universitat de Barcelona. En l'edició d'enguany, celebrada del 27 de juny a l'1 de juliol i hi participaren 25 alumnes, entre els quals l'IQTCUB va concedir un total de deu ajuts per la participació en el curs consistents en beques personals per valor de 150 € per alumne. L'IQTCUB també ha destinat un total de 266,09 € a despeses de càtering durant la realització del curs.

Despesa associada: 1.766,09 €



Imatge realitzada durant la realització del *Curs d'Introducció a la Química Computacional* a la Facultat de Química de la Universitat de Barcelona.

II.2 SEMINARIS I CONFERÈNCIES DE L'IQTCUB

D'ençà des de principis del 2011 i fins a la data, l'IQTCUB ha organitzat un total de cinc seminaris i/o conferències.

1. Prof. Motoyuki Shiga (CCSE, Japan Atomic Energy Agency) Japó

Ab initio simulation beyond classical Dynamics

13 de gener de 2011

2. Dr. Marco Masia (University of Sassari) Itàlia

Ion-water polarizable interactions: classical potentials from ab-initio molecular Dynamics simulations

10 de març de 2011

3. Dr. Stoyan Pisov (University of Sofia) Bulgària

Thermodynamics and mechanical properties of nanosized clusters and nanowires

16 de març de 2011

4. Dra. Laura Pitulice (West University of Timisoara) Romania

Fractal analysis – a tool for comparison of protein structures

23 de març de 2011

5. Prof. Manuel Lara (Universitat Autònoma de Madrid) Espanya

Reaching the cold regime: latest news on the $S(^1D)+H_2$ open shell reactive collision

22 de setembre de 2011

II.3 INVESTIGADORS CONVIDATS PER L'IQTCUB

Durant el 2011 el IQTCUB ha acollit un total d'onze visites temporals d'investigadors externs.

- 1. Lyudmila V. Moskaleva** (visitant convidada)
Universität Bremen, Alemanya
Gener 2011
- 2. Hristiyan A. Aleksandrov** (visitant HPCE)
Sofia University of St. Kliment Orhidski, Bulgària
Gener-Febrer 2011
- 3. Alexey Sokol** (visitant convidat)
University College London, Regne Unit
Febrer-Març 2011
- 4. Miroslava Nedyalkova** (visitant HPCE)
Sofia University "St. Kliment Ohrydsky", Bulgària
Febrer-Març 2011
- 5. Prof. Scott Woodley** (visitant convidat)
University College London, Regne Unit
Març-Maig 2011
- 6. Laura Pitulice** (visitant convidada)
University of the West Timisoara, Romania
Març i Novembre-Desembre 2011
- 7. Cono di Paola** (visitant convidat)
Kings College London, Regne Unit
Maig 2011
- 8. Prof. Fedor Goumans** (visitant convidat)
Leiden University, Països Baixos
Juny-Juliol 2011

- 9. Tsvetan Zahariev** (visitant convidat)
Sofia University of St. Kliment Orhidski, Bulgària
Juny-Juliol 2011
- 10. April Daigle** (visitant convidada)
Dartmouth College, Estats Units
Juny-Juliol 2011
- 11. Prof. Georgi N.Vayssilov** (visitant convidat)
University of Sofia, Bulgària
Juliol 2011
- 12. Prof. José A. Rodriguez** (visitant convidat)
Brookhaven National Laboratory, Estats Units
Juliol-Setembre 2011
- 13. Prof. Maria Marta Branda** (visitant convidada)
Universidad Nacional del Sur, Argentina
Octubre 2011

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 diferenciades i descrites a continuació.

LÍNIA 1. 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).

LÍNIA 2. 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.

LÍNIA 3. 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 d'energia potencial per l'estudi de la dinàmica de reaccions.

LÍNIA 4. 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.

LÍNIA 5. FISCOQUÍMICA 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-lligand, així com el desenvolupament de noves eines computacionals (docking flexible).

LÍNIA 6. NANOESTRUCTURES, SUPERFÍCIES, INTERFASES I CATÀLISI

Dins d'aquesta línia d'investigació s'estan estudiant reaccions catalitzades per superfícies tan de materials estesos com de nanopartícules i també s'estudien nous materials amb aplicacions tecnològiques basats en agrupacions d'unitats estructurals no convencionals. En el cas de les nanopartícules es consideren tan aïllades, i per tant nues, com suportades en diversos substrats, normalment òxids o carburs de metalls de transició. El models des superfícies permetent estudiar els mecanismes de reacció catalitzats heterogèniament i entendre a fons el paper que juga la superfície. En aquest sentit hi ha un esforç important en l'estudi dels aspectes dinàmics de les reaccions que tenen lloc en les superfícies dels sòlids. D'altra banda els models a base de nanopartícules suportades representen adequadament més els sistemes catalítics reals. S'elaboren models de nanopartícules de diferents materials, tant metalls com òxids o carburs i les seves combinacions. Dintre de les reaccions objecte d'estudi destaca la conversió efectiva del CO_2 i CH_4 en compostos químics útils i la reacció de desplaçament d'aigua, clau en la producció d'hidrogen net. Aquestes es troben per tant 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. 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. Finalment, s'està treballant en models sofisticats per tractar la fotocatalisi.

LÍNIA 7. 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 tant estequiomètrics com dopats. Precisament el dopatge és fonamental per explicar les propietats de molts d'aquests materials. D'altra banda, pel que fa a les propietats magnètiques, s'estudien els mecanismes d'interacció magnètica en materials moleculars magnètics orgànics i inorgànics, l'anàlisi dels paràmetres fonamentals en les interaccions magnètiques en materials fortament correlacionats del tipus abans esmentat, les simulacions de propietats macroscòpiques a partir del coneixement dels paràmetres abans esmentats i les propietats de compostos polinuclears i sòlids de metalls de

transició. 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 i l'aplicació de nous funcionals a l'estudi de sòlids i sistemes moleculars que presenten un acoblament ferromagnètic fort.

III.2 ACTIVITATS EN CADA LÍNIA DE RECERCA

LÍNIA 1. MÈTODES TEÒRICS I ALGORISMES

1.1 Estructura Electrònica

A. Activitats dins la línia de recerca

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

B. Pla de treball

Durant aquest període, s'ha treballat principalment en el desenvolupament del càlcul analític de les mesures contínues de simetria i en la seva aplicació a gran varietat de compostos inorgànics.

S'han definit les mesures d'operació, que indiquen per a cada operació de simetria que forma part d'un grup en quin grau són realment operacions de simetria per a una estructura donada. A partir de les operacions de simetria, ha estat possible definir les mesures contínues de simetria per a grups puntuals. Tant les mesures d'operació com de grup s'han utilitzat com a eines rutinàries en l'estudi de compostos inorgànics.

C. Objectius assolits

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

1.2 Estructura dels Materials Moleculars

A. Activitats dins la línia de recerca

Propietats magnètiques de sòlids moleculars. 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 llindars. El programa d'optimització final, per altra banda, es basa en un algorisme *Steepest descent* segons uns potencials de tercera generació, els coneguts com a e-píxels, els quals es basen en concentrar la densitat electrònica, *ab initio* prèviament obtinguda, en un volum donat.

B. Pla de treball

L'objectiu d'aquesta línia és desenvolupar la metodologia teòrica necessària per calcular amb precisió el mecanisme d'interacció magnètica i les propietats magnètiques macroscòpiques de cristalls moleculars magnètics. En el grup GEM2 hem desenvolupat una metodologia pròpia, anomenada "First-principles Bottom-up" que permet estudiar ambdós aspectes de la interacció magnètica per a qualsevol cristall molecular i ho estem aplicant amb èxit a cristalls magnètics d'especial interès (entre ells, podem destacar: (1) els que presenten baixa dimensionalitat magnètica, (2) els que són biestables, i (3) els que presenten alta temperatura crítica).

C. Objectius assolits

S'ha demostrat el funcionament correcte del mètode "First-principles Bottom-up" en una àmplia varietat de topologies magnètiques.

1.3 Estructura i Xarxes Cel·lulars

A. Activitats dins la línia de recerca

Malgrat que una part de la recerca es realitza mitjançant l'ús de programes de simulació per Dinàmica Molecular, una altra part de la recerca es dedica al desenvolupament d'esquemes de simulació mixtes que combinen descripcions discretes Monte Carlo per partícules 'grosses' (proteïnes) i esquemes continus per aquells components més petits (lípid de la membrana).

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 (lípid 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 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.

1.4 Biofísicoquímica de Macromolècules i Col·loides

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 molecular).

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 estudiat el procés de difusió en medis crowding a partir de simulacions Monte Carlo en sistemes tridimensionals eliminant així la influència de les restriccions degudes a la baixa dimensionalitat dels sistemes 2D. Els resultats de les simulacions mostren una gran influència del grau de mobilitat dels obstacles. Amb obstacles immòbils, es produeix una major difusió anòmala que augmenta amb l'increment de la concentració d'obstacles, i que per un mateix volum ocupat d'obstacles, l'efecte de la difusió anòmala és menys important per obstacles de major grandària. Per altra part, les simulacions amb obstacles mòbils, l'efecte de la mida és l'invers al cas anterior, donant ara valors que estan en concordança amb els valors dels experiments in vitro de la difusió de proteïnes en medis crowding.

1.5 Dinàmica de Reaccions en Sistemes Poliatòmics

A. Activitats dins la línia de recerca

Desenvolupament d'eines orientades a l'estudi mecano-quàntic de la dinàmica de reaccions. Avui en dia hi ha a disposició de la comunitat científica tot un conjunt de codis

computacionals que permeten dur a terme estudis dinàmics Mecano-quàntics per a un ventall de reaccions. 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.

B. Pla de treball

Seguint la línia els darrers 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. Durant el bienni 2009-10 es va desenvolupar el mètode sota la limitació de moment angular total zero ($J=0$) i la seva extensió per valors de moment angular total diferent de zero. Tasques que s'han realitzat en l'any 2011:Desenvolupament d'un mètode alternatiu pel qual l'estat inicial de la simulació no s'ha de construir ad-hoc si no que es construeix de manera automàtica diagonalitzant, dins l'esquema MCTDH, el Hamiltonià de reactius.

C. Objectius assolits

Validació del codi computacional "captura estadística – MCTDH" per valors del moment angular total més grans que un. Mercès a la feina desenvolupada al llarg del 2011 per en Marc Moix, aquest codi es pot executar en dues modalitats diferents.

1.6 Dinàmica de Reaccions Químiques

A. Activitats dins la línia de recerca

L'activitat del Grup de Recerca de Dinàmica de Reaccions Químiques dintre de línia L1 de recerca, se centra per una banda, en el desenvolupament d'algorismes per tal de millorar la descripció de les interaccions intermoleculares febles mitjançant el desenvolupament de noves funcions de potencial analítiques, i per un altra, en l'aplicació de l'algorisme de la hiperquantització en coordenades hiperesfèriques per l'estudi de la dinàmica de reaccions químiques per mètodes de dinàmica quàntica. També es treballa en el desenvolupament i la implementació de la metodologia hemiquàntica per a processos electrònicament no adiabàtics i el càlcul 'on the fly' de trajectòries clàssiques reactives.

B. 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 mol bé amb diferents entorns electrostàtics i la seva idoneïtat per descriure diferents sistemes es va comprovar duent a terme un estudi ab initio dels clústers que els ions halogenur i els ions alcalins 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 en 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.

C. Objectius assolits

En la línia teòrica de desenvolupament de potencials d'interacció per ser usats en simulacions de Dinàmica Molecular i la posterior aplicació als estudis dinàmics de sistemes cada vegada és complexos també s'han assolit els objectius que s'havien fixat. Per una banda s'han estudiat sistemes solvatats per un número elevat d'àtoms d'Ar, la qual cosa ha permès, per una banda, veure que els potencials són capaços de descriure canvis de fase i, per l'altra, analitzar les característiques de la microsolvatació analitzant el pas des de la reagrupació d'agregats relativament petits fins a la solvatació. També s'ha assolit l'objectiu de començar a tractar sistemes solvatats per aigua com ara el Bz i els agregats que aquesta molècula aromàtica forma amb els ions alcalins. A més s'ha començat a estudiar sistemes en dissolució analitzant l'efecte que fan els tensioactius en la iniciació de la formació d'hidrats de metà. Aquesta línia d'investigació ha donat lloc a 7 publicacions científiques a *Theo. Chem. Acc.* (1), *Phys. Chem. Chem. Phys.* (1), *Chem. Phys.* (2), *J. Phys. Chem. A* (2) i *Int. J. Quant. Chem.* (1).

Pel que fa a la recerca de dinàmica de reaccions químiques per mètodes de dinàmica quàntica, durant l'actual any del que s'informa s'han assolit diversos dels objectius, alguns d'ells totalment relacionats amb l'activitat desenvolupada en la línia experimental. Així, cal assenyalar l'estudi ab initio detallat de la superfície de potencial per a la isomerització i descomposició en fase gas, del ió $C_3H_7^+$, espècie química caracteritzada en els estudis experimentals de la reacció $Li^+ + iso-C_3H_7$ i d'altres. Per un altra banda, també s'ha estudiat a nivell ab initio MP2, i molt detalladament, la superfície d'energia potencial (SEP) de les reaccions de deshidrohalogenació en el sistema $Na^+ + i-C_3H_7$. Aquest estudi ha evidenciat la possibilitat de formació de propè per un camí que s'aparta del de mínima energia a partir de determinades energies de col·lisió. També per aquest sistema reactiu, s'han realitzat i es realitzen encara en l'actualitat, càlculs de trajectòries "on the fly" els quals, degut als elevats requeriments de temps de CPU exigits en el càlcul de la SEP a nivell MP2 al llarg de cada trajectòria, s'ha hagut de recórrer a substituir el càlcul ab initio per càlculs DFT-B3LYB, que proporcionen una topologia i energètica de la SEP de reacció molt propera a la caracteritzada a nivell MP2. Finalment, i també lligada a la tasca experimental, s'ha procedit a realitzar un estudi de la dinàmica de les reaccions de formació d'adductes entre diversos ions alcalins (Li, Na i K) i molècules donadores d'electrons, en concret el benzè. L'estudi de la dinàmica dels diferents sistemes s'ha realitzat a nivell del model de captura, emprant les SEPs analítiques desenvolupades en els estudis de Dinàmica Molecular i tenint present els estudis ab initio previs. Els resultats assolits comparats amb les mesures experimentals, posen de manifest les limitacions del model així com la necessitat de considerar la descomposició dels adductes formats per tornar a reactius. Els resultats obtinguts en aquest

estudis han estat en part publicats en diferents revistes d'àmbit internacional en el camp de treball (Inter. J. Quantum, Chem., Phys. Chem. Chem. Phys.).

Dintre del desenvolupament de noves metodologies, el grup va participar molt activament en el seu moment, en la implementació de programes de càlcul destinats a l'estudi de la dinàmica de reaccions per mètodes quàntics, i de manera molt concreta en el d'hiperquantització emprant coordenades hiperesfèriques en col·laboració amb la Universitat de Perugia. Dintre de l'aplicació d'aquesta metodologia s'han realitzat recentment estudis sobre la reactivitat dels àtoms de fluor amb molècules d'hidrogen i amb variants isotòpiques. Aquestes reaccions permeten un estudi molt detallat dels possibles efectes quàntics sobre SEPs model i han permès obtenir constants de velocitat en un ampli ventall de temperatures, des de pocs Kelvin fins a temperatures altes, i a la vegada han permès modelar les dependències tèrmiques de la constant de velocitat. Els resultats associats a aquesta tasca de recerca (Phys. Chem. Chem. Phys., Chem. Phys.) es troben en el apartat corresponent a les publicacions.

1.7 Estructura i Dinàmica de Sistemes Moleculars Complexes

A. Activitats 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 (L1. Mètodes Teòrics i Algorismes). L'activitat més representativa duta a terme durant els últims anys, es pot classificar en quatre subprojectes, que són: Estructura Electrònica aplicada a sistemes moleculars orgànics, el concepte de Camí de Reacció i la seva connexió amb la Dinàmica Clàssica, el model Mecano-Quàntic basat en els paquets d'ona, la mecànica de Madelung - de Broglie - Bohm.

B. Pla de treball

Durant aquest període s'ha portat a terme, pel que es refereix al treball en estructura electrònica estudiant compostos organometàl·lics. 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 proposar investigar nous algorismes d'integració. En el subprojecte de dinàmica, s'ha analitzat 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.

C. Objectius assolits

L'ús de funcions d'ona multirreferencials va permetre estudiar compostos organometàl·lics de Ti(IV) i Vanadi i es 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 aconseguit programar i utilitzar el Hamiltonià quàntic de camí de reacció en reaccions on l'efecte túnel és molt important.

1.8 Estructura Electrònica i Simetria

A. Activitats 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 quàntica. En particular, darrerament hem estat desenvolupant el formalisme matemàtic per calcular el contingut en simetria dels diferents orbitals d'una molècula tenint en compte les contribucions de les diferents representacions irreductibles a la pèrdua de simetria. De manera paral·lela treballem també en el desenvolupament d'algorismes matemàtics eficients per calcular les mesures contínues de forma i de simetria,

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

a) Mesures Contínues de Simetria El treball principal en aquesta línia de recerca s'ha centrat en l'aplicació de les mesures de simetria a diferents problemes químics, tant relacionats

amb l'estructura cristal·lina a nivell atòmic com amb l'estructura molecular. En el vessant més teòric s'ha continuat treballant en el desenvolupament del formalisme de les mesures contínues de simetria abordant el problema de quantificar la simetria per a funcions que es transformen segons les diferents representacions irreductibles d'un grup puntual.

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.

c) Estereodinàmica d'Engranatges Moleculars En aquest àmbit s'ha treballat majoritàriament en l'aclariment del comportament estereodinàmic dels anomenats "torniquets" de Kelly. El treball s'ha centrat en l'estudi de la superfície d'energia potencial per al moviment de torniquet, que implica la rotació del fragment triptílic sense que tingui lloc l'enantiomerització del fragment helicè.

C. Objectius assolits

a) Mesures Contínues de Simetria En un dels treballs publicats en aquesta línia s'ha estudiat des del punt de vista de la simetria l'estructura geomètrica i l'estructura electrònica de molècules que presenten eixos de simetria de diferents ordres en una disposició concurrent. En aquest cas hem desenvolupat un algorisme per calcular el contingut de simetria rotacional per a seccions de la densitat electrònica disposades de manera perpendicular a l'eix.

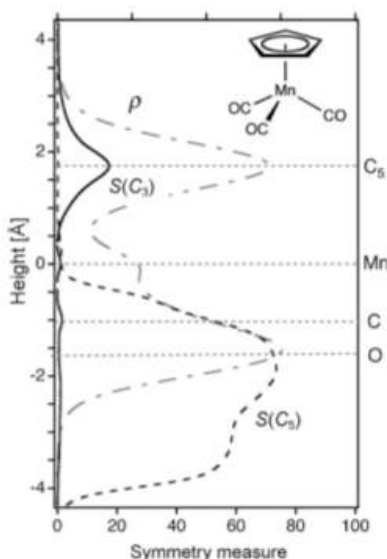


Figura 1 Densitat electrònica de valència i mesures de simetria rotacional C_3 i C_5 en seccions perpendiculars a l'eix principal de simetria de la molècula $[Mn(Cp)(CO)_3]$.

L'altre focus d'interès en aquest camp ha estat l'aplicació de les mesures contínues de simetria a l'anàlisi de l'enllaç químic. En aquest sentit s'ha estudiat en detall l'efecte que té la introducció d'una font d'assimetria (pertorbació en l'electronegativitat) sobre un enllaç químic

format per un parell d'electrons. Les eines emprades en aquest treball han estat les mesures contínues de simetria calculades tant per al hamiltonià del sistema com per a orbitals moleculars, matrius de població de solapament o cadascun dels dos orbitals atòmics implicats.

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.

c) Estereodinàmica d'Engranatges Moleculars En aquest àmbit s'ha treballat majoritàriament en l'aclariment del comportament estereodinàmic dels anomenats "torniquets" de Kelly. El treball s'ha centrat en l'estudi de la superfície d'energia potencial per al moviment de torniquet, que implica la rotació del fragment triptílic sense que tingui lloc l'enantiomerització del fragment helicè.

1.9 Dinàmica de Reaccions Atmosfèriques i Sistemes Complexos

A. Activitats dins la línia de recerca

Mètodes teòrics i algorismes: Aprofundiment en l'estudi del problema de la pseudo-quantització vibracional (partint de l'energia vibracional clàssica dels productes) i del problema de la violació de l'energia (vibracional) de punt zero (ZPE) en els càlculs de trajectòries quasi-clàssiques (mètode QCT). Tot això s'ha fet amb idea d'identificar les estratègies més adients per tractar les dues qüestions anteriors, i que puguin ser útils, no solament per sistemes tetratòmics, sinó fins i tot també per sistemes més grans. En el primer cas, s'ha analitzat amb molt detall la dinàmica de la reacció $\text{OH} + \text{D}_2 \rightarrow \text{HOD}(v_1', v_2', v_3') + \text{D}$, que és de referència ("benchmark") per les reaccions tetratòmiques que tenen lloc de forma directe. En el segon cas, s'ha completat la recerca sistemàtica QCT sobre la cinètica de la reacció $\text{CH}(v=0,1) + \text{H}_2, \text{D}_2$, tenint en compte tots els canals (reactius i no reactius). Com ja s'ha indicat en la memòria anterior, aquests sistemes són força difícils d'estudiar, fins i tot a nivell QCT, degut a la gran violació de ZPE que té lloc en els productes formats, resultat de la presència d'un mínim molt profund (radical metil) en el camí de mínima energia. El sistema $\text{CH} + \text{H}_2$ i variants isotòpiques, probablement, jugaran el rol de sistema de referència per reaccions tetratòmiques que tenen lloc via la formació de complexos de col·lisió de llarga vida. El que aquí es considera és força important per assegurar el caràcter predictiu dels estudis QCT.

