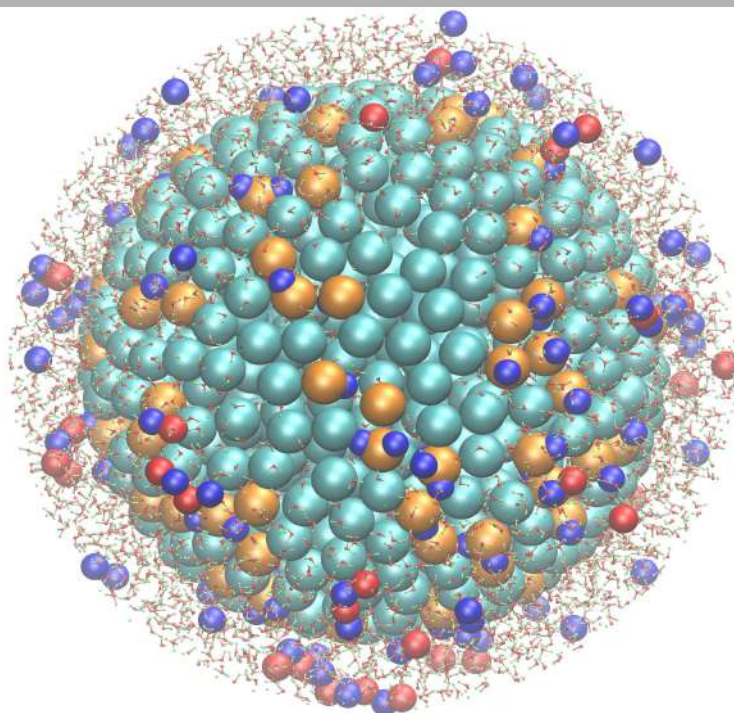


Institut de Química Teòrica i Computacional de la Universitat de Barcelona (IQTCUB)



Memòria d'activitats 2012



Es pot ben dir que durant 2012, l'Institut de Química Teòrica i Computacional de la Universitat de Barcelona (IQTCUB) s'ha consolidat en pràcticament tots els aspectes, científics i organitzatius. A finals de 2012 es començà una remodelació en l'organització de la recerca que ha de servir per integrar millor els diferents equips que hi treballen. L'IQTCUB va ser creat per decisió del Consell de Govern en sessió ordinària el dia 21 de novembre de

2007 i agrupa professors i investigadors de diferents departaments de les facultats de Química i Física 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 o la Física computacional. La recerca de l'IQTCUB, si bé es mou majoritàriament dins l'àmbit de la química, es distingeix doncs del que hom espera d'un químic tradicional, 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 per a poder fer prediccions comprovables experimentalment, interpretar resultats experimentals i, així, construir conceptes que permetin 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.

En els darrers anys i malgrat la situació econòmica difícil i complicada que estem patint arreu, no ens ha mancat el suport institucional de la Universitat de Barcelona a través del Vicerectorat de Recerca, suport que des d'aquí volem agrair especialment. Això ha permès mantenir i millorar una infraestructura de càlcul on els investigadors i professors de l'IQTCUB duen a terme una recerca competitiva i de qualitat. La memòria de recerca que es presenta a continuació recull ja la remodelació que hem comentat, mostra la vitalitat de l'IQTCUB, la considerable 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 i evidencia un impacte creixent de l'activitat científica de l'IQTCUB. Els propers anys esperem mostrar que el projecte mereix seguir tenint la confiança que ens dóna 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 Línies de recerca del IQTCUB	4
I.3 Membres de l'IQTCUB	5
I.4 Equip tècnic	8
I.5 Equipaments	8
II. ACTIVITATS DE L'IQTCUB.....	15
II.1 Activitats de tipus general	15
II.2 Seminaris i conferències de l'IQTCUB	18
II.3 Investigadors convidats per l'IQTCUB	20
III. ACTIVITAT CIENTÍFICA DELS MEMBRES DE L'IQTCUB.....	22
III.1 Resultats més rellevants	22
III.2 Llista de publicacions	37
Articles publicats	
Capítols de llibres i proceedings	
III.3 Altres activitats	50
Tesis doctorals	
Màsters oficials	
Estades en centres externs	
Participació en projectes d'investigació	

I. DESCRIPCIÓ DE L'IQTCUB

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

I.1 EQUIP DIRECTIU

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 LÍNIES DE RECERCA DEL IQTCUB

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

1. Desenvolupament de mètodes, algorismes i eines computacionals

Aquí ens centrem en les teories i algorismes dedicats a considerar la correlació electrònica, el moviment nuclear, les relacions estructura-activitat quàntiques, les mesures de simetria contínua, la modelització molecular, la teoria variacional de l'estat de transició i la ressonància magnètica. També es consideren aspectes com un desenvolupament més avançat del mètode Monte Carlo, i les dinàmiques molecular i Browniana.

2. Ciència dels materials computacional

En aquesta àrea de recerca utilitzem mètodes computacionals, abordant des de la química quàntica d'alt nivell d'exactitud i dinàmica molecular *ab initio* fins a mètodes de simulació clàssica, per investigar el *bulk*, la superfície i propietats d'escala nanomètrica d'una ampla diversitat de classes de materials sòlids, així com compostos inorgànics complexos, cristalls moleculars i catalitzadors heterogenis.

3. Bioquímica computacional i *soft matter*

Emprant la bateria de mètodes computacionals disponibles, des de mètodes basats en l'estructura electrònica fins a simulacions clàssiques, ens centrem en sistemes d'interès biològic. En particular investiguem l'estructura i la reactivitat de proteïnes i enzims, el disseny de fàrmacs, els processos en membranes cel·lulars, les reaccions enzimàtiques en medi congestionat i les nanopartícules *soft* en solució.

4. Reactivitat i dinàmica de reaccions

La recerca en aquesta àrea utilitza mètodes quàntics, clàssics i de mecànica estadística per tal d'analitzar la dinàmica de reaccions elementals, estats electrònics excitats i reaccions atmosfèriques i de combustió. També s'utilitzen mètodes continus per investigar reaccions de complexació molecular en medi aquós.

I.3 MEMBRES DE L'IQTCUB

L'IQTCUB està constituït per un total de 68 docents/investigadors. A continuació es mostra la llista completa de membres indicant la seva categoria acadèmica i el departament de la UB al qual pertanyen..