C. Objectius assolits

S'han obtingut resultats força interessants a nivell pràctic, tant per la pseudo-quantització vibracional (partint de l'energia vibracional clàssica de les molècules producte) com pel que fa referència al grau molt elevat de violació de ZPE que presenten les reaccions químiques amb algun mínim profund en el camí de reacció, tot això en el context del mètode QCT. En relació al primer punt, s'ha publicat un treball [OH + D₂ → HOD + D (dinàmica), J Phys Chem A (2011)] i existeix un altre força avançat en fase d'escriptura sobre el mateix sistema, on es fa una comparativa amb l'experiment en el sistema de referència del laboratori i s'aprofundeix en el mecanisme microscòpic de reacció i les seves implicacions en la dinàmica. Respecte del segon punt, s'han publicat dos treballs [CH + H₂ (cinètica), Phys Chem Chem Phys (2011) i CH(v=0,1) + D₂, H₂ (cinètica), Phys Chem Chem Phys (2011)] i s'està a punt de completar l'estudi de la dinàmica de CH + D₂ → CD + HD (reacció de bescanvi) y la cinètica de CD + D₂. Es de dos treballs fortament relacionats amb els dos anteriors i que permetran completar l'anàlisi de la violació de la ZPE en sistemes amb algun pou profund en el camí de reacció. La reacció de bescanvi resulta particularment difícil de tractar en relació al problema de la ZPE, per motius que encara no estan clars.

LÍNIA 2. DINÀMICA I CINÈTICA DE REACCIONS, ESTATS EXCITATS I ESPECTROSCÒPIA

2.1 Dinàmica de Reaccions en Sistemes Poliatòmics

A. Activitats dins la línia de recerca

Dinàmica quàntica de reaccions poliatòmiques. Els estudis moleculars de les reaccions ens proporcionen un coneixement més profund d'aquests processos i la possibilitat de controlar-ne la reactivitat, per exemple, disposant l'energia de la manera més efectiva, per exemple mitjançant l'us de làsers. 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.

Fisorció de gasos en nanoestructures. Des d'una perspectiva dinàmica, realitzem estudis de la fisorció de gasos sobre agregats de nanotubs de Carboni, mitjançant simulacions de dinàmica molecular. Paral·lelament, la combinació d'aquesta línia de recerca amb el punt anterior ha derivat en la gènesi d'una sèrie de treballs on, mitjançant metodologies mecanoquàntiques, estudiem les distorsions introduïdes en els nivells energètics de les molècules confinades en nanotubs.

B. Pla de treball

Dinàmica i cinètica de reaccions, estats excitats i espectroscòpia

Pel que fa aquest àmbit de recerca he realitzat les següents tasques:

Càlcul mecano-quàntic exacte de constants de velocitat per les reaccions $H + CH_4$, $H + CH_3D$ i $H + CH_3T$. Convergència de paràmetres.

Producció de resultats finals per l'estudi dinàmic-quàntic del procés de adsorció dissociativa: $CH_4 + Ni(111) \rightarrow CH_{3(ad)} + H_{(ad)}$. Efecte de la temperatura de superfície.

Simulació mitjançant dinàmica quàntica i paquets d'ones cartesianes d'una molècula confinada a l'interior d'un nanotub de Carboni (8,0).

Simulació mitjançant dinàmica quàntica i MCTDH d'una molècula confinada a l'interior d'un nanotub de Carboni (8,0).

Simulació mitjançant dinàmica quàntica i paquets d'ones cartesianes d'una molècula confinada a l'interior d'un nanotub de Carboni (10,0).

Estudi de la possible extensió dels estudis al confinament de molècules d'aigua.

C. Objectius assolits

S'ha finalitzat l'estudi, sobre un model simplificat, de la dinàmica d'adsorció del metà sobre una superfície de níquel. Aquest treball ha contemplat la influència de la vibració i la rotació de la molècula de gas així com la temperatura de la superfície metàl·lica.

S'ha obtingut l'estructura de nivell lligats d'una molècula de H₂ confinada a l'interior de nanotubs de carboni.

2.2 Estructura Electrònica i Simetria

A. Activitats dins la línia de recerca

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

B. Pla de treball

S'ha iniciat un estudi a nivell teòric i computacional de noves família de cromòfors orgànics candidats per a ser emprats com a sensibitzadors en cel·les solars. Aquest treball s'està duent a terme en col·laboració amb el grup del Prof. Michael 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. En aquest mateix sentit, també s'ha iniciat una col·laboració amb el grup del Prof. Emilio Palomares de l'Institut Català d'Investigació de Química, per a la caracterització a nivell computacional de les propietats fotofísiques i fotoquímiques de diferents cromòfors orgànics.

C. Objectius assolits

S'ha publicat un estudi a nivell teòric i computacional de l'efecte del pont conjugat en cromòfors orgànics del tipus donador-pont-acceptor. En aquest, s'han discutit en detall els paràmetres que regulen les propietats d'absorció de llum solar per part del cromòfor mitjançant a una excitació electrònica de transferència de càrrega.

2.3 Dinàmica de Reaccions Atmosfèriques i Sistemes Complexos

A. Activitats dins la línia de recerca

Estudi de la dinàmica i cinètica de varies reaccions químiques en fase gasosa seleccionades, d'interès en química atmosfèrica, processos de combustió, astroquímica i àtom-ió molecular. Aquesta activitat s'ha desenvolupat utilitzant mètodes dinàmics clàssics i/o mètodes

dinàmics quàntics dependents del temps [exacte (es a dir incloent l'acoblament de Coriolis) o amb l'aproximació CS ("centrifugal sudden"); mètodes CC-RWP i CS-RWP, respectivament] i utilitzant superfícies d'energia potencial ab initio d'elevat nivell. D'altra banda, cal afegir que l'ajust analític de la SEP fonamental ab initio MRCI del sistema tetratòmic H_3O^+ , que és força rellevant en Astroquímica (reaccions $\text{OH}^+ + \text{H}_2$ i $\text{O} + \text{H}_3^+$), està encara en progrés degut a la seva gran dificultat.

C. Objectius assolits

A banda de les reaccions que ja s'han esmentat en el punt L1 ($\text{OH} + \text{D}_2$, $\text{CH} + \text{H}_2$, $\text{CH}(v=0,1) + \text{D}_2$, H_2), s'han finalitzat les taques següents: estudi QCT & VTST del sistema làser químic $\text{O} + \text{CS} \rightarrow \text{CO} + \text{S}$ (per primera vegada s'ha obtingut una descripció satisfactòria de la constant de velocitat amb la temperatura), estudi QCT de les reaccions de rellevància en combustió $\text{O} + \text{CH}_4$, $\text{CD}_4 \rightarrow \text{OH} + \text{CH}_3$, $\text{OD} + \text{CD}_3$ [s'ha evidenciat l'important paper que juga el model pseudotriatòmic, fins i tot a energies de col·lisió força elevades (fins 64 kcal mol^{-1})], estudi dinàmic quàntic exacte (mètode CC-RWP) de la reacció $\text{Ne} + \text{H}_2^+(v_0=0-4, j_0=1) \rightarrow \text{NeH}^+ + \text{H}$ (s'han observat seccions eficaces oscil·lants en condicions energètiques gens habituals), i l'estudi dinàmic QCT i quàntic (mètode CS-RWP) de les reaccions $\text{O} + \text{H}_2^+ \rightarrow \text{OH}^+ + \text{H}$, $\text{OH} + \text{H}^+$. En total s'han publicat quatre treballs en aquesta línia [tres ja han estat citats al tractar la línia anterior més un treball sobre el $\text{Ne} + \text{H}_2^+$ (J Phys Chem A (2011))] i existeixen varis treballs en fase avançada de redacció.

2.4 Dinàmica de Reaccions en Superfície

A. Activitats 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 (QCT), emprant superfícies d'energia potencial (SEPs) analítiques o interpolades basades en dades calculades amb la Teoria del Funcional de la Densitat (DFT).

B. Pla de treball

Hem realitzat estudis dinàmics QCT en condicions tèrmiques dels processos: $\text{O} + \text{b-cristobalita}$, $\text{O}_2 + \text{b-cristobalita}$ i $\text{O} + \text{O-b-cristobalita}$ (reacció Eley-Rideal) usant dues SEPs construïdes en base a les nostres dades DFT, emprant el mètode d'Interpolació Corrugation Reducing Procedure (CRP). Els càlculs han estat fets amb el programa QCTSURF desenvolupat en el nostre grup. Aquestes dades han servit per determinar constants de velocitat tèrmiques a

partir d'expressions derivades de la teoria de col·lisions.

També hem fet estudis dinàmics QCT dels processos: O + grafit, O₂ + grafit i O + O-grafit (reacció Eley-Rideal) usant dues SEPs construïdes en base a les nostres dades DFT, emprant el mètode d'Interpolació modificat de Shepard (MS) i una SEP periòdica analítica (FPLEPS).

Hem acabat de desenvolupar un codi per a construir SEPs amb el mètode d'interpolació MS per a sistemes gas-superfície, en coordenades cartesianes.

C. Objectius assolits

La construcció de SEPs via els mètodes FPLEPS (analític) o MS (interpolació) semblen ambdós factibles per als sistemes gas-superfície amb gasos d'1 o 2 àtoms, essent el MS més acurat però també més costós. No obstant aquest últim presenta més problemes respecte a la qualitat de les seves derivades.

Els càlculs de trajectòries quasiclàssiques ha demostrat una vegada més la seva utilitat per a obtenir informació dinàmica, la qual pot ser comparada en bon acord amb les dades experimentals.

2.5 Dinàmica de Reaccions Químiques

A. Activitats 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

Durant el període considerat part de la tasca experimental ha estat enfocada a la millora de l'equipament disponible, tant en l'aparell de feixos de ions guiats per un camp de radiofreqüència per a col·lisions a baixes energies de l'ordre de l'eV, com en el de feixos creuats a energies de pocs keV. Aquestes tasques de millora de les prestacions de l'equipament s'han completat amb l'estudi experimental de diversos sistemes d'interès químic amb ions alcalins, tant de reaccions químiques amb trenca d'enllaços i formació de noves espècies com en la formació d'adductes ió-molècula d'interès mediambiental.

C. Objectius assolits

En aquesta recerca s'utilitza l'equipament experimental, de disseny propi i instal·lat en el laboratori del grup que està destinat a l'estudi de reaccions ió-molècula, tot detectant els productes iònics per espectrometria de massa. Cal destacar que tant el muntatge del sistema de

guia de ions per radiofreqüència (RF-GIB) con de l'espectròmetre de massa quadrupolar, així com també el seu control informatitzat, ha estat completament realitzat pels membres del grup, tenint present les exigències pròpies dels experiments a realitzar. Durant aquest darrer any, s'ha procedit a instal·lar un segon quadrupol destinat a seleccionar en massa els ions generats en la font de ions de manera que se'n pugui seleccionar un d'ells en el cas d'una barreja de diferents ions. En aquest moments s'estan finalitzant les tasques pertinents degudes a les modificacions esmentades de manera que es puguin realitzar dintre de l'any les primeres mesures de calibrat del nou muntatge. En la configuració actual es poden estudiar les reaccions entre ions alcalins i diferents molècules en fase gas, que poden donar lloc a diversos tipus de reaccions (deshidratació, deshidrohalogenació, transferència de càrrega, formació d'adductes ió-molècula,...). En quant a l'aparell de feixos creuats i actualment trobant-se en fase avançada, s'han realitzat modificacions mecàniques que permeten el moviment de la copa de Faraday per la mesura de la intensitat del feix iònic primari així com també s'ha instal·lat un mecanisme d'obtenció del feix que permetre detectar processos que tenen lloc però amb intensitat molt petita, tot reduint la relació entre el senyal pròpiament dit i el soroll del fons.

Dintre d'aquesta línia de recerca s'han estudiat diversos sistemes reactius que han donat a publicacions de recerca mostrades en el corresponent apartat (Phys. Chem. Chem. Phys.) així com a altres treballs actualment en preparació.

LÍNIA 3. ESTRUCTURA MOLECULAR I QUÍMICA QUÀNTICA

3.1 Estructura dels Materials Moleculars

A. Activitats dins la línia de recerca

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

B. Pla de treball

Un dels problemes que dificulten el progrés en el camp del magnetisme molecular és la possible existència de polimorfs en el sòlid cristal·lí, és a dir, la possibilitat que les molècules s'empaquetin en el cristall de diverses formes diferents, cadascuna de les quals és un polimorf.

La rellevància d'aquest fet és que estructures cristal·lines diferents en aquests casos presenten diferents propietats d'interès tecnològic (per exemple, magnètiques). És per això que és important predir els polimorfs més probables, com a pas previ a controlar l'obtenció específica d'aquelles en què estem interessats. En el nostre grup, hi ha una línia de treball centrada en el desenvolupament d'un programa d'ordinador ràpid i eficaç per predir els polimorfs més probables d'un cristall molecular. Aquest programa treballa amb potencials avançats (de nova generació) del tipus molècula ··· molècula, denominats Pixel. En el moment actual aquest programa ja funciona eficientment per cristalls moleculars de molècules neutres farmacèutiques. En una segona etapa pretenem aplicació el rang de cobertura a co-cristalls, i cristalls de radicals, Això permetrà que pugui usar-se per predir el polimorfisme de cristalls moleculars magnètics.

C. Objectius assolits

S'ha continuat amb l'estudi de polimorfisme cristal·lí i s'ha vist que l'algoritme codificat és capaç de reproduir les estructures experimentals en un 65% dels casos.

3.2 Dinàmica de Reaccions Químiques

A. Activitats 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.

B. Pla de treball

El pla de treball dintre d'aquest àmbit de la recerca en el grup normalment queda condicionat pels estudis dels sistemes que s'estudien experimentalment al laboratori de feixos moleculars amb la finalitat de poder obtenir per un costat, informació el més acurada possible sobre les característiques de les interaccions entre els reactius i caracterització de la corresponent superfície d'energia potencial (SEP) i per un altra, permetre una interpretació si més no a nivell qualitatiu del comportament dinàmic del sistema estudiat. Així mateix, l'estudi acurat de la SEP d'una reacció obre, posteriorment, la possibilitat de l'estudi dinàmic corresponent utilitzant diferents metodologies.

C. Objectius assolits

Dintre d'aquesta activitat de la recerca s'han estudiat durant l'any del que s'informa les SEP de diferents reaccions anteriorment esmentades, utilitzant el paquets de química quàntica electrònica habitual com són el GAMESS i el GAUSSIAN, a diferents nivells de càlcul (MP2, DFT-B3LYB o d'altres) en funció de les característiques específiques de la reacció a estudiar. En aquest sentit s'han estudiat amb detall les SEP d'algunes reaccions, entre elles les del $n\text{-C}_3\text{H}_7\text{Cl}$ i el $i\text{-C}_3\text{H}_7\text{Cl}$ amb ions liti i sodi. Caracteritzada la SEP de la reacció a un bon nivell de càlcul ab initio, es pot procedir posteriorment a l'estudi de la corresponent dinàmica de reacció. En aquest context s'està procedint actualment a l'estudi mitjançant trajectòries 'on the fly' de les reacció $\text{Na}^+ + i\text{-C}_3\text{H}_7\text{Cl}$ (així com d'altres), les quals, degut a la necessitat de calcular l'energia potencial així com els corresponents gradients d'energia al llarg de la trajectòria, comporten un temps de càlcul molt elevat per cadascuna, lo qual unit a la necessitat de calcular amb un cert marge de confiança la probabilitat reactiva, habitualment bastant més petita que la unitat, implica un requeriment de molt temps de càlcul (CPU) en grans ordinadors a l'abast en grans centres de supercomputació.

Part dels objectius assolits en aquesta activitat de recerca, en particular referida als estudis ab initio de les SEPs han estat convenientment publicats (Chem. Phys. Phys. Chem.) mentre que d'altres es troben en fase de redacció o a l'espera de resultats que es puguin obtenir, després de moltes hores de càlcul, a partir de les trajectòries que actualment s'estan calculant en diversos centres de supercomputació.

3.3 Dinàmica de Reaccions Atmosfèriques i Sistemes Complexos

A. Activitats dins la línia de recerca

Estudi ab initio MRCI de les superfícies d'energia potencial de més baixa energia de varis sistemes d'interès [$\text{Hg} + \text{OH} \rightarrow \text{HgOH}$ (aducte), $\text{HgO}(\text{s}) + \text{H}$ (atmosfera terrestre), $\text{H} + \text{CH} \rightarrow \text{H}_2 + \text{C}$ (combustió, atmosfera de Titan i medi interestel·lar), etc.]. Es calcularà una xarxa de punts (geometries i energies per cada sistema) prou densa per fer possible l'obtenció posterior de representacions analítiques adients, que faran possible els estudis dinàmics i cinètics de cada reacció seleccionada. Com és habitual en el nostre grup, les expressions analítiques es basaran en expansions en sèrie a molts cossos, degut als bons ajustos assolits anteriorment amb aquest procediment.

C. Objectius assolits

S'ha pràcticament completant l'estudi ab initio MRCI de les superfícies d'energia potencial de més baixa energia del sistema $\text{Hg} + \text{OH} \rightarrow \text{HgOH}$, $\text{HgO}(\text{s}) + \text{H}$ (atmosfera terrestre). No obstant, l'ajust de la SEP fonamental mitjançant la utilització d'una expressió matemàtica adient, està resultant molt complicat, tot i la simplicitat (aparent) d'aquest sistema. D'altra banda, sembla que hi ha un problema amb la descripció de la SEP fonamental fent servir pseudopotencials relativistes. A més a més, s'està desenvolupant amb normalitat el càlcul ab initio MRCI de les superfícies d'energia potencial de més baixa energia de la reacció $\text{H} + \text{CH} \rightarrow \text{H}_2 + \text{C}$ (combustió, atmosfera de Titan i medi interestel·lar).

3.4 Estructura Electrònica i Simetria

A. Activitats dins la línia de recerca

Relacions estructura/propietats En aquesta línia usem el formalisme de les mesures contínues de simetria tant a nivell estructural com per a l'estructura electrònica 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 entre relacions entre l'energia i la desviació de la simetria perfecta per a diferents conjunts de molècules senzilles per tal d'esbrinar quin és el contingut mitjà de simetria per a un conjunt de molècules idèntiques a una temperatura determinada.

C. Objectius assolits

En aquesta línia s'ha treballat bàsicament en l'establiment entre relacions 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.

LÍNIA 4. MATÈRIA TOVA, MACROMOLÈCULES, COL·LOIDES I MEMBRANES

4.1 Estructura i Xarxes Cel·lulars

A. Activitats 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 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.

Per últim, també portem a terme una recerca interdisciplinària en l'àmbit dels sistemes complexos, amb una dedicació especial a l'anàlisi i modelització dels sistemes complexos en biologia des de la perspectiva de la teoria de xarxes complexes. Més concretament, s'estudia la relació estructura-funcionalitat a escales intracel·lulars: xarxes metabòliques, de coexpressió i transcripció genètica, d'interaccions entre proteïnes, de senyalització cel·lular, etc., alhora que es treballa en el desenvolupament d'eines i metodologies teòriques en el context més general de les xarxes complexes.

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 atòmic-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.

Pel que fa a la sublínia de xarxes moleculars a nivell cel.lular: recopilació de dades empíriques d'organismes model; construcció de models de xarxa teòrics; ajust dels paràmetres dels models a les dades reals fernt servir mètodes analítics i computacionals; evaluació de propietats i anàlisi de resultats i implicacions que se'n deriven. En la sublínia de teoria de xarxes complexes: càlcul analític i simulacions numèriques sobre models i avaluació en sistemes reals.

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 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.

Caracterització de xarxes metabòliques com a xarxes complexes bipartites; modelització de xarxes metabòliques amb espais mètrics subjacents; estimació de la fiabilitat en termes probabilístics de les reaccions metabòliques; implicacions de la propietat de auto-similitud en xarxes complexes en quant a percolació; proposta d'un nou índex per a determinar la importància de les contribucions individuals a la dinàmica col.lectiva en xarxes complexes.

4.2 Biofísicoquímica de Macromolècules i Col·loides

A. Activitats dins la línia de recerca

Desenvolupament de models fisicoquímics per a l'estudi de la complexació macromolecular i desenvolupament de programes de simulació Monte Carlo per a l'estudi de l'efecte polielectrolític en la complexació macromolecular.

B. Pla de treball

Desenvolupament d'un programa de simulació Monte Carlo, dintre del formalisme Semi Gran Canònic, que tingui en compte, tant el binding específic (formalisme macrocanònic) com l'efecte de l'electròlit inert (formalisme canònic), per a estudiar l'efecte de les correlacions iòniques. Els resultats de les simulacions es compararan amb els obtinguts de les teories de camp mig.

C. Objectius assolits

El formalisme de simulació Monte Carlo, desenvolupat dintre del formalisme semi gran canònic, s'ha aplicat a l'estudi del binding de protons, al cas de superfícies de l'àtex 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, tiups Poisson-Boltzmann.

LÍNIA 5. FÍSICOQUÍMICA DE BIOSISTEMES I DISSENY DE FÀRMACS

5.1 Biofísicoquímica de Macromolècules i Col·loides

A. Activitats dins la línia de recerca

Desenvolupament de 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. Estudi en detall els processos de difusió i reacció de proteïnaes model 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

S'ha estudiat la reacció d'hidròlisi de N-succinyl-L-phenyl-Ala-p-nitroanilide catalitzada per l'alfa-quimiotripsina en medis crowded de Dextrans a partir d'experiments de FRAP.

S'han determinat els diferents factors involucrats en el creixement de les fibres A β 40 i A β 42 i que estan relacionats amb la seva toxicitat.

Modelització del creixement de les fibres amiloides A β 40 i A β 42.

5.2 Simulació Quàntica de Processos Biològics

A. Activitats dins la línia de recerca

Dins de la línia 5 (Físicoquímica de biosistemes i disseny de fàrmacs) el grup investiga els mecanismes de catàlisi enzimàtica en hemoproteïnes (en particular, peroxidases, catalases i enzims híbrids catalasa-peroxidasa, implicats en la resistència a la tuberculosi), glicosil hidrolases (enzims que degraden els carbohidrats) i glicosil transferases ((enzims que sintetitzen 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 2011 ens hem centrat en processos biològics claus per a la funció de certes hemoproteïnes (catalases i peroxidases), enzims actius en carbohidrats (glicosil hidrolases i transferases) i enzims que redueixen grups carbonil (aldo-keto reductases). Mitjançant càlculs de dinàmica molecular QM/MM i emprant nous algorismes de metadinàmica, hem desxifrat mecanismes moleculars que tenen lloc a l'interior dels enzims, com ara les glicosiltransferases (enzims que formen els enllaços glicosídics en carbohidrats) (Ardèvol i Rovira, *Angew. Chem. Int. Ed.* 2011), les catalases (enzims que desproporcionen el peròxid d'hidrogen) (Alfonso-Prieto i col. *J. Am. Chem. Soc.* 2011) i els enzims híbrids catalases-peroxidases, implicats en la resistència a la tuberculosi (Vidossich i col. *J. Phys. Chem. Lett.* 2011). Per altra banda, l'estudi de processos on no es produeixen reaccions químiques els realitzem mitjançant la dinàmica molecular clàssica (ús de camps de forces). Així, en col·laboració amb grups experimentals, hem determinat les causes de l'especificitat de les aldo-keto reductases de la família C, per diferents tipus de retinoids, algun d'ells precursors d'agents anticancerígens (Ruiz i col. *Chem. Biol. Inter.* 2011; *Biochem. J.* Article en premsa). També hem testejat models d'enzims redissenyats per a realitzar noves funcions (Addington i col. *Proteins* 2011).

C. Objectius assolits

1) S'ha desxifrat el mecanisme catalític de la trehalosa-6-fosfat-sintasa, que possiblement sigui general a totes les glicosiltransferases que actuen amb retenció de configuració del carboni anomèric (Ardèvol i Rovira, *Angew. Chem. Int. Ed.* 2011).

2) S'ha determinat l'itinerari conformacional del substrat al llarg de la reacció enzimàtica de la 1,3-1,4-beta-glucanasa, aspecte clau per a poder dissenyar inhibidors per a enzims de la mateixa família (Biarnés et al. *J. Am. Chem. Soc.* En premsa)

3) S'ha demostrat la bondat d'una variant de 1,3-1,4-beta-glucanassa dissenyada per a poder acceptar nous substrats (Addington i col. *Proteins* 2011).

4) S'ha demostrat que els enzims híbrids catalasa-peroxidasa, al contrari que molts altres enzims amb un centre actiu Fe(III), poden enllaçar oxigen (Vidossich i col. *J. Phys. Chem. Lett.* 2011).

5) S'ha determinat per causes del diferent comportament de catalases de diferents organismes respecte la formació de radicals proteics, reacció secundària que competeix amb la principal funció de l'enzim (descomposició de peròxid d'hidrogen) (Alfonso-Prieto i col. *J. Am. Chem. Soc.* 2011).

5.3 Dinàmica de Reaccions Atmosfèriques i Sistemes Complexos

A. Activitats dins la línia de recerca

Estudi QM/MM a nivell DFTB/MM del mecanisme de reacció de la proteasa NS3/NS4A del virus de la hepatitis C amb els seus tres substrats principals (varies unions peptídiques de la poliproteïna vírica). Això ha suposat no només completar la determinació del perfil d'energia segons el camí de reacció per tots els substrats elegits i les dues etapes principals analitzades [acilació (etapa limitant de la velocitat) i ruptura de l'enllaç peptídic], sinó també caracterització del perfil corresponent a l'energia lliure. També ha calgut completar la posada a punt/adaptació del programari al sistema objecte d'estudi per tal de que es pugui predir teòricament la constant de velocitat (en aquest cas, la formació del producte resultant del trencament de l'enllaç peptídic) mitjançant l'aplicació de la teoria variacional de l'estat de transició.

C. Objectius assolits

S'ha pràcticament finalitzat l'escriptura del treball on s'analitza a nivell MP2c AM1/MM el mecanisme de reacció (etapes, punts estacionaris, i perfils d'energia mono- i bidimensionals) de les reaccions de la proteasa NS3/NS4A del virus de la hepatitis C. Aquest estudi reforça les conclusions obtingudes un treball anterior fortament relacionat amb aquest [A. Rodríguez et al.,

Phys. Chem. Chem. Phys. 12, 8001–8015 (2010); estudi AM1/MM incorporant correccions MP2c AM1/MM només en el camí de mínima energia]. Per una altra part, està a prop de finalitzar l'estudi DFTB/MM del mecanisme d'aquestes tres reaccions. Això suposa la determinació del perfil d'energia segons el camí de reacció per les dues etapes principals analitzades i també el perfil corresponent a l'energia lliure, per tal de fer possible l'estudi cinètic posterior (que ja està en fase de realització mitjançant la teoria variacional de l'estat de transició).

5.4 Modelització de Sistemes Biològics y Disseny de Fàrmacs

A. Activitats dins la línia de recerca

Aquesta línia es centra en l'estudi de diferents proteïnes que presenten una marcada desregulació en diferents tipus de càncer y per a les quals existeixen resultats experimentals que les presenten clarament com a potencials dianes terapèutiques. Concretament les dianes que estudiem actualment es troben involucrades en dos processos cel·lulars bàsics: L' Apoptòsi i el Cicle Cel·lular. Però també estudiem processos involucrats en la Malària y la Tuberculosi.

Donat que l'objectiu final es la obtenció de compostos amb una possible activitat farmacològica, resulta imprescindible la col·laboració amb grups de bioquímica experimental, experts en cadascuna de les dianes estudiades, per a la realització d'assajos d'inhibició que permetin corroborar el potencial dels compostos trobats. Per a cadascuna de les dianes seleccionades s'especifica el grup bioquímic experimental amb el qual es col·labora per a la realització del treball experimental.

Un cop verificat, mitjançant assajos experimentals, que la aproximació seguida permet generar compostos actius per a les dianes seleccionades, cal procedir a la optimització dels compostos obtinguts i cerca de nous compostos actius que presentin diferent esquelet o mecanisme d'acció.

B. Pla de treball

Bàsicament s'ha treballat en dues línies : a) L'estudi de les interaccions de les proteïnes antiapoptòtiques de la família Bcl-2 amb els seus membres proapoptòtics i b) l'optimització d'inhibidors de les proteïnes Cdk4 i Cdk6.

a) Donat que un pèptid (BimBH3) de la proteïna proapoptòtica Bim s'uneix amb afinitat similar a tots els membres antiapoptòtics de la família Bcl-2, la nostra finalitat va ser determinar quines son les interaccions implicades en aquesta unió per tal de poder utilitzar-les com a patró en la cerca de petites molècules inhibidores que serien efectives davant tota la família de proteïnes. Paral·lelament, es van analitzar les interaccions específiques establertes entre els

pèptids selectius BadBH3 i NoxaBH3 amb les respectives proteïnes antiapoptòtiques per al disseny de teràpies combinades.

Per altra part, s'ha treballat per obtenir pèptids derivats del domini BH3 de la proteïna proapoptòtica Bak i tractar d'incrementar la seva afinitat per la proteïna Bcl-X_L afavorint a la formació d'hèlixs. Amb aquest propòsit, s'han emprat eines computacionals per analitzar el complex entre la proteïna Bcl-X_L i el pèptid natural Bak així com per identificar les interaccions determinants en la unió. Posteriorment, s'han proposat pèptids sintètics derivats de la substitució dels residus prescindibles de Bak per residus de Aib amb l'objectiu d'incrementar la propensió a la helicitat. S'han realitzat també simulacions teòriques del comportament d'aquests pèptids sintètics i dels seus complexos amb Bcl-X_L. A partir d'elles, s'ha estimat l'afinitat teòrica per aquests i aquells predits amb una millor afinitat que Bak, han estat sintetitzats i estudiats experimentalment. A més la helicitat del pèptid natural i derivats sintètics s'han estudiat tant a nivell teòric com experimental per a tractar d'extreure conclusions sobre la seva implicació en l'afinitat dels pèptids.

b) Respecte a l'optimització d'inhibidors de les proteïnes Cdk4 i Cdk6 s'ha estudiat el procés de docking de diferent molècules sintetitzades experimentalment que imiten l'inhibidor natural d'aquestes proteïnes, el p16.

Finalment, continuant amb la línia teòrica desenvolupada al nostre grup, es van obtenir uns nous descriptors moleculars que permeten una aproximació quimiogenòmica al disseny de fàrmacs.

C. Objectius assolits

En la primera línia s'ha trobat que: el patró d'unió identificat per pèptids selectius o no reflexa majoritàriament unes interaccions compartides per tota la família.

La única distinció trobada entre les diferents subfamílies és que en el cas de Mcl-1 i A-1, dues de les interaccions hidrofòbiques semblen tenir més pes que les altres. En conseqüència, aquestes proteïnes són més permissives pel que respecta a mutacions d'aquests residus.

L'estudi de les dinàmiques dels pèptids lliure manifesta que la introducció de residus de Aib incrementa el contingut helicoïdal dels pèptids facilitant així, l'assoliment de la conformació bioactiva .

En la segona línia s'ha trobat que: els mètodes emprats per a la predicció d'afinitats experimentals amb cinc inhibidors coneguts de CDK6, únicament són capaços de reproduir les dades experimentals quan la grandària del lloc d'unió de la conformació del receptor considerada i els lligands eren de mida similar.

Les prediccions de les afinitats d'enllaç tan sols tenen sentit en els casos en que és possible identificar el mode d'unió experimental.

Una mesura de la fiabilitat d'aquests algorismes comparant-los amb mètodes més precisos basats en dinàmica molecular demostra que, fins i tot en aquest cas, és necessària una reparametrizació de la funció d'avaluació emprada (MM-PB/GBSA) per obtenir resultats fiables.

Finalment, a la tercera línia : s'ha proposat un desenvolupament metodològic que enfoca el problema del disseny de fàrmacs des d'una perspectiva més amplia: la quimiogenòmica

S'han desenvolupat uns nous descriptors moleculars basats en la entropia de Rényi (RED), per tal de caracteritzar la distribució dels parells de motius moleculars.

Els descriptors RED han demostrat una gran eficiència no només en la identificació de compostos actius sinó també en la assignació de perfils farmacològics a les molècules.

S'ha demostrat que amb els descriptors RED és possible predir de manera senzilla els efectes colaterals que pot tenir un determinat compost sobre un ampli ventall de dianes terapèutiques.

LÍNIA 6. NANOESTRUCTURES, SUPERFÍCIES, INTERFASES I CATÀLISIS

6.1 Nanoclústers i Materials Nanoestructurats

A. Activitats dins la línia de recerca

El grup centra el seu estudi en nanoclusters i nanoestructures de materials inorgànics d'importància tecnològica, com ara ZnO, TiO₂, o SiO₂. En particular, l'interès es centra en: (i) com varien les estructures i propietats dels nanoclusters en augmentar la grandària d'aquests, i (ii) l'estudi de nanoclusters com a potencials unitats de construcció de materials nous, com per exemple, materials nanoporosos.

B. Pla de treball

En aquest treball resulta essencial fer servir mètodes que pugin escanejar la superfície d'energia potencial (SEP) de forma eficient i precisa pels diferents isòmers dels clústers i/o de diferents polimorfs dels materials. Com a punt inicial en aquests estudis fem mètodes d'optimització global (p. ex. Basin Hopping) combinats amb potencials interatòmics. Un cop s'ha obtingut una representació raonable de la forma i els mínims de la SEP per un sistema donat, els resultats es refinen mitjançant càlculs basats en el funcional de la densitat per tal d'obtenir resultats més acurats del sistema sota estudi.

C. Objectius assolits

La metodologia comentada s'ha aplicat a un llarg nombre de sistemes. En primer lloc per a sòlids estesos hem extés resultats previs que demostren la possibilitat de que existeixin molts polimorfos de diferents materials en diferents entorns pel que fa a la coordinació del àtom i que encara no han estat sintetitzats. En quant a nanosistemes monodimensionals (1D), hem mostrat que els nanotubs de ZnS són estructural i electrònicament biestables amb la possibilitat d'una transició en resposta a una tensió externa. Finalment, per a sistemes quasi-0D destaquem un nou projecte que examina la estructura i nucleació de nanoclústers de silicats presents en el pols interestel·lar.

6.2 Reactivitat de Nanoestructures

A. Activitats dins la línia de recerca

El grup es centra en modelar propietats químiques, reactivitat, composició i estructura de nanopartícules de metalls i òxids representatius d'aquells estudiats en experiments rellevants per a catàlisi. Nosaltres també estem interessats en entendre com es formen diferents nanopartícules i en la caracterització computacional de la seva activitat catalítica. Les nostres eines computacionals principals es basen en els mètodes del funcional de la densitat.

B. Pla de treball

Un dels principals temes de recerca és entendre millor les similituds i diferències en les propietats catalítiques i rellevants de les nanoestructures (p.ex., escalable a nanopartícules de bulk i les seves disposicions) respecte a les estructures esteses (superfícies cristallines representades per models d'slab). Problemes seleccionats sota escrutini: (i) investigar les relacions entre la estructura atòmica i la reactivitat dels llocs actius en nous tipus de catalitzadors no suportats, com Au o Ag nanoporós i les seves mescles, per a reaccions d'oxidació a baixa temperatura; (ii) detecció i caracterització d'estructures superficials formades per carbonats i espècies relacionades adsorbides en diferents llocs de superfícies de nanopartícules d'òxid de ceri a partir d'una combinació d'experiment i teoria que inclou espectroscòpia vibracional i la simulació computacional de les freqüències de vibració; (iii) caracterització de la reorganització atòmica i electrònica que acompanya la deposició de espècies de Pt en suports d'òxid de ceri de diferent morfologia amb l'objectiu d'entendre com la nanoestructuració del suport afecta la composició i reactivitat dels catalitzadors industrials de tipus Pt/CeO₂.

C. Objectius assolits

S'han estudiat la dissociació d'O₂ i la co-adsorció de CO i d'àtoms d'O sobre or nanoporós, un material amb un bulk nanoestructurat, que es pot considerar com a un catalitzador d'or no suportat. S'han utilitzat models teòrics representats per slabs de Au(111) i de Au(321) amb impureses d'Ag per tal d'analitzar els resultats experimental existents. Hem detectat que la presència d'àtoms d'Ag incorporats en superfícies d'Au pot facilitar de manera significativa l'adsorció i dissociació d'O₂ sobre aquestes superfícies i que, a més, la co-adsorció de CO i O està energèticament afavorida per fins a 20kJ/mol.

Utilitzant models teòrics, s'han assignat els modes vibracionals observats mitjançant espectroscòpia FTIR dels complexos d'adsorció formats durant la interacció de CO₂ o CO amb superfícies de CeO₂. Així, s'ha considerat la presència de carbonats (CO₃²⁻), fomats (HCO₂) i d'hidrogenarbonats (CO₂(OH)-) enllaçats de manera diferent a una nanopartícula de CeO₂. La combinació de les dades experimentals amb les dades obtingudes computacionalment han permès re-assignar les bandes vibracionals de l'espectre IR dels diferents adsorbats sobre ceria. Aquesta re-assignació permet la detecció fiable de espècies presents en la superfícies de CeO₂ mitjançant espectroscòpia vibracional. Això és crucial per l'anàlisi de la reactivitat d'aquestes espècies i per la comprensió dels mecanismes dels diferents processos que tenen lloc sobre el CeO₂.

La interacció de partícules metàl·liques amb suports basats en òxids poden millorar el rendiment dels catalitzadors suportats. Els detalls a nivell microscòpic de les interaccions entre metalls i òxids sovint són difícils de detectar. El nostre estudi va permetre identificar dos tipus de intraccions oxidatives en models ben definits de catalitzadors formats per Pt i ceria (i) la transferència d'electrons de les nanopartícules de Pt al suport d'òxid i (ii) la transferència d'àtoms d'oxigen de la ceria al Pt. La transferència d'electrons es produeix independentment de la morfologia de la ceria, que actua com a suport. Per contra, la transferència d'àtoms d'oxygen des del suport de CeO₂ a les partícules de Pt requereix la presència de CeO₂ nanoestructurat per tal de ser favorable. Així, hem estat capaços de detallar el mecanisme de formació d'espècies Pt-O sobre ceria, que són catalíticament rellevants, a més de clarificar la dependència entre estructura i activitat dels catalitzadors basats en ceria.

6.3 Dinàmica de Reaccions en Superfície

A. Activitats dins la línia de recerca

Estudis DFT de les SEPs de processos elementals reactius amb N, O, N₂, O₂, CO,...sobre algunes superfícies sòlides (sílice, alumina, grafit, ZrB₂, SiC,..) base de materials ceràmics usats en la indústria aeroespacial. També desenvolupem alguns models microcinètics per modelar els sistemes formats, per exemple, per mesclades d'O/O₂ interaccionant sobre alguns sòlids (p.ex., b-cristobalita, grafit.), a diferents temperatures i pressions (total i parcials).

B. Pla de treball

S'ha fet un estudi 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 H/H₂/SiO₂. S'han determinat també les seves freqüències vibracionals harmòniques.

Hem desenvolupat un model microcinètic per als sistemes: O/O₂-graphite(0001) i O/O₂-b-cristobalita(001).

C. Objectius assolits

Els estudis DFT realitzats està permetent determinar els llocs d'adsorció més importants per a H sobre b-cristobalita i clarificar quins són els processos elementals més importants, cosa que ajudarà a construir les SEPs més rellevants per al posterior estudi dinàmic dels sistemes H/H₂/SiO₂.

El models microcinètics han permès veure la importància de les diferents etapes elementals a cada temperatura i per a diferents composicions i pressions totals de la mescla gasosa. També faciliten l'obtenció dels coeficients de recombinació atòmica ($g(T)$) i d'acomodació energètica ($b(T)$), que poden ser usats en posteriors simulacions de dinàmica de fluids (CFD) en la indústria aeroespacial.

6.4 Química de Superfícies

A. Activitats dins la línia de recerca

Dins d'aquesta línia d'investigació s'estudien reaccions químiques que tenen la particularitat de tenir lloc en la superfícies d'un sòlids. La idea fonamental es entendre a nivell molecular els mecanismes de la catàlisi heterogènia. Per dur a terme aquesta recerca s'empren diferents tipus de model de superfície. D'una banda models que representen superfícies ben definides i que permeten comparar els resultats calculats amb els d'experiments duts a terme en condicions d'ultra alt buit emprant superfícies de monocristalls. D'altra banda emprant superfícies

de nanopartícules, siguin aquestes aïllades o bé suportades en diferents substrats com òxids o carbur de metalls de transició. Dintre dels sistemes d'interès podem citar d'una banda el de nanopartícules de Pt suportades en oxid de ceri o nanopartícules de metalls de transició suportades en diferents carburs metel·lics. Recentment, s'ha incorporat a aquesta línia l'estudi de diferents sistemes d'interès en fotocatalisi com són els derivats de TiO_2 o de ZnO amb diferents estructures i diferents dopants el que requereix no només el coneixement de l'estat fonamental si no també el de la reactivitat en estats excitats. Les reaccions d'interès són relativament simples en quant al nombre d'àtoms implicats però molt importants des del punt de vista industrial i mediambiental com són l'activació de gasos d'efecte hivernacle com CO_2 i CH_4 per donar lloc a combustibles via hidrogenació del primer o per reacció amb H_2O del segon el que dona lloc a la producció d' H_2 que després cal purificar eliminant el CO via reacció de desplaçament d'aigua.