Cognoms	Nom	Departament/Unitat
Catedràtics		
Aguilar Navarro	Antonio	Química Física
Alemany 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
Paniagua Valle	Juan Carlos	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

Professors d'Investigació ICREA

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

Investigadors Postdoctorals*Juan de la Cierva*

Pastor del Campo	Isabel	Química Física
Viñes Solana	Francesc	Química Física

Ramón y Cajal

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

Altres

Aleksandrov	Hristiyan A.	Química Física
D'Oria	Emiliana	Química Física
Dos Santos Politi	Jose Roberto	Química Física
Morón Tejero	Victor	Química Física
Suarez Corujo	Jaime	Química Física
Tosoni	Sergio	Química Física

Investigadors Predoctorals*Beca FPI*

Aguilar Fargas	Javier	Química Física
Bruix Fusté	Albert	Química Física
Caballero Puig	Marc	Química Física
Carreras Conill	Abel	Química Física
Jurado Sáez	Manuel	Química Física
Vela Llausi	Sergi	Química Física

Beca FPU

Capdevila Cortada	Marçal	Química Física
Gómez Coca	Silvia	Química Inorgànica
Kozlov	Sergey M.	Química Física
Rojas Cervellera	Victor	Parc Científic

Beca UB

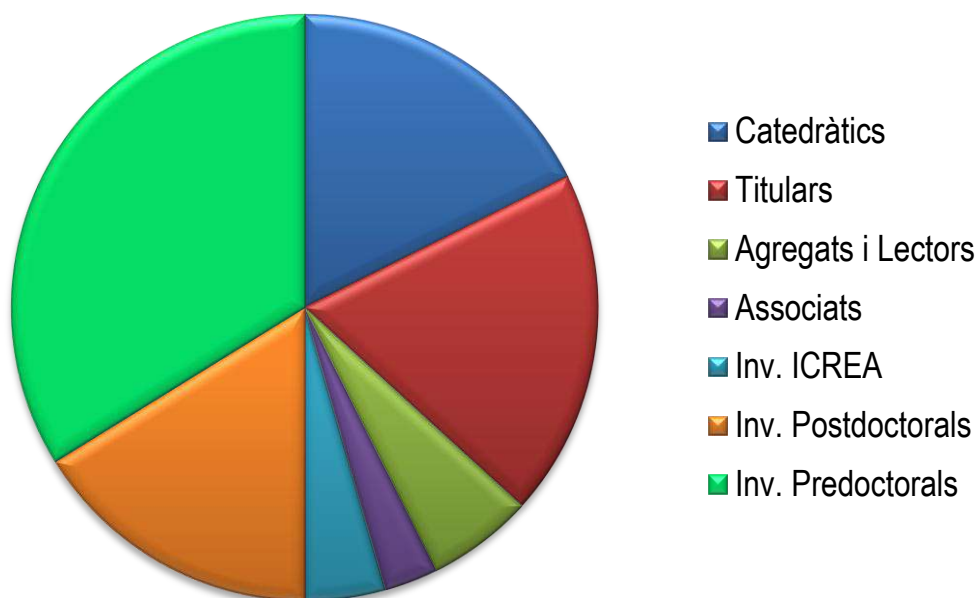
Fumanal Quintana	Maria	Química Física
------------------	-------	----------------

Beca FI

López Marne	Estefanía	Química Física
Vilà Casanovas	Arnau	Química Física

Altres

Aravena Ponce	Daniel	Química Inorgànica
Climent Biescas	Clàudia	Química Física
Conejeros Espíndola	Sergio	Química Física
Demiroglu	Ilker	Química Física
Falceto Palacín	Andrés	Química Inorgànica
Iglesias Fernández	Javier	Parc Científic
Lamiel Garcia	J. Oriol	Química Física
Maxwell	Lindley	Química Inorgànica
Moix Teixidor	Marc	Química Física
Reta Mañeru	Daniel	Química Física



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

I.4 EQUIP TÈCNIC

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

Jordi Inglés Camats	<i>Responsable de sistemes</i>
Raul Porcel Martínez	<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 44.000 i 66.000 frigories respectivament.

CLÚSTERS DE CÀLCUL

cerqt2 (valor aproximat 400.000 €)

<i>Tipus de màquina</i>	Clúster SUN (4 armaris).
<i>Sistema Operatiu</i>	Red Hat Enterprise Server 2.1 i en els nodes de 64 bits Suse 9.2.
<i>Serveis</i>	Clúster de càlcul i servidor de discos (raid amb màster fent un total de 2.5TB). Servidor DHCP intern.
<i>Estructura</i>	Màster + 111 nodes en clúster.
<i>Comentaris</i>	Accessible des del exterior. Conté tant processadors Xeon (32 bits) com Opterons (64 bits), això implica instal·lar aplicacions per 32 i 64 bits. Cada grup és propietari d'alguns nodes en concret. Conté una pantalla+teclat integrada a l'armari per gestionar totes les màquines.
<i>Especificacions</i>	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 Fire 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 Fire 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 Fire 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 Fire 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 DL145 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 DL160 G5
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 DL140 G3
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 DL160 G6
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

iqtc05 (valor aproximat 32.000 €)

Tipus de màquina Clúster SGI
Sistema Operatiu SLES11.
Serveis Clúster de càlcul.
Estructura 4 nodes en clúster
Comentaris Tots els processadors son de 64 bits

Especificacions:

4 nodes AMD SGI H2106-G7
 CPU: 4 Opteron 6276 16-core 2,3GHz
 RAM: 256GB
 HD: 2 discos de 1TB
 Xarxa: 2 targetes 100/1000 (xarxa interna)
 Xarxa d'administració IPMI

SERVIDORS

Servidor GPU (valor aproximat 1.500 €)

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 DELL 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 HP 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 2.300 €)

Tipus de màquina 2 màquines redundants HP ProLiant DL120 G5

Sistema Operatiu Debian stable

Serveis SGE Execution Host, Heartbeat, ssh server

Estructura 2 nodes redundants

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

Especificacions:

Node HP ProLiant DL120 G5

CPU: 1 Xeon Dual Core 2.33GHz.

RAM: 8GB.

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

Xarxa: 2 targetes 100/1000 xarxa interna.

Servidors de virtualització (valor aproximat 2.300 €)

Tipus de màquina 2 màquines redundants HP ProLiant DL120 G5

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 DL120 G**

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 3.000 €)*Tipus de màquina* 1 màquina HP ProLiant DL385*Sistema Operatiu* SLES10*Serveis* Màquina per utilització d'aplicacions gràfiques*Estructura* 1 màquina*Comentaris* Suportada per un SAI.*Especificacions***Màster HP ProLiant DL385**

CPU : 2 AMD Opteron 275 Dualcore a 2.2GHz

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 servei de xarxa a tot el conjunt dels serveis de l'IQTCUB.

- Màquina Backup DELL R515 (màquina de backup amb 4TB de disc i un SAI de suport).
- Màquina cintes HP MSL4048 (màquina 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 pública des de la xarxa del iqtub).
- 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, iqt01, iqt02, iqt03).
- 3 Switchs Layer 2 HP de 48 ports (xarxa interna clúster iqt04).
- 3 Switchs Infiniband Voltaire de 36 ports (xarxa càlcul iqt04).

- Switch modulable HP (8 mòduls per xarxa interna clúster iqt01,iqt02,iqt03).

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

RESUM DEL POTENCIAL DE CÀLCUL

Processadors.....2306 CPU's

Memòria.....7624 GB RAM

Discs de Càlcul..... 144.332 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

1.532.600 €*



El Sr. Jordi Inglés, responsable de sistemes de l'institut amb un dels clústers de càlcul intensiu de l'IQTCUB.

*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 2012.

- a. *3^a Jornada de l'IQTCUB*. El dia 23 de novembre del 2012 tingué lloc la tercera edició d'aquesta Jornada de divulgació científica. En aquesta jornada els membres de l'IQTCUB i altres conferencians de reconegut prestigi internacional exposaren els seus treballs més recents. En l'edició d'enguany destacà la participació dels professors Ignasi Nebot de la Universitat de València així com els doctors Ricard Gelabert de la Universitat Autònoma de Barcelona i Lluís Blancafort de la Universitat de Girona. Les despeses totals de la Jornada es corresponen al cost de les estades dels Prof. Nebot i Dr. Blancafort i al servei de càterring per als assistents.

Despesa pressupostada: 900 €

- b. *Promoció i incentivació a la recerca*. L'IQTCUB ha concedit un total de tres *Ajuts d'iniciació a la recerca* consistents en beques personals per valor de 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 Clàudia Climent Biescas i als senyors Manel Mondelo Martell i Luís Adrián Raich Armendáriz.

Despesa associada: 5.400 €

- 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'any 2012 se n'ha celebrat la segona edició amb un gran èxit de participació, rebent prop de 40 sol·licituds d'inscripció. En l'edició d'enguany, celebrada del 25 al 29 de juny hi participaren 24 alumnes. L'IQTCUB ha destinat un total de 295 € a despeses de càterring durant la realització del curs.



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

- d. *Curs Avançat de Química Computacional*. Donat l'èxit de l'edició 2011 del *Curs d'Introducció a la Química Computacional* i la gran satisfacció mostrada pels alumnes participants, aquest any l'Institut ha endegat un nou curs avançat amb l'objectiu d'ampliar els coneixements d'informàtica aplicada a la química computacional adquirits prèviament. El curs s'ha celebrat del 2 al 6 de juliol i ha estat adreçat principalment als alumnes que van cursar el curs d'introducció a la Química Computacional en l'edició de 2011. L'IQTCUB ha destinat un total de 295 € a despeses de càtering durant la realització del curs.



Imatges realitzades durant la realització del *Curs Avançat de 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 2012 i fins a la data, l'IQTCUB ha organitzat un total de deu seminaris i/o conferències.

- 1. Prof. Juan Carlos Paniagua** (Universitat de Barcelona) Espanya
Quantum theory: so true, so astonishing (1st part).
21 de Març de 2012
- 2. Prof. Juan Carlos Paniagua** (Universitat de Barcelona) Espanya
Quantum theory: so true, so astonishing (2nd part).
28 de Març de 2012
- 3. Prof. Graeme Watson** (Trinity College Dublin) Irlanda
Solid State Modelling: from Catalysis to Semiconductors
11 de Abril de 2012
- 4. Prof. Juan Carlos Paniagua** (Universitat de Barcelona) Espanya
Quantum theory: so true, so astonishing (3rd part).
2 de Maig de 2012
- 5. Prof. Richard Catlow** (University College London) Regne Unit
Computational Studies of Catalytic and Energy Materials
17 de Maig de 2012
- 6. Prof. Carlo Petrongolo** (University of Siena) Itàlia
Nonadiabatic Quantum Dynamics of Atom + Diatom Collisions
20 de Maig de 2012

- 7. Prof. Fernando Martin** (Universidad Autónoma de Madrid) Espanya
XUV/X-ray femto- and attosecond laser pulses for ultrafast electronic control in chemistry: towards attochemistry? And a new surface chemistry?
6 de Juny de 2012

- 8. Prof. Juan Carlos Paniagua** (Universitat de Barcelona) Espanya
Quantum theory: so true, so astonishing (4th part).
5 de Juliol de 2012

- 9. Prof. Vladimir Matolin** (Charles University in Prague) República Txeca
Angle resolved resonance photoelectron spectroscopy: new tool of band mapping
9 de Juliol de 2012

- 10. Prof. Marcel Swart** (Universitat de Girona) Espanya
Chemical reactivity of Endohedral Fullerenes
17 de Octubre de 2012

II.3 INVESTIGADORS CONVIDATS PER L'IQTCUB

Durant el 2012 el IQTCUB ha acollit un total de setze visites temporals d'investigadors externs.

- 1. Prof. Andrey Belyaev** (visitant convidat)
Herzen University, St. Peterburg, Rússia
Febrer-Març 2012
- 2. Darwin Burgos Carrasco** (visitant convidat)
Universitat de Xile, Xile
Febrer-Juny 2012
- 3. Miroslava Nedyalkova** (visitant HPCE)
University of Sofia, Bulgaria
Abril-Juliol 2012
- 4. Zamaan Raza** (visitant HPCE)
University College London, Regne Unit
Juny-Juliol 2012
- 5. Dr. Laura Pitulice** (visitant convidada)
University West Timisoara, Romania
Juny-Setembre 2012
- 6. Paul C. Jennings** (visitant HPCE)
Universitat de Birmingham, Regne Unit
Juliol-Setembre 2012
- 7. Bouthaina Kerkeni** (visitant convidada)
Observatoire de Meudon, Paris, França
Juliol-Agost 2012
- 8. Sr. Patanachai Janthon** (visitant convidat)
Kasetsart University, Bangkok, Tailàndia

Juliol-Desembre 2012

9. **Prof. Alexis Markovits** (visitant HPCE)
Université Pierre et Marie Curie, Paris, França
Juliol-Setembre 2012

10. **Prof. Silvia González** (visitant convidada)
Universidad Particular de Loja, Loja, Equador
Agost-Setembre 2012

11. **Dr. Stoyan Pisov** (visitant HPCE)
University of Sofia, Bulgaria
Setembre 2012

12. **John Buckeridge** (visitant HPCE)
University College London, Regne Unit
Octubre 2012

13. **Dave Gobrecht** (visitant HPCE)
University of Basel, Suïssa
Octubre-Novembre 2012

14. **Dr. Elizabeth Florez** (visitant convidada)
Universidad de Medellín, Colòmbia
Novembre 2012

15. **Maximiliano Porrini** (visitant HPCE)
Edinburgh University, Regne Unit
Novembre 2012

16. **Dr. Noelia Faginas Lago** (visitant convidada)
Università di Perugia, Itàlia
Novembre 2012