B. Pla de treball

Per a l'estudi dels mecanismes de reacció catalitzades pels diferents tipus de superfície descrits més amunt s'empren models, usualment periòdics dins l'aproximació supercel·la quan és necessari, que representen tan superfícies ben definides, usualment d'índexs de Miller baixos, com superfícies esglaonades, que permeten representar els llocs de baixa coordinació que sovint són presents en els catalitzadors reals, o com superfícies de nanopartícules que alhora presenten llocs de baixa coordinació i la possibilitat d'estudiar l'efecte de la grandària de la nanopartícula incloent si es necessari, i sovint ho és, l'efecte del suport. Un cop definit el model de superfície pel material i la reacció d'interès es procedeix a estudiar la superfície de potencial corresponent emergent de la estructura electrònica del sistema emprant usualment mètodes de la teoria del funcional de la densitat. Un punt crucial és la determinació de les estructures dels estats de transició el que porta al coneixement de les barreres energètiques corresponents i permeten, via teoria de l'estat de transició, obtenir una aproximació a les constants de velocitat. Finalment, és possible dur a terme un estudi de tipus microcinètic que permet fer prediccions sobre l'evolució temporal dels productes de la reacció i, eventualment, comparar amb valors experimentals provinents d'estudis catalítics en condicions de laboratori.

C. Objectius assolits

En un estudi combinat teoria i experiment en col·laboració amb el grup del Prof. Avelino Corma de l'Institut de Tecnologia Química de València s'ha estudiat l'efecte dels llocs de baixa coordinació en la oxidació selectiva d'alcohols en una sèrie de catalitzadors basats en Au suggereixen que l'activitat catalítica dels llocs actius correlaciona inversament amb el seu número de coordinació. Un altre estudi rellevant en el que també es combina teoria i experiment

mostra la potencialitat del TiC com a suport per a la destrucció de SO₂ i s'evidencia a més que nanopartícules de Cu suportades en aquest substrate son quasi tan actives com les d'Au la qual cosa obra la porta a catalitzadors de tipus Cu/TiC que des del punt de vista econòmic son sens dubte més atractius que el basats en Au. Altres estudis teòrics mostren precisament que Au/TiC es un catalitzador excel·lent per a la dissociació d'hidrogen molecular i, per tant, per possibles reaccions d'hidrogenació. Finalment destacar un estudi que mostra que la dissociació d'aigua en superfícies de metalls de transició que contenen terrasses, esglaons o llocs tipus cantonada plegada segueix una relació de tipus Broensted-Evans-Polanyi i que, a més, l'adsorció d'oxigen atòmic es un bon descriptor per aquesta reacció el que permet investigar un gran nombre de superfícies a un cost computacional molt inferior al que es requereix per a l'estudi complet de la reacció.

LÍNIA 7. PROPIETATS ELÈCTRIQUES I MAGNÈTIQUES DE MOLÈCULES, CLÚSTERS I SÒLIDS

7.1 Estructura dels Materials Moleculars

A. Activitats dins la línia de recerca

Estudi teòric de les interaccions intermoleculares en sòlids d'interès tecnològic. 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 magnetoestructurals per tal d'aconseguir un disseny controlat de materials magnètics amb les propietats desitjades.

B. Pla de treball

Mentre l'empaquetament cristal·lí de molècules neutres està, almenys qualitativament, entès, el de cristalls moleculars magnètics presenta dificultats que fan necessari el seu estudi qualitatiu i quantitatiu detallat. Així, no es coneix en detall la importància relativa del terme d'enllaç, (causat formalment pel solapament dels orbitals on es troben els electrons desaparellats) enfront dels altres termes energètics (intercanvi-repulsió, electrostàtic, inducció i dispersió). Ni quan aquesta interacció dóna lloc a la formació d'enllaços a llarga distància, el que fa diamagnètic al parell de radicals els orbitals es solapen. Això ens ha mogut a realitzar estudis detallats sobre els enllaços a llarga distància i la forma de controlar la seva aparició.

C. Objectius assolits

- S'ha demostrat que la naturalesa de les interaccions HALOGEN...HALOGEN no és purament dispersiva, com es creia.
- S'ha demostrat l'existència d'enllaços a llarga distància entre catió-radicals
- S'ha vist que les interaccions entre "phenyl embraces" és repulsiva, en contra de l'establert en la literatura
- S'ha demostrat l'existència de ponts d'hidrogen més forts que el límit covalent postulat fins ara.

7.2 Materials Fortament Correlacionats

A. Activitats dins la línia de recerca

En aquesta línia d'investigació s'estudia la relació entre l'estructura electrònica i les propietats òptiques i magnètiques de sistemes fortament correlacionats, ja siguin sòlids, clústers o sistemes moleculars. Entre els sistemes en estat sòlid, s'ha procedit a l'estudi de l'efecte del dopatge en cuprats derivats del material $\text{Ca}_{2-x}\text{Na}_x\text{CuO}_4$ fent servir un model estructural explícit per incloure els ions dopants que originen els superconductors d'alta temperatura crítica. Recentment aquesta línia s'interessa també en els nous superconductors basats en pnicturs tipus CaFe_2Se_2 , el precursor d'una nova família de pnicturs superconductors relacionats amb el sistema LaOFeAs estudiat prèviament. S'ha explorat la capacitat dels nous funcionals LC-wPBE i HSE amb separació de rang per a la correcció de bescanvi de Fock per descriure l'acoblament magnètic en sòlids i complexos dinuclears de Cu. També s'han dut a terme càlculs de sistemes moleculars fent servir la metodologia TD-DFT amb "spin flip" desenvolupada recentment per analitzar la seva capacitat per descriure l'acoblament magnètic. D'altra banda, s'estan estudiant materials moleculars amb propietats fotomagnètiques que contenen metalls de transició, com ara Fe(II) o Co(II), anomenats "spin crossover materials". Aquests sistemes poden actuar com a interruptors moleculars ja que es pot induir un canvi d'estat magnètic mediat per radiació electromagnètica.

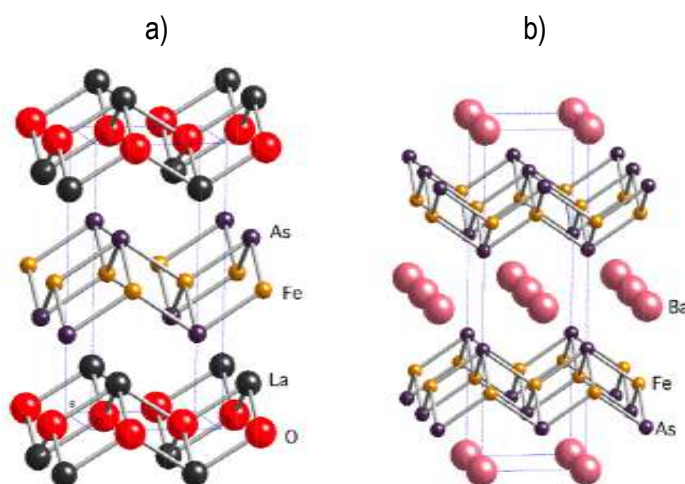
B. Pla de treball

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

així com l'aplicació de nous funcionals a l'estudi de sòlids i sistemes moleculars que presenten un acoblament ferromagnètic fort. D'altra banda, en l'estudi de les propietats fotomagnètiques és imprescindible la inclusió dels efectes relativistes deguts a la interacció espín-òrbita.

C. Objectius assolits

S'ha explorat la capacitat dels nous funcionals LC-wPBE i HSE amb separació de rang per a la correcció de bescanvi de Fock per descriure l'acoblament magnètic en sòlids i complexos dinuclears de Cu. També s'han dut a terme càlculs de sistemes moleculars fent servir la metodologia TD-DFT amb "spin flip" desenvolupada recentment per analitzar la seva capacitat per descriure l'acoblament magnètic. En particular, amb els funcionals de tipus LC-wPBE s'obté una descripció més acurada de les interaccions ferromagnètiques, habitualment mal descrites pels funcionals híbrids estàndard. A més a més, la metodologia TD-DFT amb "spin flip" proporciona una descripció alternativa l'aproximació de simetria trencada amb una millor descripció de la simetria d'espín. D'altra banda, s'ha realitzat un estudi de la estructura electrònica de CaFe_2As_2 compost precursor d'una nova família de pnicturs superconductors d'alta temperatura crítica. Aquest sistema mostra, pel que fa a la seva estructura electrònica, certes analogies amb el sistema LaOFeAs , tot i que amb un gap aïllant molt reduït.

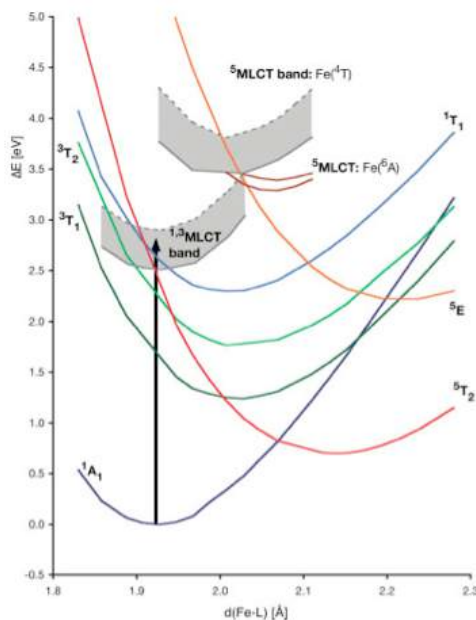


Estructures cristal·lines dels sistemes precursors dels pnicturs de ferro superconductors d'alta temperatura crítica: a) LaOFeAs , b) BaFe_2As_2 que presenta una estructura idèntica al sistema CaFe_2As_2 estudiat en aquest projecte.

Respecte a l'estudi de sistemes amb propietats fotomagnètiques s'han pogut determinar amb alta precisió els paràmetres claus que caracteritzen aquests sistemes per diversos compostos de Fe(II) que contenen diferents tipus de lligands: monodentats, bidentats i tridentats. Pel sistema $[\text{Fe}(\text{bpy})_3]^{2+}$ s'han pogut establir les superfícies d'energia potencial per l'estat fonamental i els estats electrònics excitats incloent els estats de transferència de càrrega del

metall al lligand (MLCT), que estan involucrats en el procés. Això ha permès explicar a nivell microscòpic el procés de bescanvi entre els dos estats electrònics biestables d'alt i baix espín.

S'ha establert una estratègia per tal d'estudiar la dinàmica del procés de desactivació que té lloc en aquest tipus de complexos. En aquests moments l'objectiu és determinar els temps de desactivació de cada etapa involucrada per tal de poder explicar el procés global.



Energies relatives (en eV) dels estats de menor energia derivats del desdoblament per camp cristal·lí dels orbitals Fe-3d⁶ i els estats ^{1,3,5}MLCT en funció de la distància Fe-Lligand en el sistema [Fe^{II}(bpy)₃]²⁺..

7.3 Estructura Electrònica i Simetria

A. Activitats dins la línia de recerca

Estructura electrònica, propietats de transport i magnetisme en sòlids En aquesta línia s'usen mètodes ab initio periòdics per calcular l'estructura electrònica de sòlids inorgànics i posteriorment 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 principalment interessats en els conductors orgànics de baixa dimensionalitat amb propietats elèctriques anòmales, mentre que en el camp de les propietats magnètiques els nostres esforços se centren en l'estudi l'acoblament magnètic en vanadats complexos.

B. Pla de treball

El treball realitzat en aquesta línia s'ha centrat en l'estudi de l'estructura electrònica mitjançant mètodes ab initio de conductors orgànics de baixa dimensionalitat per tal d'esbrinar l'efecte que tenen les distorsions en l'estructura cristal·lina induïdes per les transicions de fase en

les seves propietats elèctriques o magnètiques.

C. Objectius assolits

Durant aquest any la nostra atenció s'ha centrat en les propietats magnètiques dels cristalls de $(\text{tTTF})_2\text{X}$ ($\text{X}=\text{Br},\text{I}$) on tTTF és el trimetilè-tetrathiafulvalè. Les dades experimentals per a aquests dos compostos mostren que a baixa temperatura ambdues sals presenten un comportament antiferromagnètic amb unes temperatures de Neel al voltant dels 40 K. Els càlculs ab initio de l'estructura electrònica mitjançant mètodes DFT reproduïxen correctament les observacions experimentals i ens han permès determinar l'estructura magnètica de l'estat fonamental per a aquests dos compostos que coincideix amb la d'un ordenament antiferromagnètic entre capes de dímers alineats ferromagnèticament.

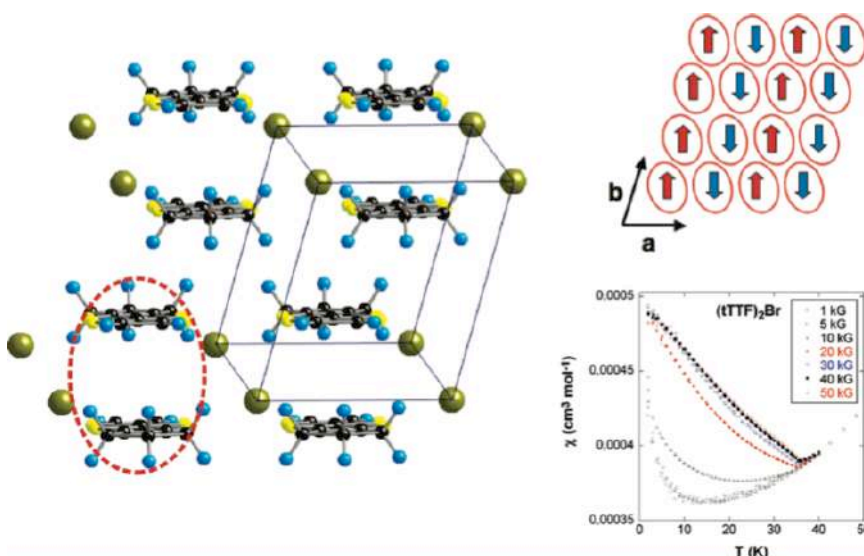


Figura 2 Estructura cristal·lina de les sals de cristalls de $(\text{tTTF})_2\text{Br}$ mostrant l'aparellament de les molècules de tTTF en dímers, l'estructura magnètica per a l'estat fonamental i les mesures experimentals de susceptibilitat magnètica per a aquest compost.

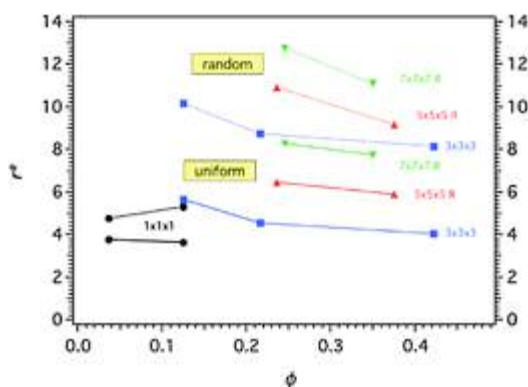
III.3 RESULTATS MÉS RELLEVANTS

En aquesta secció es descriuen els resultats més rellevants obtinguts per cada grup de l'IQTCUB organitzats per línies de recerca.

LÍNIA 1. MÈTODES TEÒRICS I ALGORISMES

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.
Phys. Chem. Chem. Phys., 13 (2011) 7396.



S'ha estudiat el procés de difusió en medis crowding a partir de simulacions Monte Carlo en sistemes tridimensionals amb diferent proporció d'obstacles. S'han determinat tres factors clau que afecten a la difusió: la mida relativa entre les partícules que difonen i els obstacles, la mobilitat relativa de les partícules i els obstacles i el tipus de distribució dels obstacles (atzar o uniforme). Els resultats s'interpreten en funció dels paràmetres que caracteritzen la dependència temporal del coeficient de difusió: l'exponent anòmal de difusió, el temps de entrecruament dels règims anòmal i normal, i el coeficient de difusió a temps llargs.

Concurrent Symmetries: The Interplay between Local and Global Molecular Symmetry.

J. Echeverría, A. Carreras, D. Casanova, P. Alemany, S. Alvarez
Chem. Eur. J., 17 (2011) 359.

En aquest treball s'analitza la coexistència en una mateixa estructura cristal·lina d'eixos concurrents amb simetries rotacionals de diferent ordre.

Variational Nature, Integration and Properties of Newton Reaction Path.

J. M. Bofill, W. Quapp.

J. Chem. Phys., 134 (2011) 074101.

El camí de Newton conegut també com a camí de la coordenada de reacció o camí del gradient reduït va ser deduït i analitzat d'acord amb la teoria del càlcul de variacions. De l'estudi variacional es conclou que si la corba de Newton està localitzada en una vall de la superfície d'energia potencial llavors aquesta corba és extremal i minimitza el valor de la integral variacional. En aquest cas es pot afirmar que la corba de Newton o camí de la coordenada de reacció és un camí de reacció amb caràcter de camí de mínima energia potencial. Finalmente y teniendo presente los resultados del análisis variacional, se concluye que la mejor forma de integrar esta curva es la basada en la técnica numérica conocida por el nombre de Runge-Kutta-Fehlberg.

LÍNIA 2. DINÀMICA I CINÈTICA DE REACCIONS, ESTATS EXCITATS I ESPECTROSCÒPIA

Recombination and chemical energy accommodation coefficients from chemical dynamics simulations: O/O₂ mixtures reacting over a β -cristobalite (001) surface

V. Morón, P. Gamallo, L. Martin-Gondre, C. Crespos, P. Larregaray i R. Sayós

Phys. Chem. Chem. Phys., 13 (2011) 17494.

En aquest treball hem desenvolupat un model microcinètic amb 10 etapes elementals per estudiar mesclades d'oxigen atòmic i molecular reaccionant amb una superfície de β -cristobalita (001). Per a això hem calculat constants de velocitat tèrmiques de cada procés a partir de càlculs de trajectòries quasiclàssiques amb superfícies d'energia potencial basades en dades DFT, usant també en alguns casos enfocats estadístics. Aquest mode microcinètic prediu una recobriments molecular gran a temperatures inferiors a 1000 K, mentre que prediu essencialment un recobriments atòmic a temperatures més altes. Els coeficients de recombinació atòmica impliquen principalment l'adsorció atòmica i la reacció de recombinació atòmica tipus Eley-Rideal. El seus valors són petits i augmenten en l'interval 700-1700 K ($0,01 < \gamma < 0,02$), en bon acord amb les dades experimentals. També s'ha pogut estimar el coeficient d'acomodació energètica, que presenta com a principal contribució la del procés d'adsorció atòmica, essent gairebé constant i diferent de la unitat ($0,75 < \beta < 0,80$).

Quasi-classical trajectory-Gaussian binning study of the $\text{OH} + \text{D}_2 \rightarrow \text{HOD}(v_1', v_2', v_3') + \text{D}$ angle-velocity and vibrational distributions at a collision energy of 0.28 eV

J. D. Sierra, L. Bonnet, M. González

J. Phys. Chem. A, 115 (2011) 7413.

La distribució angle-velocitat és una propietat clau en dinàmica de reaccions. En aquest cas, per a la reacció “benchmark” o de referència objecte d’estudi ($\text{OH} + \text{H}_2 \rightarrow \text{H}_2\text{O} + \text{H}$; $\Delta H^\circ_{298\text{K}} = -0.6509$ eV), es disposava de dades experimentals d’alta resolució per $\text{OH} + \text{D}_2$ que, durant un període de més de deu anys des de la publicació del treball experimental (Strazisar et al., *Science* 290, 958 (2000)), no ha estat possible descriure teòricament de forma adient. Aquesta fita ha estat aconseguida, finalment, en aquest treball. Tenint en compte el paper clau d’aquesta reacció en dinàmica de reaccions poliatòmiques, es valoren molt satisfactòriament els resultats assolits.

L’estudi s’ha dut a terme a una energia de col·lisió de 0.28 eV, utilitzant el mètode de trajectòries quasi-clàssiques (mètode QCT) i descrivint el sistema mitjançant la superfície d’energia potencial (SEP) analítica WSLFH, que es una de les tres SSEP “state-of-the-art” disponibles per aquest sistema, i dedicant especial atenció al problema de la pseudo-quantització de l’energia vibracional de l’HOD.

La comparació del resultats teòrics QCT amb els resultats experimentals de la bibliografia (experiments de feixos moleculars d’alta resolució) mostra que, a diferència del que succeeix quan s’utilitza el mètode estàndard de pseudo-quantització per determinar els nivells vibracionals de l’HOD produït (HB; mètode de histogrames habitual), quan s’empra el mètode de “binning” gaussià (GB) s’obté un molt bon acord teoria-experiment. I això passa tant pel que fa a la distribució angle-velocitat (Fig. 1) com per la distribució vibracional (Fig. 2). Essent força bo, d’altra banda, l’acord obtingut per la secció eficaç diferencial i la energia traslacional dels productes. Per tant, les fortes discrepàncies observades amb anterioritat entre teoria (QCT) i experiment provenen, principalment, d’una inadequada pseudo-quantització de l’HOD més que d’altres efectes quàntics. Aquesta és, probablement, la primera vegada que s’ha observat un alt nivell de concordança entre teoria i experiments d’alta resolució en dinàmica de reacció poliatòmiques.