III. ACTIVITAT CIENTÍFICA DELS MEMBRES DE L'IQTCUB

III.1 RESULTATS MÉS RELLEVANTS

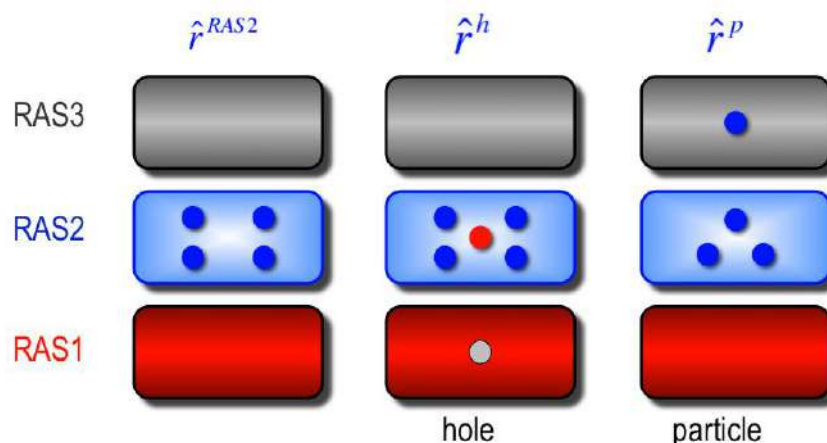
En aquesta secció es descriuen alguns dels resultats més rellevants obtinguts per cada línia de recerca de l'IQTCUB.

LÍNIA 1. DESENVOLUPAMENT DE MÈTODES, ALGORITMES I EINES COMPUTACIONALS

Avoided crossings, conical intersections, and low-lying excited states with a single reference method: The restricted active space spin-flip configuration interaction approach.

D. Casanova.

J. Chem. Phys., 137 (2012) 084105.



Representació esquemàtica de la funció d'ona RASCI-SF amb un forat a RAS1 i un electró a RAS3.

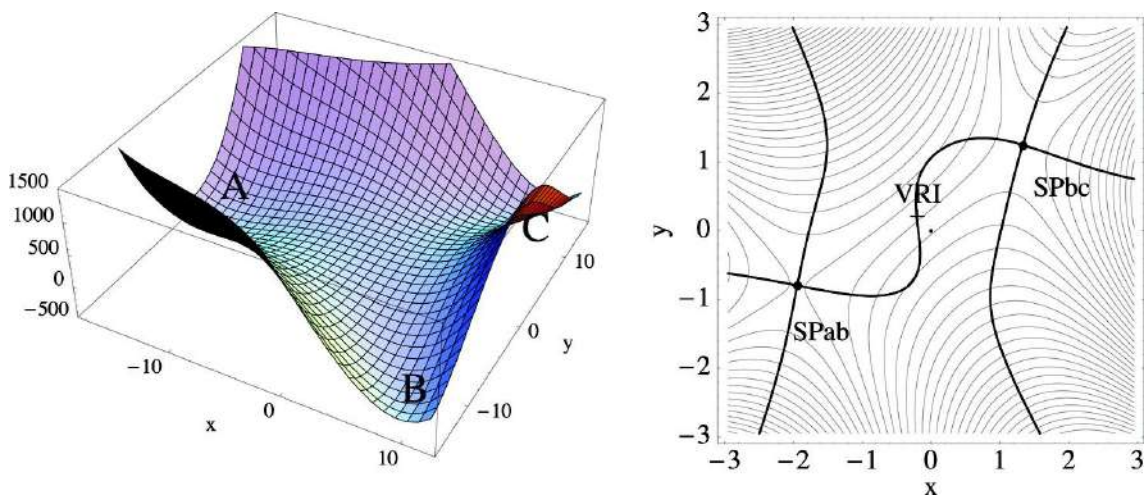
S'ha demostrat el bon rendiment del mètode “*restricted active space spin-flip*” CI (RASCI-SF) en el càlcul de l'estructura electrònica molecular de l'estat fonamental i d'estats excitats en presència de degeneracions. En aquest treball s'ha vist que aquest model és capaç de reproduir i caracteritzar de forma adequada el creuament evitat entre els estats singlets iònic i neutre de LiF al llarg de la dissociació molecular. Per aquest cas s'han calculat les PES adiabàtiques i diabàtiques dels dos estats, els seus moments dipolars, així com els orbitals naturals i la seva ocupació. El mètode RASCI-SF també s'ha aplicat a l'estudi del creuament dels estats fonamental i excitat singlet involucrats en la isomerització del doble enllaç de l'etè. S'han

representat les PES bidimensionals dels dos estats al llarg dels graus de llibertat de torsió i piramidalització molecular. El paràmetres obtinguts que defineixen la regió de la intersecció cònica (CI) entre els dos estats són molt similars als resultats amb la metodologia CASSCF. Aquests resultats demostren que és possible l'estudi d'interseccions còniques amb mètodes monoreferencials. Finalment, s'ha emprat el mètode RASCI-SF en l'estudi dels estats més baixos en energia per a poliens en conformació trans. Les energies de transició obtingudes han estat comparades a resultats obtinguts amb mètodes TDDFT, CASSCF, CASPT2 i amb valors experimentals.

The Variational Structure of Gradient Extremals.

J.M. Bofill, W. Quapp, M. Caballero.

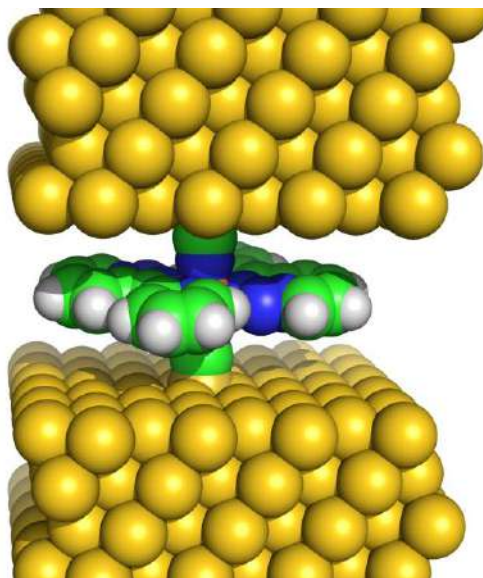
J. Chem. Theory Comput., 8 (2012) 927.



Panell esquerre: SEP associat al mecanisme de la reacció $A \rightarrow B + C$. El mecanisme d'aquesta reacció consisteix en dues reaccions elementals, és a dir, $A \rightarrow B$ i $A \rightarrow C$. Cada producte s'associa amb diferents mínims en la SEP. Panell dret: GE al centre ampliada del panell de l'esquerra. VRI: La vall de B mínim es separa en dues valls dels SP i una cresta entre ells. El punt de VRI és travessat pel GE, que connecta els dos SP adjacents.

LÍNIA 2. CIÈNCIA DELS MATERIALS COMPUTACIONAL**Coherent transport through spin-crossover single molecules.**

D. Aravena, E. Ruiz.

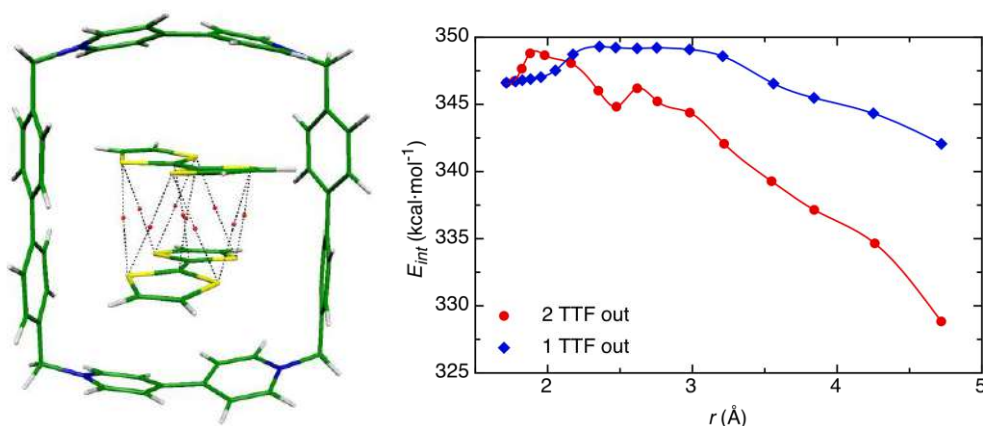
J. Am. Chem. Soc., 134, (2012) 777.

La tecnologia basada en silici està arribant al límit de grandària crítica, en què els efectes quàntics tenen un impacte sobre el correcte funcionament dels dispositius. Això ha empès els científics a concebre nous dispositius que aprofiten els fenòmens quàntics en el seu disseny. En aquest context, les molècules magnètiques han atret una considerable atenció degut al que algunes propietats d'aquests sistemes, com les transicions d'espín i els imans unimoleculars poden servir com a base per a nous dispositius de espintrònica molecular. Recentment hem presentat els resultats de càlculs DFT, combinats amb funcions de Green de no-equilibri, que permeten predir la resposta de corrent elèctric a un voltatge aplicat per a un dispositiu compost d'una molècula amb transició d'espín, *trans*-bis(isotiocianat) de ferro(II), connectat a dos elèctrodes d'or. Hem trobat que el corrent total depèn de l'estat d'espín de la molècula. Aquesta propietat està relacionada amb l'energia dels orbitals d en el centre Fe^{II} en ambdós estats d'espín i mostra que la conductància està profundament lligada al reordenament electrònic que dona lloc a la transició d'espín. En el cas de la molècula d'espín alt, també hem trobat que el corrent té un caràcter de spin polaritzat, amb la major part de la conductància deguda als electrons β , comportant-se com un dispositiu de filtre d'espín. Aquest resultat també està lligat al desdoblament dels orbitals d del catió Fe^{II} i ha de ser una característica general dels dispositius basats en complexos de Fe^{II} amb transició d'espín.

The Nature of the $[\text{TTF}]^{\cdot+} \cdots [\text{TTF}]^{\cdot+}$ Interactions in the $[\text{TTF}]_2^{2+}$ Dimers Embedded in Charged $[3]\text{Catenanes}$: Room-Temperature Multicenter Long Bonds.

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

Chem. Eur. J., 18 (2012) 5335.

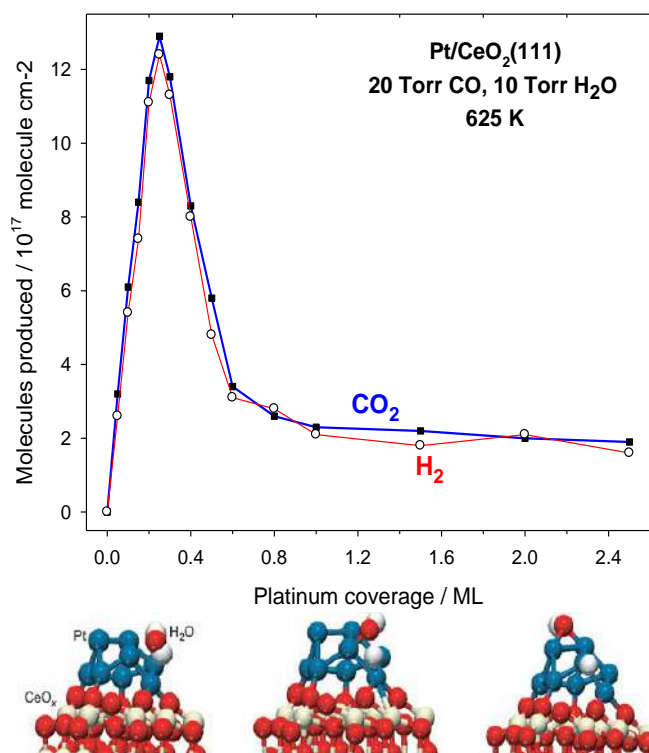


Degut a l'alt interès despertat per la formació de dímers de $[\text{TTF}]_2^{2+}$ a temperatura ambient a través d'un sistema supramolecular $[3]\text{catenane}$ publicat a *Nature Chemistry* al 2010, en aquesta publicació és mostra un estudi teòric exhaustiu de la naturalesa d'aquestes interaccions i de la seva conseqüent estabilització dins l'ens supramolecular. El treball inclou l'estudi a nivell DFT dels sistemes $[3]\text{catenane}^{m+}$ i $([\text{TTF}]_2^{n+} \text{ C CBPQT}^{4+})^{m+}$, on CBPQT és el macrocicle central del $[3]\text{catenane}$, pels diferents estats d'oxidació en fase gas, en dissolució i en estat sòlid. L'estudi mostra el guany que suposa la inclusió de les unitats de TTF dins el $[3]\text{catenane}$, el qual seria, no obstant, insuficient per estabilitzar el sistema sense les interaccions amb el dissolvent o els contraions en fase sòlida. Aquesta insuficiència d'estabilització faria dissociar el sistema en fase gas si no fos que això suposés el trencament d'enllaços covalents en el $[3]\text{catenane}$.

A New type of Strong Metal-Support Interaction and the Production of H₂ through the Transformation of Water on Pt/CeO₂(111) and Pt/CeO_x/TiO₂(110) catalysts.

A. Bruix, J. A. Rodriguez, P. J. Ramírez, S. D. Senanayake, J. Evans, J. B. Park, D. Stacchiola, P. Liu, J. Hrbek, F. Illas

J. Am. Chem. Soc., 134 (2012) 8968.



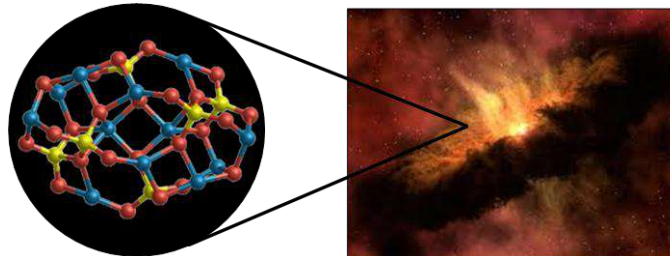
Producció d'hidrogen en un catalitzador Pt/CeO₂ en funció del tamany de la nanopàrticula de Pt i model emprat per explicar el fenomen.