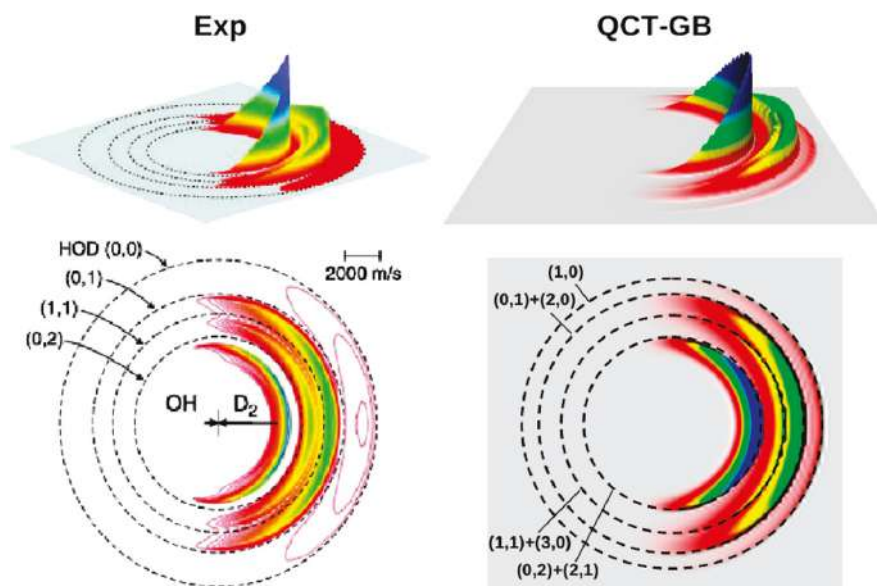


Figura 1. Distribució angle-velocitat (atom de D; unitats arbitràries) de la reacció OH + D₂ en l'espai de velocitats del centre de masses [superfícies 3D (part superior) i mapes de contorn del flux de producte (part inferior)]: Resultats experimentals (esquerra) i resultats QCT-GB amb la SEP WSLFH (dreta). Els cercles de traços representen la velocitat màxima dels àtoms de D pels estats vibracionals poblats de l'HOD. Només s'indiquen els estats amb els números quàntics vibracionals (v_2' (flexió), v_3' (tensió O-D)) degut a que v_1' (tensió O-H) és sempre zero.

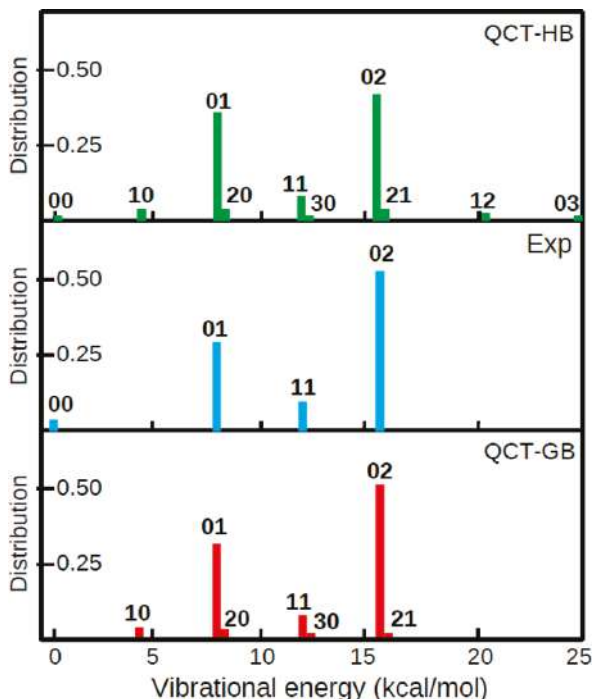


Figura 2. Poblacions vibracionals de la molècula HOD originades per la reacció OH + D₂: Experiment (centre), QCT-GB amb SEP WSLFH (baix), QCT-HB amb SEP WSLFH (dalt). Resultats normalitzats a la unitat tenint en compte tots els nivells vibracionals poblats.

Reactive processes in gas phase Na^+ -*iso*- $\text{C}_3\text{H}_7\text{Cl}$ collisions: experimental guided-ion-beam and *ab initio* studies of the reactions on the ground singlet potential surface of the system up to 12.00 eV

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

Phys. Chem. Chem. Phys., 13 (2011) 18581

En aquest treball s'ha obtingut per primera vegada la dependència amb l'energia de col·lisió de les seccions eficaces de reacció per als diferents canals de deshidrohalogenació (que porten a la formació de propè C_3H_6 i que es mostren a la Fig. 1) que ni tant sols havien estat caracteritzats en les col·lisions entre els reactius participants [J. Allison and D.P. Ridge, *J. Am. Chem. Soc.* 101, 4998 (1979)]. A la vegada s'ha caracteritzat també el canal de reacció que, adiabàticament, porta a la formació de NaCl neutre i el corresponent carbocatió C_3H_7^+ y a la seva posterior descomposició en C_2H_3^+ i metà. De forma paral·lela als experiments s'ha procedit a realitzar un estudi exhaustiu estructural *ab initio* a nivell MP2 de la superfície d'energia potencial (SEP) en la qual les diferents reaccions tenen lloc. Aquest estudi ha portat a poder interpretar els diferents comportaments observats en les dependències energètiques de les funcions d'excitació associades a la formació de C_3H_6 , i que indiquen que un dels canals està fortament condicionat pel camí de reacció a totes les energies de col·lisió mentre que per l'altre, s'obre un camí de reacció de no mínima energia que permet continuar formant el producte a energies elevades.

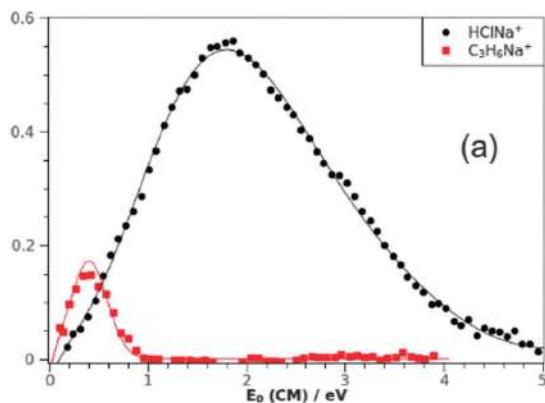


Figure 1

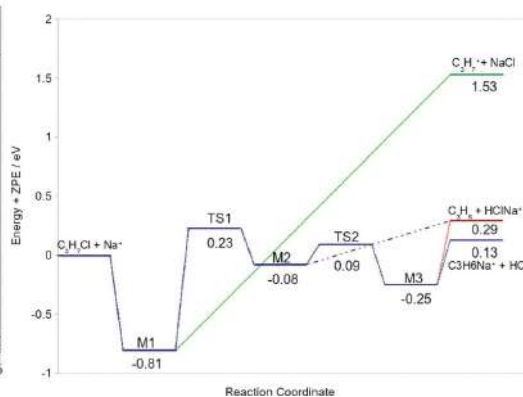


Figure 2

En l'actualitat s'estan duent a terme càlculs de trajectòries quasi clàssiques emprant la metodologia anomenada '*on the fly*' de la reacció Na^+ -*i*- $\text{C}_3\text{H}_7\text{Cl}$, considerant tots els àtoms participants i realitzant els càlculs pertinents dels punts de la SEP al llarg de la col·lisió. Donat que l'avaluació dels punts d'energia potencial durant la trajectòria comporta molt temps de càlcul fins i tot en grans computadors, l'estudi es realitza a nivell DFT el qual proporciona un perfil de reacció molt semblant tant a nivell qualitatiu com quantitatiu, de la SEP *ab initio*. Els resultats

parcials obtinguts, encara que de moment limitats, són força satisfactoris en quant a interpretar els diferents canals reactius caracteritzats experimentalment.

A molecular dynamics simulation of methane adsorption in single walled carbon nanotube bundles

S. Vela, F. Huarte-Larrañaga

Carbon, 49 (2011) 4544

En aquest treball s'estudia, des d'una perspectiva computacional, la fisorció de metà en agregats de nanotubs de carboni (SWCNT). Mitjançant simulacions de dinàmica molecular, s'analitzen diversos aspectes relacionats amb la possible aplicació dels nanotubs com a contenidors de gas combustible. Hem examinat la influència del diàmetre dels nanotubs en la capacitat d'adsorció dels materials i la distribució del adsorbato tenint en compte agregats de nanotubs amb diferents morfologies. S'observa un augment de la capacitat de càrrega amb el diàmetre dels nanotubs, juntament amb un canvi qualitatiu en la distribució de les molècules adsorbides. L'efecte de la porositat també s'estudia des del punt de vista de la separació dels nanotubs. També s'examina el paper de la temperatura com una possible variable per a controlar el procés de captació/alliberament.

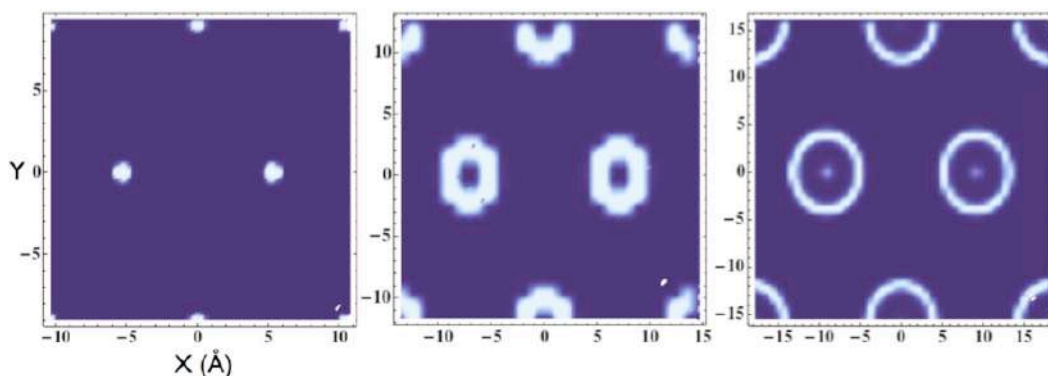


Figura. Fisorció de CH₄ en agregats de nanotubs de carboni. Mapa 2D de densitat per a la distribució de l'adsorbat dins la nanoestructura.

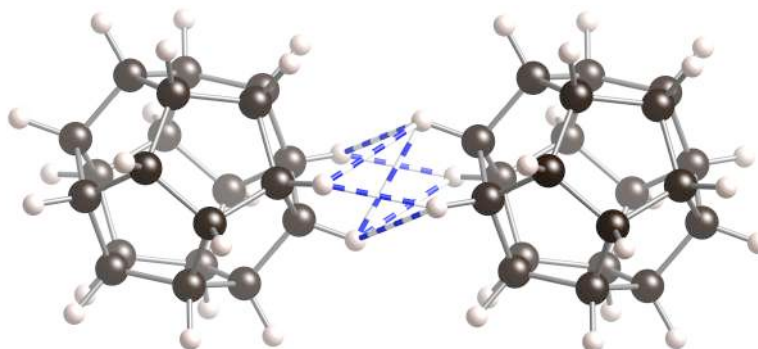
LÍNIA 3. ESTRUCTURA MOLECULAR I QUÍMICA QUÀNTICA

Dihydrogen Contacts in Alkanes and Polyhedranes are Subtle but not Faint

J. Echeverría, G. Aullón, D. Danovich, S. Shaik, S. Alvarez

Nat. Chem., 3 (2011) 323.

En el treball s'han estudiat els alcans polièdrics (o poliedrans), formats per àtoms de carboni que envolten àtoms d'hidrogen, per la capacitat que tenen de crear estructures cristal·lines estables amb temperatures de fusió de fins a 400 °C. En l'estudi s'ha trobat que els poliedrans compleixen diversos requisits químics perquè les interaccions de dihidrogen —en principi considerades febles— siguin més fortes del que els experts imaginaven, en particular, s'ha vist que el fet que l'àtom de carboni que sosté un hidrogen estigui connectat a un esquelet gran de més carbonis afavoreix molt aquesta interacció. S'han dut a terme un estudi computacional sistemàtic dels enllaços de dihidrogen homopolars ($\text{CH}\cdots\text{HC}$), que és com s'anomenen les forces que uneixen els poliedrans. D'una banda, s'ha trobat que, com més plana és la superfície del poliedrà, més fortes són les interaccions intermoleculares. D'altra banda, el fet que aquests poliedres siguin de tipus esfèric permet que puguin establir interaccions amb molècules veïnes en moltes direccions. La conjunció d'aquests factors explica la gran cohesió dels cristalls dels poliedrans, que tan sols a temperatures elevades perden l'ordre tridimensional per formar un líquid. Finalment, cal tenir en compte que aquest tipus d'interaccions són omnipresents en la química molecular de compostos orgànics, organometàl·lics o de coordinació i creiem que faran replantejar els estudis referents, per exemple, a les estabilitats relatives de diferents estructures cristal·lines d'un mateix compost. Aquest punt és important en el camp del disseny de compostos sintètics, especialment per a la indústria farmacèutica, perquè cada forma d'un mateix compost, anomenat polimorf, presenta diferents propietats farmacològiques, i pel fet que una patent tan sols cobreix un d'aquests polimorfs i això implica que el descobriment d'una nova forma és patentable.



LÍNIA 4. MATÈRIA TOVA, MACROMOLÈCULES, COL·LOIDES I MEMBRANES

Influence of chloroform in liquid-ordered and liquid-disordered phases in lipid membranes

R. Reigada

J. Phys. Chem. B, 115 (2011) 2527.

En aquest treball s'ha estudiat l'efecte del cloroform en membranes lipídiques amb diferents nivells d'ordre. S'ha comprovat que el cloroform té un efecte 'igualador' de les propietats estructurals de la membrana, és a dir, que fluïditzava les membranes més ordenades mentre que ordena a les més desordenades. Aquest efecte té una gran importància atès que moltes funcions cel·lulars tenen lloc en estructures diferenciades de la membrana (dominis ordenats/desordenats), i per tant el cloroform podria afectar a aquesta estructuració/compartimentació. En aquest sentit es llença la idea de que l'efecte anestèsic del cloroform pot tenir el seu origen en aquests efectes reportats en l'article.

Network-based confidence scoring system for genome-scale metabolic reconstructions

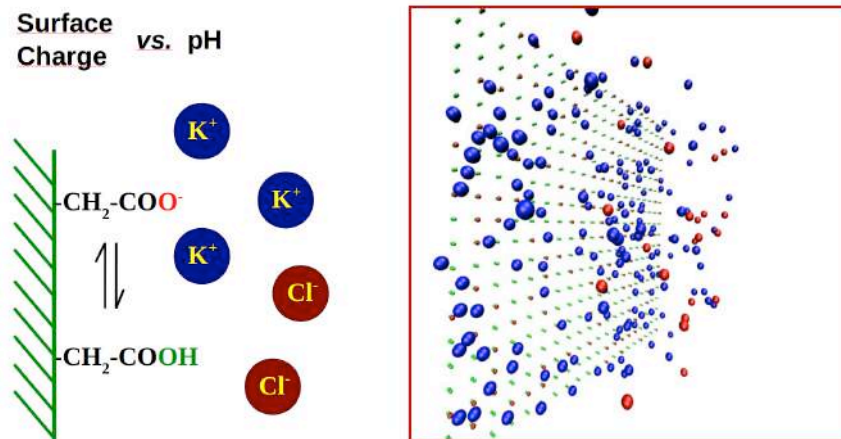
M. A. Serrano and F. Sagués

BMC Syst. Biol., 5 (2011) 76.

Certes reconstruccions experimentals del metabolisme de diferents organismes porten associat un sistema de qualificació que valora el grau d'evidència experimental associat a cada reacció metabòlica. En aquest treball proposem un sistema complementari basat en un model de xarxa complexa bipartida que explota l'existència de regularitats estadístiques. Com a il·lustració, apliquem aquest sistema de gradació de les reaccions del metabolisme al bacteri model *E. coli*. Ajustem el model a les observacions experimentals per tal de derivar probabilitats de connexió entre metabòlits i reaccions i, després de validar els resultats, computem la fiabilitat de cada reacció en termes probabilístics. D'aquesta forma descobrim reaccions que poden ser funcional o evolutivament importants i identifiquem noves dianes experimentals.

A semi-grand canonical Monte Carlo simulation model for ion binding to ionizable surfaces: Proton binding of carboxylated latex particles as a case study

S. Madurga, C. Rey-Castro, C. David, I. Pastor, J. L. Garcés, E. Vilaseca, J. Puy, F. Mas
J. Chem. Phys., 135 (2011) 184103.



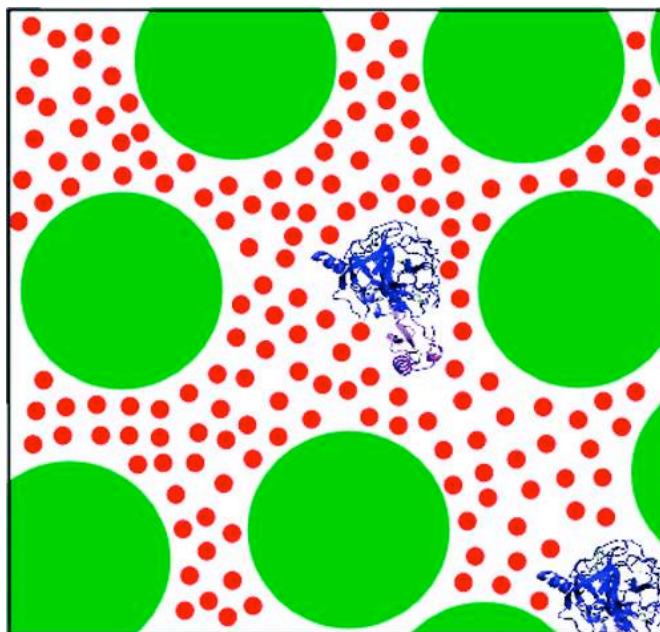
Es desenvolupa un programa de simulació Monte Carlo en el formalisme semi gran canònic per estudiar el procés de protonació d'una superfície funcionalitzada amb grups carboxílics d'una partícula de làtex. Els paràmetres de simulació s'han ajustat a partir de la comparació amb valoracions experimentals de partícules de làtex recobertes de grups carboxílics en presència de diferents entorns de força iònica generats per ions monovalents. Gràcies a les simulacions s'obté una descripció microscòpica de l'estructura de la doble capa electrica en funció del pH i de la força iònica.

LÍNIA 5. FÍSICOQUÍMICA DE BIOSISTEMES I DISSENY DE FÀRMACS

Effect of Crowding by Dextrans on the Hydrolysis of N-succinyl-L-phenyl-Ala-p-nitroanilide Catalyzed by alpha-Chymotrypsin upon Addition of Dextran with Different Concentrations and Sizes

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

J. Phys. Chem. B, 115 (2011) 1115.

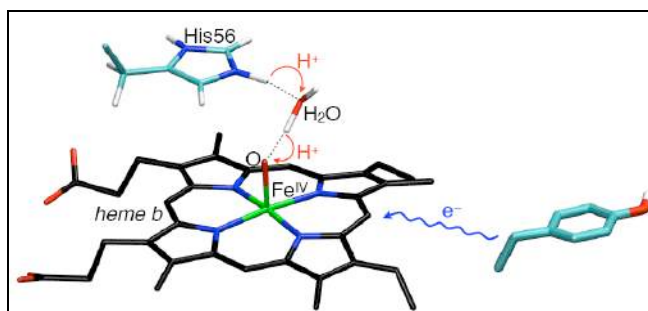


Tradicionalment, els estudis de les reaccions biològiques de macromolècules controlades per difusió s'han realitzat en condicions de dissolució diluïda (*in vitro*). En canvi, en el medi intracel·lular (*in vivo*), hi ha una alta concentració de macromolècules que interaccionen de forma no-específica (macromolecular crowding) afectant a la cinètica i a la termodinàmica de les reaccions que passen en aquests sistemes. En aquest treball estudiem l'efecte del crowding macromolecular en la reacció d'hidròlisis de N-succinyl-L-phenyl-Ala-p-nitroanilide catalitzada per l'alfa-quimiotripsina en medis crowded de Dextrans a partir d'experiments de FRAP.

Proton transfer drives protein radical formation in *Helicobacter pylori* catalase but not in *Penicillium vitale* catalase

M. Alfonso-Prieto, H. Oberhofer, M. L. Klein, C. Rovira, J. Blumberger

J. Amer. Chem. Soc., 133 (2011) 4285.



Els enzims hemo catalases protegeixen les cèl·lules del dany oxidatiu mitjançant la desproporcionació del peròxid d'hidrogen en aigua i oxigen molecular. En aquest treball hem investigat els factors que donen lloc a una reacció secundària que competeix amb la activitat catalasa de l'enzim. Es tracta de la migració d'un radical des del centre actiu (grup hemo) fins a la proteïna en el principal intermedi de la reacció, anomenat compost I (Cpd I). Mitjançant tècniques QM/MM i metadinàmica hem demostrat que la migració del radical en catalases d'algunes espècies (p. e. d'*Helicobacter pylori*) està afavorida energèticament degut a la subseqüent transferència de protó des del residu d'histidina distal fins a l'àtom d'oxigen del grup ferril. Aquests resultats ajudaran a dissenyar enzims amb una activitat catalasa més alta per a la detecció o eliminació de peròxid d'hidrogen.