La reacció de desplaçament d'aigua, $\text{CO} + \text{H}_2\text{O} \rightarrow \text{CO}_2 + \text{H}_2$ coneguda com WGS de l'anglès *water gas shift reaction* i abreviada com WGS, s'empra a la indústria per eliminar el CO que es produeix en el reformat d'hidrocarburs, principal font de producció d'hidrogen, i que pot enverinar el catalitzadors en reaccions posteriors com hidrodesulfurització en refineries o en piles de combustible. En aquest treball es mostra experimentalment que la reactivitat de les nanopàrticules de Pt suportades en òxid de ceri respecte a aquesta reacció canvia enormement en funció de la grandària de la partícula. Els models i càlculs teòrics duts a terme per investigadors de l' IQTCUB mostren que la causa en un efecte específic i nou del suport que, d'aquesta manera, actua directament en la reacció química. Aquest fet ha estat destacat pel Prof. C. T. Campbell en un article a *Nature Chemistry* 4 (2012) 597.

Efficient nucleation of stardust silicates via heteromolecular homogeneous condensation.

F. Goumans, S.T. Bromley.

Mon. Not. R. Astron. Soc., 420 (2012) 3344.

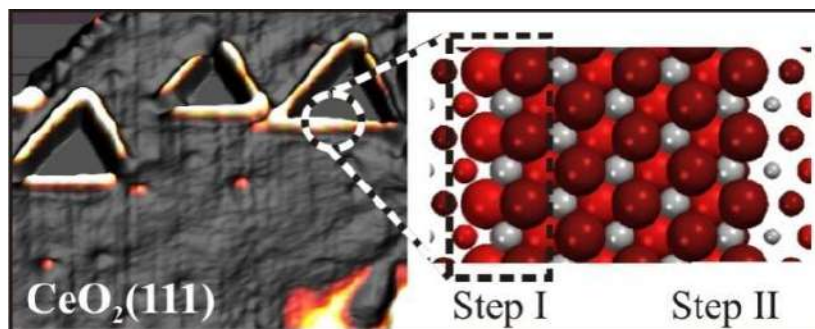


Una ruta viable i atòmicament detallat per a la nucleació de pols d'estrelles silicat es dóna per primera vegada sobre la base de optimitzacions globals i càlculs *ab initio*.

Formation of one-dimensional electronic states along the step edges of CeO₂(111)

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

ACS Nano, 6 (2012) 1126.

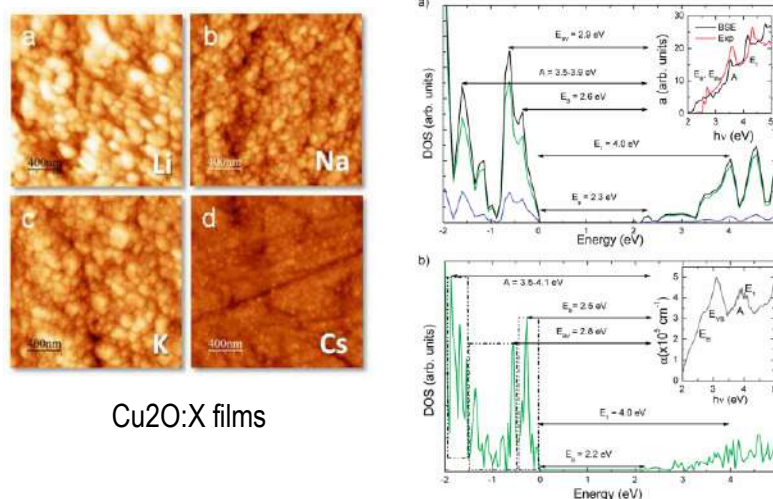


Superfícies de l'òxid de ceri es poden veure alterades mitjançant recuits d'altra temperatura. Aquest procés pot donar lloc a la formació de nano-illes delimitades per tres tipus d'esglaons diferents. Nostre article determina l'estructura atòmica d'aquests esglaons i caracteritza la seva estructura electrònica utilitzant microscòpia d'efecte tunel i experiments espectroscòpics en combinació amb mètodes computacionals basats en la DFT. Els resultats experimentals i teòrics demostren que les propietats dels esglaons es veuen fortament afectades pels moments dipolars que apareixen degut a l'absència d'àtoms O. Aquest treball obre les portes a estudis mitjançant catalitzadors model amb estructures ben caracteritzades a nivell nanoscòpic.

Disruption of the Chemical Environment and Electronic Structure in p-Type Cu₂O Films by Alkaline Doping.

F. Caballero-Briones, A. Palacios-Padros, O. Calzadilla, I. de P. R. Moreira, F. Sanz.

J. Phys. Chem. C, 116 (2012) 13524.



Cu₂O:X films

Esquerra: Imatges topogràfiques d'AFM ($2 \times 2 \mu\text{m}^2$) que mostren la morfologia superficial de films de Cu₂O dopat amb (a) Li, (b) Na, (c) K i (d) Cs on és evident la reducció de la grandària de grans de Li a Cs. Dreta: Densitat d'estats electrònica calculada pels sistemes model (a) Cu₂O sense dopar i (b) Cu₂O:K fent servir un model de bandes rígides per interpretar la natura d'E_g i els pics EB, EBV, A, i E1 que s'observen en els espectres d'absorció corresponents.

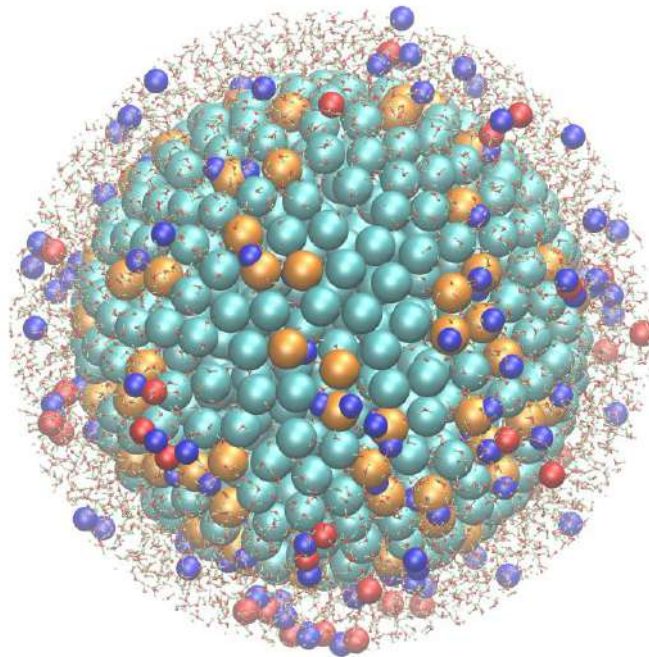
En aquest treball de col·laboració amb el grup de Bioelectroquímica i Nanotecnologia dirigit pel Dr. F. Sanz es descriu l'origen de les interessants propietats òptiques que presenten capes fines de Cu₂O dopades amb ions alcalins preparats per anodització de Cu. Els principals efectes observats en les mostres dopades van ser una reducció del gap directe i un apropament del nivell acceptor al màxim de la banda de valència que origina un canvi important en la resposta òptica. Càlculs de bandes en models que representen les fases dopades suggereixen que l'efecte principal de la substitució d'àtoms de Cu per ions alcalins correspon a la polarització dels anions que provoca la reducció del gap aïllant i un desdoblament dels estats propers al nivell de Fermi. D'altra banda, s'observa que la interacció entre els ions dopants i l'oxigen és atractiva per Li i Na i clarament repulsiva per K i Cs, fet que explica el diferent tipus de creixement observat pel que fa al gruix dels films i la rugositat així com la major acumulació en la superfície de les cristal·lites de K⁺ i Cs⁺.

LÍNIA 3. BIOQUÍMICA COMPUTACIONAL I *SOFT MATTER*

Molecular dynamics simulation of the spherical electrical double layer of a soft nanoparticle. Effect of the surface and counterion valence.

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

J. Chem. Phys., 137 (2012) 174701.

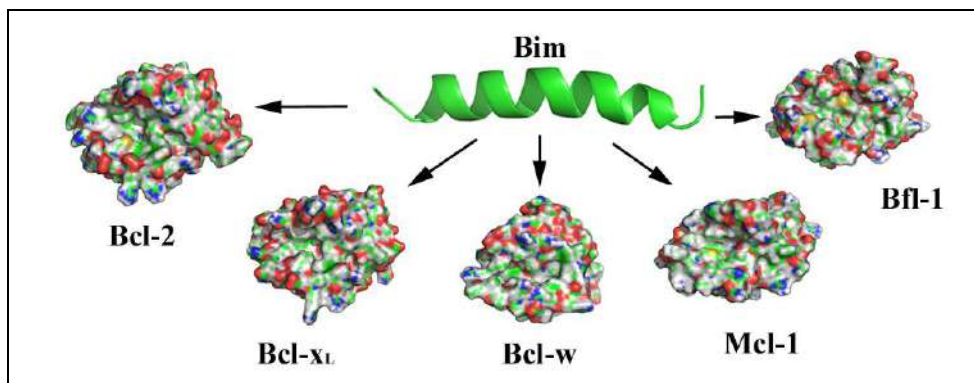


Instantània d'una simulació d'una nanopartícula amb càrrega $100e^-$ en solució 1 M de NaCl. Només es mostren les molècules d'aigua, els ions Na^+ (en blau) i els ions Cl^- (en vermell) a menys d'1 nm de distància de la superfície de la nanopartícula.

S'han realitzat simulacions de dinàmica molecular (MD) per estudiar la distribució d'ions i aigua al voltant d'una nanopartícula esfèrica carregada. S'ha dissenyat un model de nanopartícules *soft* emprant un conjunt de llocs d'interacció hidrofòbica distribuïts en sis capes esfèriques concèntriques. Per tal de simular l'efecte de grups carregats funcionalitzats sobre la superfície de nanopartícules, s'ha distribuït un conjunt de llocs carregats en la capa exterior. S'han estudiat quatre models de nanopartícules carregades en solucions de NaCl i CaCl_2 a 1 M i 0,1 M per avaluar l'efecte de la càrrega superficial, valència del contraíon i la concentració de sal afegida. S'ha vist que ions de Na^+ i Ca^{2+} penetren en la nanopartícula. Els ions monovalents s'acumulen més a l'interior de la superfície de les nanopartícules que els divalents.

Molecular Determinants of Bim(BH3) Peptide Binding to Pro-Survival Proteins.

L. Delgado-Soler, M. Pinto, K. Tanaka-Gil, J. Rubio-Martinez.

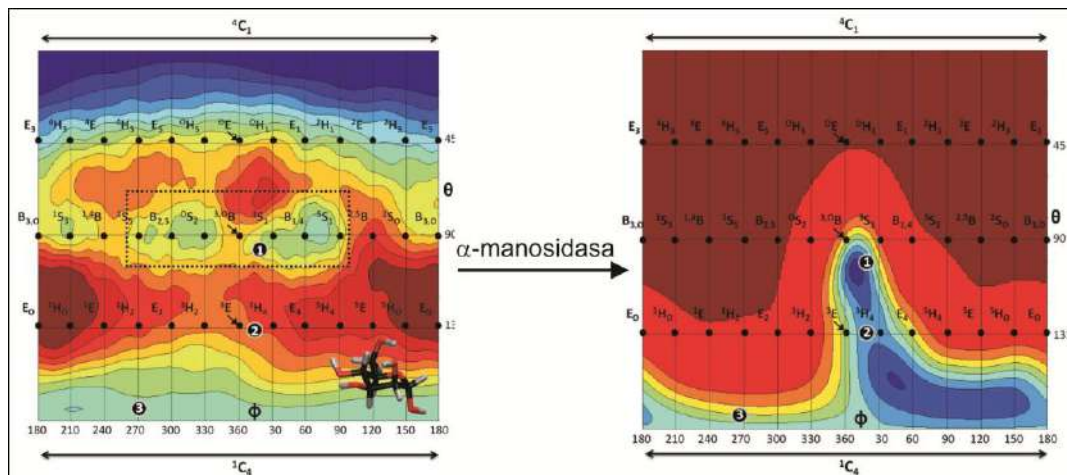
J. Chem. Inf. Model., 52 (2012) 2107.

Les proteïnes de la família Bcl-2 són reguladors crítics de l'apoptosi. Es poden classificar en dos grups diferents en funció de la seva capacitat per promoure o inhibir l'apoptosi. L'evasió de l'apoptosi és un requisit per a la carcinogènesi. Un dels mecanismes pels quals les cèl·lules canceroses evadeixen l'apoptosi és mitjançant la regulació de les proteïnes antiapoptòtiques de la família Bcl-2. Per tant, la inhibició d'aquestes proteïnes ha sorgit en els últims anys com una estratègia prometedora per al tractament del càncer. Un dels mecanismes pels quals aquestes proteïnes controlen l'apoptosi és a través de l'heterodimerització. Les estructures experimentals de proteïnes antiapoptòtiques complexades amb pèptids derivats del domini BH3 de les proteïnes proapoptòtiques ha proporcionat les primeres dades sobre el mecanisme molecular pel qual aquesta família de proteïnes forma heterodímers. En aquests complexos, la proteïna antiapoptòtica forma una esquerda hidrofòbica en la seva superfície de manera que la cara hidrofòbica d'una α -hèlix amfipàtica que pertany al domini BH3 de la proteïna proapoptòtica pot unir-se adequadament. En aquest escenari, el disseny de molècules petites imitant el domini BH3 de les proteïnes proapoptòtiques ha sorgit com una estratègia atractiva per al desenvolupament de nous fàrmacs; l'èxit ha estat demostrat experimentalment. No obstant això, amb la finalitat d'obtenir una teràpia eficaç, és important tenir en compte la diferent afinitat dels dominis BH3 proapoptòtics envers dels membres antiapoptòtics. Bim i Puma són les úniques proteïnes proapoptòtiques capaces d'unir-se a tots els membres antiapoptòtics amb afinitats similars. Per tant, s'espera que els mimètics de BH3 basat en qualsevol d'aquestes dues proteïnes podria ser capaç d'unir-se a totes les proteïnes antiapoptòtiques, i podrien ser eficaços en molts tipus de càncer.