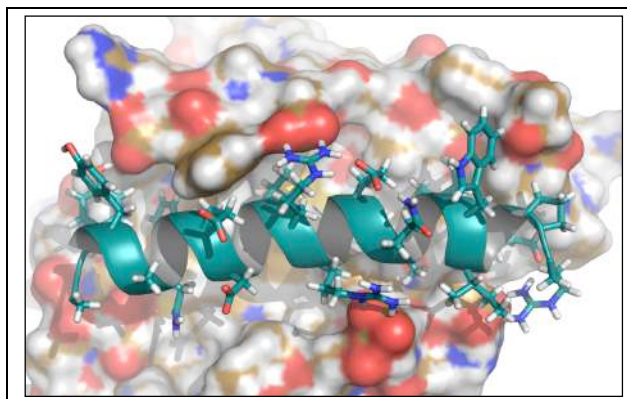
Rational design of new class of BH3-mimetics as inhibitors of the Bcl-xL protein

M. Pinto, M. Orzaez, L. Delgado-Soler, J. J. Pérez and J. Rubio-Martínez

J. Chem. Inf. Model., 51 (2011) 1249.

La sobreexpressió de diferents membres antiapoptòtics de la família de proteïnes Bcl-2 s'ha descrit en diferents tipus de càncers i s'ha relacionat amb una elevada resistència als tractaments amb quimioteràpia. Per tant, la inhibició de la seva funció protectora ha estat descrita com una bona possible teràpia anti-càncer. En aquest treball s'ha realitzat un *screening* virtual que ha permès el descobriment de noves molècules amb activitat inhibidora envers la proteïna Bcl-x_L utilitzant diferents bases de dades com ara la Available Chemicals Directory (ACD), National Cancer Institute database (NCI), Maybridge y la Derwent World Drug Database. El

screening virtual es va realitzar utilitzant un farmacòfor estret de l'estudi, mitjançant Dinàmica Molecular, de l'interacció de diferents pèptids de la regió BH3 d'alguns membres pro-apoptòtics de la família amb la proteïna Bcl-x_L. Aquesta metodologia ens va permetre identificar petites molècules que van demostrar la seva activitat farmacològica inhibint la funció anti-apoptòtica de la família de proteïnes Bcl-2.



La figura il·lustra el complex entre un pèptid pro-apoptòtic BH3Bim i la proteïna anti-apoptòtica Bcl-x_L.

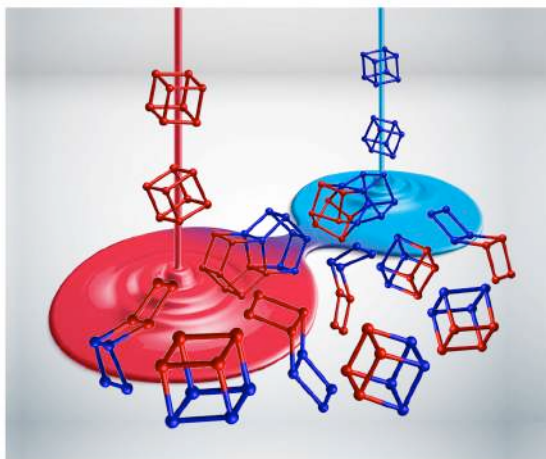
LÍNIA 6. NANOESTRUCTURES, SUPERFÍCIES, INTERFASES I CATÀLISIS

Evidence for Atomic Mixing via Multiple Intermediates during the Dynamic Interconversion of Silicate Oligomers in Solution

K. E. Jelfs, E. Flikkema and S. T. Bromley

Chem. Comm., DOI: 10.1039/C1CC14674B.

S'investiga l'estructura d'espècies de silicats de 8 i 16 àtoms de Si a partir de mètodes d'optimització global i càlculs *ab initio*. Això permet proposar un nou mecanisme per explicar i interpretar la observació experimental de mescla atòmic d'oligòmers en solució



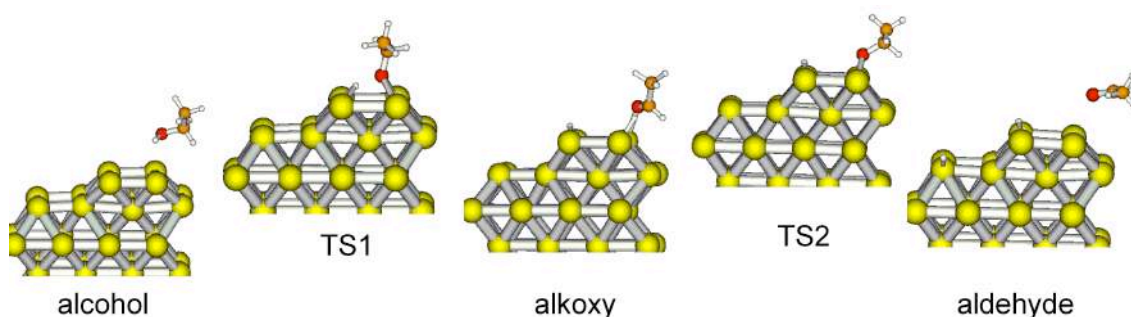
Imatge de portada de DOI: 10.1039/C1CC14674B.

Mechanism of selective alcohol oxidation to aldehydes on gold catalysts: influence of surface roughness on reactivity

M. Boronat, A. Corma, F. Illas, J. Radilla, T. Ródenas, M. J. Sabater

J. Catal., 278 (2011) 50.

Una combinació d'experiments en catalitzadors a base de nanopartícules d'Au i de càlculs en models teòrics permet establir una relació entre l'activitat catalítica d'aquestes sistemes front a la oxidació d'etanal i el nombre i tipus d'àtoms d'or segons la seva coordinació,



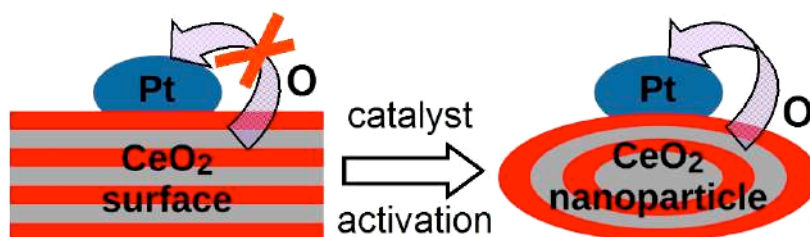
Support nanostructure boosts oxygen transfer to catalytically active platinum nanoparticles

G. N. Vayssilov, Y. Lykhach, A. Migani, T. Staudt, G. P. Petrova, N. Tsud, T. Skála, A. Bruix, F. Illas, K. C. Prince, V. Matolin, K. M. Neyman, J. Libuda,

Nat. Mat., 10 (2011) 310.

Catalitzadors formats per components nanoestructurats: els materials catalítics tenen la capacitat d'accelerar els processos químics. Aquests materials acostumen a estar formats per diferents components, sovint de dimensions reduïdes (escala nanomètrica), que interaccionen donant lloc a propietats úniques. Aquest és el cas dels catalitzadors formats per Pt i CeO₂, com s'ha demostrat en un estudi fruit de la col·laboració entre investigadors de l'IQTCUB, de la Universitat de Barcelona i de la Universitat Erlangen-Nürnberg, així com de grups de Sofia, Praga i Trieste. Aquest equip internacional d'investigadors ha estat capaç de generar sistemes que serveixen com a models d'aquests catalitzadors. La generació d'aquests models ha permès seu estudi mitjançant llum de sincrotró i mètodes teòrics basats en la mecànica quàntica. La combinació entre resultats experimentals i teòrics ha permès obtenir coneixement detallat sobre aquests materials complexos. Aquests catalitzadors estan formats per nanopartícules de ceria i

de Pt. S'ha trobat que és precisament el fet d'estar nanoestructurats el que dóna lloc a una activitat química especial. Quan aquestes nanopartícules estan en contacte es dóna un intercanvi d'àtoms d'oxigen altament reactius de manera que apareixen nous camins de reacció.



L'òxid de ceri en forma de nanopartícula, contràriament al cas de les superfícies esteses, proporciona àtoms d'oxigen que són prou mòbils com per activar el platí suportat sobre aquestes nanopartícules.

LÍNIA 7. PROPIETATS ELÈCTRIQUES I MAGNÈTIQUES DE MOLÈCULES, CLÚSTERS I SÒLIDS

Synthesis, crystal structure, transport properties and first-principles electronic structure study of the $(\text{tTTF})_2\text{X}$ ($\text{X} = \text{Br}, \text{I}$) low-dimensional antiferromagnets.

M. Fourmigué, E. W. Reinheimer, A. Assaf, O. Jeannin, A. Saad, P. Auban-Senzier, P. Alemany, A. Rodríguez-Forteza, E. Canadell
Inorg. Chem., 50 (2011) 4171.

S'ha estudiat mitjançant mètodes ab initio l'estructura electrònica de les sals $(\text{tTTF})_2\text{X}$ ($\text{X} = \text{Br}, \text{I}$). Coincidint amb les dades experimentals s'ha trobat un estat fonamental antiferromagnètic en capes per al qual es prediu una temperatura de Neel propera als 40 K.

Electronic structure of $\text{HgBa}_2\text{Ca}_{n-1}\text{Cu}_n\text{O}_{2n+2}$ ($n = 1, 2, 3$) superconductor parent compounds from periodic hybrid density functional theory

I. P. R. Moreira, P. Rivero and F. Illas
J. Chem. Phys., 134 (2011) 074709.

En aquest treball s'estudia la família de cuprats superconductors que donen lloc a les temperatures crítiques més altes observades. La utilització de funcionals híbrids i de models periòdics permet establir fermament que part de l'efecte observat es deu a la participació dels plans Hg-O el que fa aquests compostos diferents de la resta de cuprats on tota la física es redueix als plans Cu-O.

III.4 LLISTA DE PUBLICACIONS

A més de les publicacions corresponents a l'any 2011, en la present memòria també s'inclouen els treballs corresponents a l'any 2010 que, per motius d'agenda, no aparegueren en el recull de publicacions de l'IQTCUB d'aquell any.

ARTICLES PUBLICATS

1. *Network-based confidence scoring system for genome-scale metabolic reconstructions.*
M. A. Serrano and F. Sagués.
BMC Syst. Biol. 5 (2011) 76.
2. *A molecular dynamics simulation of methane adsorption in single walled carbon nanotube bundles.*
S. Vela, F. Huarte.
Carbon 49 (2011) 4544.
3. *Novel Au-TiC Catalysts for CO Oxidation and Desulfurization Processes.*
J. A. Rodriguez, P. Liu, Y. Takahashi, F. Viñes, L. Feria, E. Florez, K. Nakamura and F. Illas.
Catal. Today 166 (2011) 2.
4. *Negative differential resistance (NDR) in similar molecules with distinct redox behavior.*
N. Crivillers, M. Paradinas, M. Mas-Torrent, S. T. Bromley, C. Rovira, C. Ocal, J. Veciana.
Chem. Comm. 47 (2011) 4664.
5. *Substituent and counterion effects on the formation of p-dimer dications of end-capped heptathienoacenes*
C. Capel, M. C. Ruiz, V. Hernández, J. T. López, B. Vercelli, G. Zotti, M. Capdevila-Cortada, J. J. Novoa, W. Niu, M. Hed, F. Hartl.
Chem. Comm. 47 (2011) 12622.
6. *Design and preparation of co-crystals utilizing the R₄²(8) Hydrogen-Bonding Motif.*
J. J. Berstein, R. Boese, S. A. Cirkel, J. J. Novoa.
Chem. Eur. J. 16 (2010) 9047.
7. *Concurrent Symmetries: The Interplay between Local and Global Molecular Symmetry.*
J. Echeverría, A. Carreras, D. Casanova, P. Alemany, S. Alvarez.
Chem. Eur. J. 17 (2011) 359.
8. *The Use of a Bis(phenylpyrazolyl)pyridyl Ligand to Prepare [Mn₄] and [Mn₁₀] Cage Complexes.*
J. Sánchez-Costa, G. A. Craig, L. A. Barrios, O. Roubeau, E. Ruiz, S. Gómez-Coca, S. J. Teat, G. Aromí.
Chem. Eur. J. 17 (2011) 4960.
9. *A continuous symmetry analysis of chemical bonding.*
C. Dryzun, D. Casanova, P. Alemany, D. Avnir.
Chem. Eur. J. 17 (2011) 6129.

10. *A Molecular Pair of [GdNi₃] Tetrahedra Bridged by Water Molecules.*
A. Hosoi, Y. Yukawa, S. Igarashi, S. J. Teat, O. Roubeau, M. Evangelisti, E. Cremades, E. Ruiz, L. A. Barrios, G. Aromí.
Chem. Eur. J. 17 (2011) 8264.
11. *The Dilemma of Cr(III)Ni(II) Exchange Interactions: Ferromagnetism versus Antiferromagnetism.*
D. Aravena, E. Ruiz.
Chem. Eur. J. 17 (2011) 8841.
12. *Unusually Long, Multicenter, Cation^{δ+}...Anion^{δ-} Bonding Observed for Several Polymorphs of [TTF][TCNE].*
M. Capdevila-Cortada, J. J. Novoa, D. Bell, C. E. Moore, A. L. Rheingold, J. S. Miller.
Chem. Eur. J. 17 (2011) 9326.
13. *Design of Dinuclear Copper Species with Carboranylcarboxylate Ligands: Study of Their Steric and Electronic Effects.*
M. Fontanet, A.R. Popescu, X. Fontrodona, M. Rodriguez, I. Romero, F. Teixidor, C. Vinas, N. Aliaga-Alcalde, E. Ruiz.
Chem. Eur. J. 17 (2011) 13217.
14. *The role of the π linker donor in donor-π-acceptor organic dyes for high-performance sensitized solar cells.*
D. Casanova.
ChemPhysChem. 12 (2011) 2979.
15. *Theoretical study of the adsorption and dissociation of azobenzene on the rutile TiO₂(110) surface.*
J. P. Prates-Ramalho and F. Illas.
Chem. Phys. Lett. 501 (2011) 379.
16. *Bonding and vibrations of CH_x and CH_xO (x = 1-3) species on a Pd₇₉ nanoparticle representing model catalysts.*
S. M. Kozlov, G. F. Cabeza, K. M. Neyman.
Chem. Phys. Lett. 506 (2011) 92.
17. *Thermal behavior of Si-doped fullerenes vs their structural stability at T = 0 K: A density functional study.*
R. Scipioni, M. Matsubara, E. Ruiz, C. Massobrio, M. Boero.
Chem. Phys. Lett. 510 (2011) 14.
18. *Revisiting the foundations of symmetry operation measures for electronic wavefunctions.*
D. Casanova, P. Alemany.
Chem. Phys. Lett. 511 (2011) 486.
19. *Calculation of microscopic exchange interactions and modelling of macroscopic magnetic properties in molecule-based magnets.*
J. J. Novoa, M. Deumal, J. Jornet-Somoza.
Chem. Soc. Rev. 40 (2011) 3182.

20. *Human and rodent aldo-keto reductases from the AKR1B subfamily and their specificity with retinaldehyde*
F. X. Ruiz, A. Moro, O. Gallego, A. Ardèvol, C. Rovira, J. M. Petrash, X. Parés, J. Farrés
Chem. Biol. Interact. 19 (2011) 199.
21. *The Methylerythritol Phosphate (MEP) Pathway for Isoprenoid Biosynthesis as a Target for the Development of New Drugs Against Tuberculosis.*
C. Obiol-Pardo, J. Rubio-Martinez, S. Imperial.
Curr. Med. Chem. 18 (2011) 1325.
22. *Coordinating Ability of Anions and Solvents Towards Transition Metals and Lanthanides.*
R. Díaz-Torres, S. Alvarez.
Dalton Trans. 40 (2011) 10742.
23. *Monte Carlo simulation study of diffusion controlled reactions in three dimensional crowded media.*
L. Pitulice, E. Vilaseca, A. Isvoran, J.L. Garcés, F. Mas.
European Biophysics Journal with Biophysics Letters 8th EBSA European Biophysics Congress 40 (2011) 115.
24. *Computational chemistry-A useful tool in the fight against hepatitis C.*
M. González, A. Rodríguez, R. Martínez.
European Infectious Disease 5 (2010) 38.
25. *Ni-2,3-thiophenedithiolate Anions in New Architectures: An In-Line Mixed-Valence Ni Dithiolene (Ni4-S12) Cluster.*
A. I. S. Neves, I. C. Santos, L. C. J. Pereira, C. Rovira, E. Ruiz, D. Belo, M. Almeida.
Eur. J. Inorg. Chem. (2011) 4807.
26. *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.
27. *Mononuclear Fe(II) Single-Molecule Magnets: A Theoretical Approach.*
E. Cremades, E. Ruiz.
Inorg. Chem. 50 (2011) 4016.
28. *Synthesis, crystal structure, transport properties and first-principles electronic structure study of the (tTTF)₂X (X= Br, I) low-dimensional antiferromagnets.*
M. Fourmigué, E. W. Reinheimer, A. Assaf, O. Jeannin, A. Saad, P. Auban-Senzier, P. Alemany, A. Rodríguez-Forteza, E. Canadell.
Inorg. Chem. 50 (2011) 4171.
29. *Kinetico-Mechanistic Information about Alkene Hydroamination with Aniline in Bromide-Rich Ionic Media: Importance of Solvolysis.*
G. Aullon, K. Gomez, G. Gonzalez, S. Jansat, M. Martinez, R. Poli, M. Rodriguez-Zubiri.
Inorg. Chem. 50 (2011) 5628.

30. *Electronic Structure of the Two-Leg Spin-Ladder (C₅H₁₂N)₂CuBr₄.*
P. Alemany, A. Rodríguez-Fortea, E. Canadell.
Inorg. Chem., 50 (2011) 6399.
31. *Regioselective Orthopalladation of (Z)-2-Aryl-4-Arylidene-5(4H)-Oxazolones: Scope, Kinetic-Mechanistic, and Density Functional Theory Studies of the C-H Bond Activation.*
G. Roiban, E. Serrano, T. Soler, G. Aullon, I. Grosu, C. Cativiela, M. Martinez, E. P. Urriolabeitia.
Inorg. Chem. 50 (2011) 8132.
32. *S(T) = 22 [Mn10] Supertetrahedral Building-Block to Design Extended Magnetic Networks.*
G. Wu, J. Huang, L. L. Sun, J. Q. Bai, G. H. Li, E. Cremades, E. Ruiz, R. Clerac, S. L. Qiu.
Inorg. Chem. 50 (2011) 8580.
33. *A new series of triply-bridged dinuclear Cu(II) compounds: synthesis, crystal structure, magnetic properties and theoretical study.*
N. Wannarit, K. Siriwong, N. Chaichit, S. Youngme, R. Costa, I. de P. R. Moreira, F. Illas.
Inorg. Chem. 50 (2011) 10648.
34. *An ab Initio theoretical study approach to the gas phase decomposition of C₃H₇⁺ produced in ground state Li⁺ + iso-C₃H₇ collisions.*
J. M. Lucas, J. De Andrés, M. Albertí, J.M. Bofill, A. Aguilar
Int. J. Quantum Chem. 111 (2011) 493
35. *On the role of the metal-to-ligand charge transfer states in the light-induced spin crossover in [FeII(bpy)₃]²⁺.*
C. de Graaf and C. Sousa.
Int. J. Quantum Chem., 111 (2011) 3385.
36. *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. Amer. Chem. Soc. 132 (2010) 17817.
37. *Proton transfer drives protein radical formation in Helicobacter pylori catalase but not in Penicillium vitale catalase.*
M. Alfonso-Prieto, H. Oberhofer, M. L. Klein, C. Rovira, J. Blumberger.
J. Amer. Chem. Soc. 133 (2011) 4285.
38. *Tunneling versus Hopping in Mixed-Valence Oligo-p-phenylenevinylene Polychlorinated Bis(triphenylmethyl) Radical Anions.*
V. Lloveras, J. Vidal-Gancedo, M. T. Figueira-Duarte, J. F. Nierengarten, J. J. Novoa, F. Mota, N. Ventosa, C. Rovira, J. Veciana.
J. Amer. Chem. Soc. 133 (2011) 5818.
39. *Aβ₄₀ and Aβ₄₂ Amyloid Fibrils Exhibit Distinct Molecular Recycling Properties.*
L. Sánchez, S. Madurga, T. Pukala, M. Vilaseca, C. López-Iglesias, C.V. Robinson, E. Giralt, N. Carulla.
J. Amer. Chem. Soc. 133 (2011) 6505.

40. *Mechanism for singlet fission in pentacene and tetracene: from single exciton to two triplets.*
P. M. Zimmerman, F. Bell, D. Casanova, M. Head-Gordon.
J. Amer. Chem. Soc. 133 (2011) 19944.
41. *Mechanism of selective alcohol oxidation to aldehydes on gold catalysts: influence of surface roughness on reactivity.*
M. Boronat, A. Corma, F. Illas, J. Radilla, T. Ródenas, M. J. Sabater.
J. Catal. 278 (2011) 50.
42. *Interaction of SO₂ with Cu/TiC(001) and Au/TiC(001): Towards a new family of DeSO_x catalysts.*
L. Feria, J. A. Rodriguez, T. Jirsak, F. Illas.
J. Catal. 279 (2011) 352.
43. *Rational design of new class of BH₃-mimetics as inhibitors of the Bcl-xL protein.*
M. Pinto, M. Orzaez, L. Delgado, J. Pérez, J. Rubio.
J. Chem. Inf. Model. 51 (2011) 1249.
44. *The fate of optical excitations in small polyhedral ZnS clusters: a theoretical study on the excitation and localization of electrons in Zn₄S₄ and Zn₆S₆.*
M. Zwijnenburg, C. Sousa, F. Illas, S. T. Bromley.
J. Chem. Phys. 134 (2011) 064511.
45. *Variational Nature, Integration and Properties of Newton Reaction Path.*
J. M. Bofill, W. Quapp.
J. Chem. Phys. 134 (2011) 074101.
46. *Electronic structure of HgBa₂Ca_{n-1}Cu_nO_{2n+2} (n = 1, 2, 3) superconductor parent compounds from periodic hybrid density functional theory.*
I. de P.R. Moreira, P. Rivero and F. Illas.
J. Chem. Phys. 134 (2011) 074709.
47. *A semi-grand canonical Monte Carlo simulation model for ion binding to ionizable surfaces: Proton binding of carboxylated latex particles as a case study.*
S. Madurga, C. Rey-Castro, C. David, I. Pastor, J.L. Garcés, E. Vilaseca, J. Puy, F. Mas,
J. Chem. Phys. 135 (2011) 184102.
48. *Role of the axial Base in the modulation of the cob(I)alamin electronic properties: insight from QM/MM, DFT, and CASSCF calculations.*
N. Kumar, M. Alfonso-Prieto, C. Rovira, P. Lodowski, M. Jaworska, P.M. Kozlowski.
J. Chem. Theory and Comput. 7 (2011) 1541.
49. *Magnetic Coupling in Transition Metal Binuclear Complexes by Spin-Flip Time-Dependent Density Functional Theory.*
R. Valero, F. Illas, D. G. Truhlar.
J. Chem. Theory and Comput. 7 (2011) 3523.
50. *Replay to the Comment by Sheppard and Henkelman on the Nudged Elastic Band Method.*
W. Quapp, J.M. Bofill.
J. Comput. Chem. 32 (2011) 1772.

51. *Exchange Coupling Constants using Density Functional Theory: Long-Range Corrected Functionals.*
E. Ruiz.
J. Comput. Chem. 32 (2011) 1998.
52. *Structure direction in zinc oxide and related materials by cation substitution: an analogy with zeolites.*
M. A. Zwijnenburg, S. T. Bromley.
J. Mat. Chem. 21 (2011) 15255.
53. *Design of novel ligands of CDP-methylerythritol kinase by mimicking direct protein-protein and solvent-mediated interactions.*
V. Giménez, O. Villacañas, C. Obiol, M. Antolín, J. Rubio, S. Imperial.
J. Mol. Recognit. 24 (2011) 71.
54. *Features of Ar solvation shells in neutral and ionic clustering: The competitive role of two-body.*
M. Albertí, F. Pirani.
J. Phys. Chem. A. 115 (2011) 6394.
55. *Quasi-classical trajectory-Gaussian binning study of the OH + D2 → HOD(v1',v2',v3')+ D angle-velocity and vibrational distributions at a collision energy of 0.28 eV.*
J. D. Sierra, L. Bonnet, M. González.
J. Phys. Chem. A. 115 (2011) 7413.
56. *Ar solvation shells in K+-HFBz: From cluster rearrangement to solvation dynamics*
M. Albertí, N. Faginas Lago, F. Pirani
J. Phys. Chem. A. 115 (2011) 10871.
57. *Time dependent quantum dynamics study of the Ne + H2+ (v0=0-4, j0=1) → NeH+ + H proton transfer reaction, including the Coriolis coupling. A system with oscillatory cross sections.*
P. Gamallo, P. Defazio, M. González.
J. Phys. Chem. A. 115 (2011) 11525.
58. *Correction: 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.
J. Phys. Chem. B 114 (2010) 12182.
59. *Effect of Cowding by Dextrans on the Hidrolysis of N-succinyl-L-phenyl-Ala-p-nitroanilide Catalyzed by alpha-Chymotrypsin upon Addition of Dextran with Different Concentrations and Sizes.*
I. Pastor, E. Vilaseca, S. Madurga, J.L. Garcés, M. Cascante, F. Mas.
J. Phys. Chem. B 115 (2011) 1115.
60. *Influence of chloroform in liquid-ordered and liquid-disordered phases in lipid membranes.*
R. Reigada.
J. Phys. Chem. B 115 (2011) 2527.

61. *Relative stabilities of low index and stepped CeO₂ surfaces from hybrid and GGA+U implementations of density functional theory.*
M. M. Branda, R. M. Ferullo, M. Causà, F. Illas.
J. Phys. Chem. C 115 (2011) 3716.
62. *Formation of superoxide anions on ceria nanoparticles by interaction of molecular oxygen with Ce³⁺ sites.*
G. Preda, A. Migani, K.M. Neyman, S. T. Bromley, F. Illas, G. Pacchioni.
J. Phys. Chem. C 115 (2011) 5817.
63. *Reactivity of transition metals (Pd, Pt, Cu, Ag, Au) towards molecular hydrogen dissociation: extended surfaces versus particles supported on TiC(001) or small is not always better and large is not always bad.*
T. Gomez, E. Florez, J. A. Rodriguez and F. Illas.
J. Phys. Chem. C 115 (2011) 11666.
64. *Theoretical Investigation of the Hydrogenation of (TiO₂)_N Clusters (N=1-10).*
O. A. Syzgantseva, P. Gonzalez-Navarrete, M. Calatayud, S. T. Bromley, C. Minot.
J. Phys. Chem. C 115 (2011) 15890.
65. *Density functional modeling of the interactions of platinum clusters with CeO₂ nanoparticles of different size.*
G. N. Vayssilov, A. Migani, K. Neyman.
J. Phys. Chem. C 115 (2011) 16081.
66. *Theoretical study of the interaction of CO on TiC(001) and Au nanoparticles supported on TiC(001): probing the nature of the Au/TiC interface.*
G. G. Asara, L. Feria, E. Florez, J. M. Ricart, P. Liu, J. A. Rodriguez, F. Illas.
J. Phys. Chem. C 115 (2011) 22495.
67. *Reassignment of the vibrational spectra of carbonates, formates and related species on ceria by a combined computational and infrared spectroscopy investigation.*
G. N. Vayssilov, M. Mihaylov, P. St. Petkov, K. I. Hadjiivanov, K. M. Neyman.
J. Phys. Chem. C 115 (2011) 23435.
68. *Oxygen binding to catalase-peroxidase.*
P. Vidossich, X. Carpena, P. C. Loewen, I. Fita, C. Rovira.
J. Phys. Chem. Lett. 2 (2011) 196.
69. *A theoretical study of a ZnO graphene analogue: adsorption on Ag(111) and hydrogen transport.*
D. Stradi, I. Demiroglu, F. Illas, S. T. Bromley.
J. Phys. Condens Matter 23 (2011) 334215.
70. *The metallic transport of (TMTSF)₂X organic conductors close to the superconducting phase.*
P. Auban-Senzier, D. Jérôme, N. Doiron-Leyraud, S. René de Cotret, A. Sedeki, C. Bourbonnais, L. Taillefer, P. Alemany, E. Canadell, K. Bechgaard.
J. Phys. Condens Matter 23 (2011) 345702.

71. *Hydrogen and oxygen adsorption on a nanosilicate - a quantum chemical study.*
T. P. M. Goumans, S. T. Bromley.
Mon. Not. R. Astron. Soc. 414 (2011) 1285.
72. *Dihydrogen Contacts in Alkanes and Polyhedranes are Subtle but not Faint.*
J. Echeverría, G. Aullón, D. Danovich, S. Shaik, S. Alvarez.
Nat. Chem. 3 (2011) 323.
73. *Support Nanostructure Boosts Oxygen Transfer to Catalytically Active Platinum Nanoparticles.*
G. N. Vayssilov, Y. Lykhach, A. Migani, T. Staudt, G. P. Petrova, N. Tsud, T. Skála, A. Bruix, F. Illas, K. C. Prince, V. Matolín, K. M. Neyman, J. Libuda.
Nat. Mater. 10 (2011) 310.
74. *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. 13 (2011) 3421.
75. *Silver residues as a possible key to remarkable oxidative catalytic activity of nanoporous gold.*
L. V. Moskaleva, S. Röhe, A. Wittstock, V. Zielasek, T. Klüner, K. M. Neyman, M. Bäumer.
Phys. Chem. Chem. Phys. 13 (2011) 4529.
76. *On the dissociation of molecular hydrogen by Au supported on transition metal carbides: choice of the most active support.*
E. Florez, T. Gomez, J. A. Rodriguez, and F. Illas.
Phys. Chem. Chem. Phys. 13 (2011) 6865.
77. *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.
Phys. Chem. Chem. Phys. 13 (2011) 7396.
78. *A 3D-analysis of cluster formation and dynamics of the X- benzene (X = F, Cl, Br, I) ionic dimer solvated by Ar atoms.*
M. Albertí, F. Huarte, A. Aguilar, J. M. Lucas; F. Pirani.
Phys. Chem. Chem. Phys. 13 (2011) 8251.
79. *Quantum dynamics of Renner-Teller and isotopic effects in $NH(a^1\Delta)+D(^2S)$ reactions.*
P. Defazio, P. Gamallo, S. Akpınar i C. Petrongolo.
Phys. Chem. Chem. Phys. 13 (2011) 8470.
80. *Exploring the accuracy level of new potential energy surfaces for the F+HD reactions: from exact quantum rate constants to the state-to-state reaction dynamics.*
D. Fazio, J. M. Lucas, V. Aquilanti, S. Cavalli.
Phys. Chem. Chem. Phys. 13 (2011) 8571.

81. *The fate of optical excitations in small hydrated ZnS clusters: a theoretical study into the effect of hydration on the excitation and localization of electrons in Zn₄S₄ and Zn₆S₆.*
M. Zwijnenburg, F. Illas, S. T. Bromley.
Phys. Chem. Chem. Phys. 13 (2011) 9311.
82. *Effects of deposited Pt particles on the reducibility of CeO₂(111).*
A. Bruix, A. Migani, G. N. Vayssilov, K. M. Neyman, J. Libuda and F. Illas.
Phys. Chem. Chem. Phys. 13 (2011) 11384.
83. *Capture and dissociation in the complex-forming CH(v=0,1) + D₂ → CHD + D, CD₂ + H, CD + HD reactions and comparison with CH(v=0,1) + H₂.*
M. González, J. Mayneris-Perxachs, A. Saracibar, E. García.
Phys. Chem. Chem. Phys. 13 (2011) 13638.
84. *Cross-section energy dependence of the [C₆H₆-M]⁺ adduct formation between benzene molecules and alkali ions (M= Li, Na, K).*
E. López, J.M. Lucas, J. de Andrés, M. Albertí, J.M. Bofill, D. Bassi, A. Aguilar.
Phys. Chem. Chem. Phys. 13 (2011) 15977.
85. *Recombination and chemical energy accommodation coefficients from chemical dynamics simulations: O/O₂ mixtures reacting over a-cristobalite (001) surface.*
V. Morón, P. Gamallo, L. Martin-Gondre, C. Crespos, P. Larregaray, R. Sayós.
Phys. Chem. Chem. Phys. 13 (2011) 17494.
86. *Reactive processes in gas phase Na⁺-iso-C₃H₇Cl collisions: experimental guided-ion-beam and ab initio studies of the reactions on the ground singlet potential surface of the system up to 12.00 eV.*
J. Aguilar, J.M. Lucas, J. de Andrés, M. Albertí, D. Bassi, A. Aguilar.
Phys. Chem. Chem. Phys. 13 (2011) 18581.
87. *Structural richness of ionic binary materials: An exploration of the energy landscape of magnesium oxide.*
M. A. Zwijnenburg, S. T. Bromley.
Phys. Rev. B 83 (2011) 02104.
88. *Erratum: First-principles LDA+U and GGA+U study of cerium oxides: Dependence on the effective U parameter [Phys. Rev. B 75, 035115 (2007)]*
C. Loschen, J. Carrasco, K. M. Neyman, F. Illas.
Phys. Rev. B 84 (2011) 199906.
89. *Structural and optical bistability in ZnS single sheets and single-walled nanotubes.*
N. Krainara, J. Limtrakul, F. Illas, S.T. Bromley.
Phys. Rev. B 83 (2011) 233305.
90. *Percolation in Self-Similar Networks.*
M. A. Serrano, D. Krioukov, M. Boguñá.
Phys. Rev. Lett. 106 (2011) 048701.

91. *Reengineering specificity in 1,3-1,4- β -glucanase to accept branched xyloglucan substrates.*
T. Addington, B. Calisto, M. Alfonso-Prieto, C. Rovira, I. Fita, A. Planas.
Proteins 79 (2011) 365.
92. *Theoretical evaluation of the nature and strength of the F...F intermolecular interactions present in fluorinated hydrocarbons.*
J.R. Malave-Osuna, V. Fernandez, J. T. López-Navarrete, E. D'Oria, J. J. Novoa.
Theor. Chem. Acc. 128 (2011) 541.
93. *The Reaction between HO and (H₂O)_n, (n=1,3) clusters. Reaction Mechanisms and Tunnel Effects.*
J. González, M. Caballero, A. Aguilar, M. Torrent, R. Crehuet, A. Solé, X. Giménez, S. Olivella, J. M. Bofill, J. M. Anglada.
Theor. Chem. Acc. 128 (2011) 579.
94. *Origin of the size dependence of Au nanoparticles towards molecular oxygen dissociation.*
A. Roldán, J. M. Ricart, F. Illas.
Theoret. Chem. Acc. 128 (2011) 675.
95. *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. 128 (2011) 683.
96. *A 3D-analysis of the Cl-benzene dimer solvation by Ar atoms.*
F. Huarte, A. Aguilar. J. M. Lucas, M. Albertí.
Theor. Chem. Acc. 128 (2011) 757.
97. *Predicting binding energies of CDK6 inhibitors in the hit-to-lead process.*
L. Delgado, J. Ariñez, J. M. Granadino, J. Rubio.
Theor Chem Acc. 128 (2011) 807.
98. *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.
Theor. Chem. Acc. 128 (2011) 795.
99. *Exploration of Cyclopropyl Radical Ring Opening to Allyl Radical by Newton Trajectories: Importance of Valley-Ridge Inflection Points to Understand the Topography.*
W. Quapp, J.M. Bofill, A. Aguilar-Mogas.
Theor. Chem. Acc. 129 (2011) 803.

CAPÍTOLS DE LLIBRES I PROCEEDINGS

1. *Raft formation in cell membranes: speculations about mechanisms and models.*
R. Reigada, K. Lindenberg.
Advances in Planar Lipid Bilayers and Liposomes 14 (2011) 97 (Elsevier, Amsterdam)
2. *Structure and electroporation of lipid bilayers: a Molecular Dynamics study.*
R. Reigada, M. L. Fernandez.
Proceedings book of the URSI GASS XXXth Congress.
3. *Hydrogen confined in SWCNTs: Anisotropy effects on ro-vibrational quantum levels.*
J. Suárez, F. Huarte.
Proceedings of the 11th International Conference on Computational and Mathematical Methods in Science and Engineering, CMMSE 2011. Juny 2011.

III.5 ALTRES ACTIVITATS

TESIS DOCTORALS 2011

1. *Aplicació de la teoria del càlcul de variacions per a la resolució de problemes químics.*

Antoni Aguilar Mogas

Facultat de Química, Universitat de Barcelona.

Gener 2011.

2. *Optimització in silico de compostos antitumorals*

Laura Delgado Soler

Facultat de Química, Universitat de Barcelona.

Maig 2011.

3. *Theoretical and numerical study of nanoscale organization in the cell membrane.*

Jordi Gomez Llobregat

Facultat de Química, Universitat de Barcelona.

Setembre 2011.

4. *Atomic and molecular oxygen collision proceses over some crystalline solids.*

Víctor Morón Tejero

Facultat de Química, Universitat de Barcelona.

Novembre 2011.

MÀSTERS 2011

1. *Caracterització estructural i funcional d'enzims de la via del metileritritol fofat de biosíntesi d'isoprenoides per al disseny de nous antibiòtics i antimalàrics.*

Ferran Moratalla Navarro

Facultat de Biologia, Universitat de Barcelona.

Febrer 2011

2. *Thiol-protected gold clusters: Searching for the formation mechanism.*

Víctor Rojas

Universitat Politècnica de Catalunya.

Febrer 2011.

3. *Estudi teòric de gotes d'heli dopades amb oxigen atòmic.*

Arnau Vilà Casanovas

Facultat de Química, Universitat de Barcelona.

Setembre 2011.

4. *Theoretical study of the interaction of Pt atoms with ceria nanoparticles*

Jordi Toda Calderon

Facultat de Química, Universitat de Barcelona.

Setembre 2011

5. *Titanium carbide nanoparticles modeling: comparison between molecular mechanics and methods based on density functional theory.*

Oriol Lamiel Garcia

Facultat de Química, Universitat de Barcelona.

Setembre 2011

PARTICIPACIÓ A CONGRESSOS 2011 _____

Conferència dins de les celebracions de l'Any Internacional de la Química

Cerdanyola del Vallès, Pontevedra, Vilanova i la Geltrú (Espanya)

Química i música: l'estranya parella

S. Alvarez

Conferència dins de les celebracions de l'Any Internacional de la Química

Lisboa (Portugal)

Sacred Chambers: Laboratories through Books and Art,

S. Alvarez

CECAM Workshop on Theoretical Treatments of Molecular Magnetism

Toulouse (França)

Spin-state Controlled Trigonal Twist of Six-Coordinate Transition Metals,

S. Alvarez

Spin Crossover in Hofmann-type Clathrates: A Theoretical Approach

E. Ruiz

XXXIII Reunión Bienal de la RSEQ

València (Espanya)

Estancias sagradas: los laboratorios a través del arte y los libros,

S. Alvarez

VII Reunión Científica de Bioinorgánica

Murcia (Espanya)

Análisis de las Propiedades Electrónicas en Sistemas Polinucleares Fe-S y Fe-M-S (M = Mo, V)

B. Peigne, G. Aullón

CEA

Grenoble (França)

Étude Théorique de l'Anisotropie Magnétique en Systèmes Mononucléaires avec des Métaux de Transition

E. Ruiz

5th EuCheMS Conference on N-ligand

Granada (Espanya)

On the Coordination Modes of Dinitrogen to Transition Metals
B. Peigne, G. Aullón

European School of Molecular Nanociencia (ESMOLNA)

Castelló (Espanya)

A Chemist's View of Quantum Transport through Magnetic Molecules
E. Ruiz

European Conference of Molecular Magnetism

París (França)

Single-Ion Magnets based on 3d Metal Atoms: Analysis and New Candidates
E. Ruiz

Institut de Ciència Molecular, Universitat de València

València (Espanya)

Spin-state Controlled Trigonal Twist of Six-Coordinate Transition Metals
S. Alvarez

III Jornadas de Jovenes Investigadores en Física Atómica y Molecular

Santiago de Compostela (Espanya)

Analytical and interpolated potential energy surfaces for gas-surface reactions: Oxygen over graphite (0001) surface.
V. Morón, P. Gamallo, L. Martin-Gondre, P. Larregaray, C. Crespos i R. Sayós

Chemical Physics of Low Temperature Plasmas

Bari (Itàlia)

Kinetic model of surface catalycity for oxygen flows on β -cristobalite surface from first principles
P. Gamallo, V. Morón, C. Crespos, P. Larregaray i R. Sayós

New trends in Computational Chemistry for Industry Applications

Barcelona (Espanya)

First principles calculation of recombination and chemical energy accommodation coefficients for O/O₂ mixtures over β -cristobalite (100) surface
V. Morón, P. Gamallo, C. Crespos, P. Larregaray i R. Sayós

CH_xO and CH_x species (x = 1-3) on a palladium nanoparticle representing model catalysts.

S.M. Kozlov, G.F. Cabeza, K.M. Neyman

Effect of the metal-support interaction on Pt_x/CeO₂(111) systems

A. Bruix, F. Nazari, A. Migani, K.M. Neyman, F. Illas

Phase transition of CuFeS₂ from a trigonal to a tetragonal structure

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

1st Phys4Entry Review: Molecular Dynamics on Earth Atmosphere

Barcelona (Espanya)

DFT study of hydrogen/silica processes

R. Sayós i P. Gamallo

Theoretical Modeling of Materials (WATOC Satellite)

Barcelona (Espanya)

Kinetic and dynamic study of oxygen reactions over graphite

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

Exchange Coupling in Oxovanadium(IV) Compounds: A DFT + U Study.

S. Conejeros, P. Alemany, M. Llunell, E. Ruiz, E. Canadell.

CECAM workshop on Understanding Structure and Functions of Reducible Oxide Systems: A Challenge for Theory and Experiment

Zaragoza (Espanya)

Modeling ceria bulk, surfaces and nanoparticles from first principles

F. Illas.

Topographic and electronic properties of line defects in the CeO₂(111) surface

N. Nilius, J.-F. Jerratsch, M. Baron, S. Shaikhutdinov, H.-J. Freund, S. M. Kozlov, K.M. Neyman

What makes ceria nanoparticles much more reactive than extended structures.

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

Model structures of stripes on CeO₂ (111) surface

S.M. Kozlov, K.M. Neyman

Modelling the interactions of Pt species with ceria surface and their effects on ceria reducibility

A. Bruix, F. Nazari, A. Migani, K.M. Neyman, F. Illas

International Max Planck research school - Complex Surfaces in Materials Science

Rinberg Castle (Tegernsee, Alemanya)

First principles modeling of ceria from bulk to surfaces and nanoparticles

F. Illas.

XXXVII Congreso de Químicos Teóricos de Expresión Latina, Quito 2011.

Playa del Carmen (México)

Modeling and understanding structure and reactivity of ceria; from bulk to surfaces and nanoparticles

F. Illas.

Spectroscopy & Theory meeting

Veldhoven (Països Baixos) 2011

Theoretical studies of the LIESST phenomena in Fe²⁺ based spin crossover systems

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

Seminari invitat, Universitat de Erlangen-Nuremberg

Erlangen-Nuremberg (Alemanya)

Change the support and change the chemistry: metals on carbides

F. Illas.

Seminari invitat, Center for Nanotechnology, Kasetsart University

Bangkok (Tailàndia)

Towards ab initio understanding of ceria bulk, surfaces and nanoparticles

F. Illas.

Zernike Institute meeting in Advanced Materials

Vlieland (Països Baixos)

Intersystem crossing as a mechanisms of LIESST phenomenon in spin crossover systems

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

CFCAM-GSO workshop on "Density functional theory and wave function theory for molecular magnetism"

Toulouse (França)

Performance of post B3LYP hybrid functionals in describing magnetic coupling in molecules and solids

I. de P. R. Moreira.

**Workshop on “Strongly correlated systems, cooperativity, and valence-bond theory”
(satellite of the WATOC2011 conference)**

A Coruña (Espanya)

Valence tautomerism in $TiCl_4$ - α -alkoxyketone derived enolates: paradigmatic biradical intermediates for organic synthesis

I. de P. R. Moreira, J.M. Bofill, J.M. Anglada.

**Working Groups Meeting of the COST-MP0903 Action “Nanoalloys as Advanced Materials:
From Structure to Properties and Applications**

Limerick (Ireland)

Progress in density functional studies of Pd-Zn and Au-Ag nanostructures.

S.M. Kozlov, L.V. Moskaleva, M. Bäumer, K.M. Neyman

PdZn nanoalloys for methanol steam reforming: PM-IRAS, XPS and DFT studies

C. Weilach, H. Holzapfel, K. Föttinger, S.M. Kozlov, K.M. Neyman, G. Rupprechter

Surface science and technological catalysis on PdZn nanoalloys

C. Weilach, H. Holzapfel, K. Föttinger, S.M. Kozlov, K.M. Neyman, G. Rupprechter

Theoretical studies of CO adsorption on PdZn surface alloys and induced structural modifications of the substrate

S.M. Kozlov, K.M. Neyman

Surface structures of bimetallic nanoparticles supported on thin oxide films

L.V. Moskaleva, S. Röhe, A. Wittstock, V. Zielasek, T. Klüner, K.M. Neyman, M. Bäumer

Silver residues as a possible key to a remarkable oxidative catalytic activity of nanoporous gold

L.V. Moskaleva, S. Röhe, A. Wittstock, V. Zielasek, T. Klüner, K.M. Neyman, M. Bäumer

Ninth Triennial Congress of the World Association of Theoretical and Computational Chemists WATOC 2011

Santiago de Compostela (Espanya)

CH_xO and CH_x species ($x = 1-3$) on a palladium nanoparticle representing model catalysts.

S.M. Kozlov, G.F. Cabeza, K.M. Neyman

Computational modeling of carbonates on ceria nanoparticle.

G.N. Vayssilov, P.St. Petkov, A. Migani, K.M. Neyman

Study of the interaction of Pt_x species with oxidized and reduced CeO₂(111)

A. Bruix, F. Nazari, A. Migani, K.M. Neyman, F. Illas

Continuous symmetry measures: the behaviour of wavefunctions with respect to the irreducible representations of a symmetry group

P. Alemany, D. Casanova

Quantifying the Symmetry of Molecular Orbitals in Tetracoordinated Compounds

A. Falceto, D. Casanova, P.Alemany, S. Alvarez.

Thermal reactions induced by terahertz radiation

Caballero, M.; Vendrell, O.; Bofill, J. M.

*Ab-initio and direct dynamics of the *i*-C₃H₇Cl + Na⁺ reaction*

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

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.

Ion distribution around charged spherical colloids from molecular dynamics calculations with explicit water molecules

M. Nedyalkova, S. Pisov, F. Mas, E. Vilaseca, S. Madurga.

Satellite Meeting for the WATOC 2011 Congress “Theoretical modelling of materials

Barcelona (Espanya)

CH_xO and CH_x species (x = 1-3) on a palladium nanoparticle representing model catalysts.

S.M. Kozlov, G.F. Cabeza, K.M. Neyman

Frontiers in interface science - Theory and experiment

Berlin (Alemanya)

Towards more realistic models of nanostructures in catalysis described from first principles.

K.M. Neyman

2nd Symposium of the Institut de Química Teòrica i Computacional (IQTC-UB)

Barcelona (Espanya)

Theoretical studies of CO adsorption on PdZn surface alloys and induced structural modifications of the substrate

S.M. Kozlov, K.M. Neyman

What makes ceria nanoparticles much more reactive than extended structures

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

Computational study of organic dyes as sensitizers in solar cells: the p-bridge role.

D. Casanova

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.

Ion distribution around charged spherical colloids from molecular dynamics calculations with explicit water molecules

S. Madurga, M. Nedyalkova, S. Pisov, F. Mas, E. Vilaseca.

Danish-Spanish Workshop on Modelling of Inorganic Materials and Surfaces

Barcelona (Espanya)

Study of the interaction of Pt_x species with oxidized and reduced CeO₂(111)

A. Bruix

Polymorphism in ZnO: a comparison of 3D bulk and 2D nanoslabs

I. Demiroglu

Characterization of the electronic properties of F-doped TiO₂

S. Tosoni

Effect of CO adsorption on the structure of PdZn surface alloys on Pd(111)

S. M. Kozlov

Bandstructure engineering of graphene

F. Viñes

XXIVth International Symposium on Molecular Beams

Bordeaux (França)

Quasi-classical trajectory-Gaussian binning study of the OH + D₂ → HOD(v₁',v₂',v₃') + D angle-velocity and vibrational distributions at a collision energy of 0.28 eV

J. D. Sierra, L. Bonnet, M. González

QCT simulation of a CH + D₂ → CD + HD molecular beam experiment

E. García, M. González

Coupled channel time-dependent quantum dynamics study of the Ne + H₂⁺(v₀=0-4, j₀=1) → NeH⁺ + H proton transfer reaction

P. Gamallo, M. González

An experimental and theoretical study of the association reactions of some alkali ions and benzene molecules

E. López, J.M. Lucas, J. de Andrés, M. Albertí, J.M. Bofill, D. Bassi, A. Aguilar

International Conference on Molecular Energy Transfer (COMET)

Oxford (Regne Unit)

Quasi-classical trajectory-Gaussian binning study of the OH + D₂ → HOD(v₁',v₂',v₃') + D angle-velocity and vibrational distributions at a collision energy of 0.28 eV, and influence of vibrational excitation of reactants

J. D. Sierra, L. Bonnet, M. González

QCT study of the CH + D₂ reaction kinetics

E. García, M. González

Time-dependent quantum dynamics study of the $Ne + H_2^+(v_0=0-4, j_0=1) \rightarrow NeH^+ + H$ and $O + H_2^+(v_0=0, j_0=0,1) \rightarrow OH^+ + H, OH + H^+$ reactions

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

XIII Encuentro de Química Inorgánica de la Sociedad Chilena de Química

Temuco (Xile)

Estructura electrónica para la familia de compuestos con fórmula $ACuFeS_2$ (A=Metal alcalino)

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

Qchem Workshop

Santiago de Compostela (Espanya)

Spin flip extended single excitation configuration interaction: Computation of the ground and excited electronic states

D. Casanova

Excited States and Non-adiabatic Processes in Complex Systems. Theoretical Approches (WATOC 2011 satellite)

Sant Feliu de Guixols (Espanya)

A Computational Investigation of Organic Dye-Sensitized Solar Cells: the Cyclopentadithiophene linker.

C.Climent, D. Casanova

Triarylamine-based Dyes for Dye-Sensitized Solar Cells: A Computational Study.

D. Casanova

IV Jornades sobre l'Ensenyament de la Física i la Química

Barcelona (Espanya)

Si a classe de filosofia llegim a Plató, per què no llegim a Mendeléiev a classe de Química?

P. Alemany

XXVII Reunió de la Xarxa de Química Teòrica i Computacional

Tarragona (Espanya)

Estudi de l'estabilitat estructural de fases quaternàries $ACuFeS_2$ (A=Li, Na, K, Cs)

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

Reaction Channels of the $i\text{-C}_3\text{H}_7\text{Br} + \text{Li}^+$ reaction: experimental and theoretical study
E. López, J. Aguilar, J.M. Lucas, J. De Andrés, M. Albertí, F. Huarte and A. Aguilar

A molecular dynamics study of the monovalent and divalent ion distribution around a charged spherical colloid

S. Madurga, M. Nedyalkova, S. Pisov, F. Mas, E. Vilaseca.

**11th Iberian Joint Meeting on Atomic and Molecular Physics
(IBER2011)**

Coimbra (Portugal)

Experimental and theoretical dynamical study of the $i\text{-C}_3\text{H}_7\text{Cl} + \text{Li}^+$ reaction

E. López, J. Aguilar, J.M. Lucas, J. de Andrés, M. Albertí, F. Huarte and A. Aguilar

Similarities between the $\text{Cl-C}_6\text{H}_6$ and the $\text{K}^+\text{-C}_6\text{F}_6$ aggregates

M. Albertí, A. Aguilar, N. Faginas Lago and F. Pirani

12th Bratislava Symposium on Saccharides

Bratislava (Slovakia)

Substrate conformational changes in glycoside hydrolase catalysis. Insight from QM/MM molecular dynamics simulations

C. Rovira

**XXVI congreso nacional de la Sociedad Española de Nutrición Parenteral y Enteral
(SENPE)**

Girona (Espanya)

Mecanismos moleculares de la oxidación celular

C. Rovira

XVII Congreso de Física Estadística (FisEs)

Barcelona (Espanya)

First principles simulation of biomolecular processes

C. Rovira

Ion distribution around charged spherical colloids from molecular dynamics calculations with explicit water molecules

M. Nedyalkova, S. Pisov, F. Mas, E. Vilaseca, S. Madurga.

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.

11th International Conference on Computational and Mathematical Methods in Science and Engineering, CMMSE 2011

Alicante (Espanya)

Hydrogen confined in SWCNTs: Anisotropy effects on ro-vibrational quantum levels.
Jaime Suárez; Fermín Huarte-Larrañaga

International Meeting on Atomic and Molecular Physics and Chemistry, IMAMPC2011

Rennes (França)

State selected dynamics employing MCTDH.
Marc Moix; Jaime Suárez; Fermín Huarte-Larrañaga

Jornades Catalanes de Supercomputació, JOCS11

Barcelona (Espanya)

H₂ confined in CNTs: A full quantum 5D study.
Jaime Suárez; Fermín Huarte-Larrañaga

XI Congreso de la Sociedad de Biofísica de España (SBE)

Murcia (Espanya)

Diffusion in macromolecular crowded media. Monte Carlo simulation of obstructed diffusion vs. FRAP experiments
F. Mas, E. Vilaseca, I. Pastor, A. Isvoran, S. Madurga, J.L. Garcés.

II Macromolecular Crowding Workshop

Colorado (EUA)

Diffusion in macromolecular crowded media. Monte Carlo simulation vs. experimental results
I. Pastor, E. Vilaseca, L. Pitulice, S. Madurga, J.L. Garcés, A. Isvoran, M. Cascante, F. Mas.

4th Iberian meeting on Colloids and Interfaces (RICI)

Porto (Portugal)

Potentiometric and calorimetric determination of physicochemical parameters of ion binding to polyelectrolytes
C. Duarte, I. Pastor, D. Cucinotta, C. Rey-Castro, J.L. Garcés, F. Mas.

The effect of monovalent and divalent ions on the electrostatic properties of a charged spherical colloid. A molecular dynamics study with explicit water molecules
S. Madurga, M. Nedyalkova, S. Pisov, F. Mas, E. Vilaseca.

8th EBSA European Biophysics Congress II Macromolecular Crowding Workshop

Budapest (Hongria)

Monte Carlo simulation study of diffusion controlled reactions in three dimensional crowded media

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

URSI GASS 2011

Estambul (Turquia)

Poration of lipid bilayers: a Molecular Dynamics study

Ramon Reigada Sanz

Summer Solstice 2011. International Conference on Discrete Models of Complex Systems

Turku (Finland)

Uncovering the hidden geometry behind metabolic networks: from hierarchical random graphs to the S1 model

M. A. Serrano, M. Boguñá and F. Sagués

III Workshop MODELICO-CM, Modelización y Simulación de Sistemas Complejos

Madrid (Espanya)

Uncovering the hidden geometry behind complex networks: The S1 model

M. A. Serrano, D. Krioukov, M. Boguñá

First joint CRM-VHIR workshop on mathematical modelling and Biomedicine: Enabling collaboration between mathematics and biology

Barcelona (Espanya)

A complex networks approach to genome-scale metabolic reconstructions

M. A. Serrano, and F. Sagués

Encuentro IBERSINC: Red de Dinámica y Sincronización en Redes

Barcelona (Espanya)

Uncovering the hidden geometry behind complex networks: The S1 model

M. A. Serrano, M. Boguñá and F. Sagués

Engineering of Chemical Complexity International conference, Berlin Center for Studies of Complex Chemical Systems

Berlin (Alemanya)

Uncovering the hidden geometry behind metabolic networks

M. A. Serrano, M. Boguñá and F. Sagués

The XII International Congress on Molecular Systems Biology

Lleida (Espanya)

Uncovering the hidden geometry behind metabolic networks

M. A. Serrano, M. Boguñá and F. Sagués

ESTADES EN CENTRES DE PRESTIGI _____

- F. Illas **Kasetsart University, Bangkok (Thailandia)**
 Professor visitant invitat, Center of Nanotechnology. Agost 2011
- K. Neyman **Universität Erlangen-Nürnberg, Department of Chemistry and Pharmacy
 Erangen (Alemanya)**
 Investigador invitat, Friedrich-Alexander-, Graduate School Molecular
 Science, Cluster of Excellence "Engineering of Advanced Materials". Agost
 2011
- C. Sousa **Universitat de Groningen, Groningen, (Països Baixos)**
 Professor visitant, Zernike Institute for Advanced Materials. Agost 2011
- A. Bruix **Brookhaven National Laboratory, (USA)**
 Predoctoral Stay. Febrer-Abril 2011
- I. Demiroglu **University College London, (UK)**
 Predoctoral Stay. Setembre 2011
- P. Alemany **Universidad Católica del Norte, (Xile)**
 Propietats òptiques de fòsfors inorgànics. Agost 2011.
- D. Casanova **École Polytechnique Fédérale de Lausanne (EPFL), Lausanne (Suïssa)**
 Computational Study of Triarylamine Organic Dyes as Sensitizers in Solar
 Cells: the Role of the π -linker, Març 2011.
- M.Caballero **CFEL (Center for Free Electron Lasers) al DESY (Deutsches Elektronen-
 Synchrotron), Hamburg (Alemanya)**
 Interacció entre radiació i matèria al règim dels terahertz aplicat al sistema
 solvent-molècula. Febrer-Abril 2011.
- M. Albertí **Università degli Studi di Perugia, Perugia (Itàlia)**
 Formació de clatrats en presència de tensioactius. 2011 (4 mesos).

PARTICIPACIÓ EN PROJECTES D'INVESTIGACIÓ _____

Estructura electrónica y propiedades de moléculas y sólidos inorgánicos.

Eliseo Ruiz Sabin, Universitat de Barcelona

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

Dirección General de Investigación y Gestión del Plan nacional de I+D+I (MICINN)

Grup d'Estructura Electrònica.

Santiago Alvarez Reverte, Universitat de Barcelona

2009SGR-1459, 2010-2012

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

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

Ramón Sayós Ortega, Universitat de Barcelona

CTQ2009-07647, 2010-2013

Dirección General de Investigación y Gestión del Plan nacional de I+D+I (MICINN)

Planetary entry integrated models (Phys4Entry).

Ramón Sayós 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

2009SGR-1041, 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

Dirección General de Investigación y Gestión del Plan nacional de I+D+I (MICINN)

Controlling Selectivity via Nanostructuring of Multifunctional Model Catalysts.

Francesc Illas Riera, Universitat de Barcelona

CTQ2007-30547-E/BQU, 2008-2011

Dirección General de Investigación y Gestión del Plan nacional de I+D+I (MICINN)

Theoretical study of tunable photomagnetic compounds

Ria Broer, Universitat de Groningen i Universitat de Barcelona

08PR2650, 2009-2013

Modelling Electronic Processes in Nano Semiconductors: Clusters, Wires and Tubes

Stefan T. Bromley (UB) and R.C.A. Catlow (UCL)

A e-GAP2 Project, 2010-2012

Stefan T. Bromley is a member of The Chemical Cosmos: Understanding Chemistry in Astronomic Environments COST CM0805 Action (2010-2013).

Asessorament en projectes de fotocàtálisis

Francesc Illas i Riera

INAEL, 2011-2012

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 y Gestión del Plan nacional de I+D+I (MICINN)

Dinàmica de reaccions químiques.

Antonio Aguilar Navarro, Universitat de Barcelona

2005SGR-00017, 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

2009SGR-1308, 2009-2011

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

Dirección General de Investigación y Gestión del Plan nacional de I+D+I (MICINN)

Química Teòrica i Computacional.

Santiago Olivella Nel.lo, CSIC

2009SGR-1472, 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

Dirección General de Investigación y Gestión del Plan nacional de I+D+I (MICINN)

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

Dirección General de Investigación y Gestión del Plan nacional de I+D+I (MICINN)

Dinámica de procesos químicos mediante haces moleculares y métodos teóricos.

Antonio Aguilar Navarro, Universitat de Barcelona

CTQ2010-16709/BQU, 2011-2013

Dirección General de Investigación y Gestión del Plan nacional de I+D+I (MICINN)

Dinàmica de reaccions químiques.

Antonio Aguilar Navarro, Universitat de Barcelona

2009SGR-17, 2009-2013

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

Estudio de la formación y estabilidad de los hidratos de dióxido de carbono y de metano en presencia de aditivos orientadores de las moléculas de agua

Margarita Albertí Wirsing, Universitat de Barcelona

PR2010-0243, 01-02-2011 – 31-05-2011

Ministerio de Educación

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

Dirección General de Investigación y Gestión del Plan nacional de I+D+I (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 fisisorcion de gases en nanoestructuras.

Fermin Huarte Larrañaga, Universitat de Barcelona

CTQ2009-12215/BQU, 2010-2012

Dirección General de Investigación y Gestión del Plan nacional de I+D+I (MICINN)
Fisicoquímica de las interacciones de ligandos con polielectrolitos de interés ambiental y fisiológico.

Francesc Mas Pujadas, Universitat de Barcelona

CTM2009-14612-C02-02, 2009-2012

Dirección General de Investigación y Gestión del Plan nacional de I+D+I (MICINN)

Fisicoquímica de sistemas macromoleculares d'interès ambiental.

Jaume Puy Llorens, Universitat de Lleida

2009SGR-465, 2009-2013

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

Cellular structure, networks and motifs

Ramon Reigada Sanz

BFU2010-21847-C02-02, 2011-2013

Dirección General de Investigación y Gestión del Plan nacional de I+D+I (MICINN)

Self-Organized Complexity and Self-Assembling Materials.

Francesc Sagués, Universitat de Barcelona

2009SGR-1055, 2009-2013

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

Diseño de materiales moleculares con propiedades de interés tecnológico.

Juan J. Novoa, Universitat de Barcelona

MAT2008-02032/MAT, 2009-2011

Dirección General de Investigación y Gestión del Plan nacional de I+D+I (MICINN)

Grup d'Estructura de Materials Moleculars (GEM2).

Juan J. Novoa, Universitat de Barcelona

2009SGR-1203, 2009-2013

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