The reaction coordinate of a bacterial GH47 α -mannosidase: a combined quantum mechanical and structural approach.

A. J. Thompson, J. Dabin, J. Iglesias-Fernández, A. Ardèvol, Z. Dinev, S. J. Williams, O. Bande, A. Siriwardena, C. Moreland, T.-C. Hu, D. K. Smith, H. J. Gilbert, C. Rovira, G. J. Davies.

Angew. Chem. Int. Ed., 51 (2012) 10997.



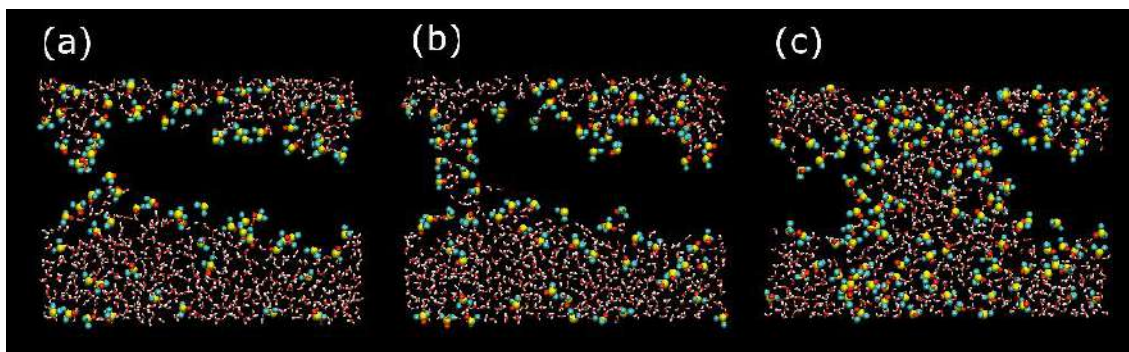
Reducció de l'espai conformacional d'una unitat de manosa per part de l'enzim α -manosidasa, així com el seu itinerari conformacional durant la reacció enzimàtica.

Els enzims α -manosidasas són els responsables de retallar i/o remodelar determinats carbohidrats units a proteïnes. L'alteració, deficiència o excés d'aquests es la causa de malalties com ara certs tumors o les anomenades malalties lisosomals. A partir d'estructures del complex carbohidrat-enzim, determinades a resolució atòmica, així com simulacions de dinàmica molecular quàntica (en particular, metadinàmica QM/MM), hem demostrat que l'espai conformacional del carbohidrat (per tant la seva flexibilitat) es veu dràsticament alterat quan aquest es troba a l'interior de l'enzim. Les conformacions que "sobreviuen" són, precisament, les conformacions que adopta el carbohidrat durant la reacció enzimàtica. L'enzim, per tant, imposa les conformacions que afavoreixen la catàlisi.

Effects of Dymethyl Sulfoxide in Cholesterol-Containing Lipid Membranes: A Comparative Study of Exeriments In Silico and with Cells.

M-A. de Ménorval, LL.M. Mir, M.L. Fernández, R. Reigada.

PLoS One, 7 (2012) e41733.



Formació d'un porus en una membrana lipídica per l'efecte del Dimetil Sulfoxid

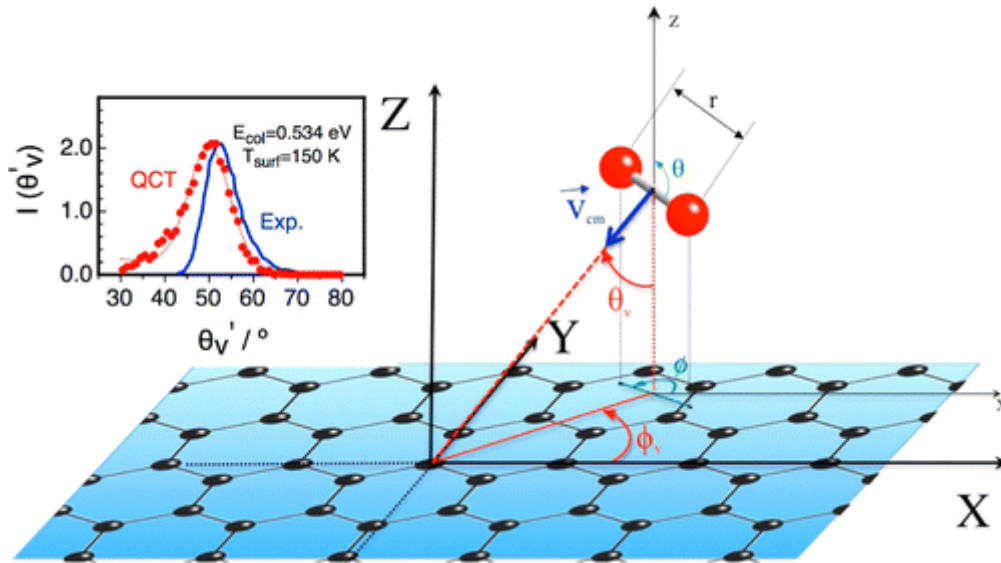
Estudiem l'efecte del dimetil sulfòxid (DMSO) en membranes lipídiques mitjançant simulacions de Dinàmica Molecular i observacions experimentals *in vivo*. S'identifiquen tres modes d'acció del DMSO, tant en les simulacions numèriques com en les observacions experimentals. Concentracions baixes promouen fluctuacions en la membrana, concentracions intermèdies generen porus estables que travessen la bicapa, i finalment concentracions grans la destrueixen. Les simulacions ens han permès identificar els mecanismes moleculars d'aquests tres modes d'acció, i els experiments ens han confirmat la seva existència en sistemes cel·lulars. La rellevància del treball rau en el fet que la formació de porus en membranes lipídiques té un important camp d'acció en les tècniques d'electroporació usades en tractaments d'electroquimioteràpia. Els experiments s'han dut a terme al grup del Dr. Mir, pioner en electroquimioteràpies, i els nostres resultats obren la possibilitat d'usar el DMSO per millorar-les.

LÍNIA 4. REACTIVITAT I DINÀMICA DE REACCIONS

Dynamics of the oxygen molecules scattered from graphite (0001) surface and comparison with experimental data.

V. Morón, L. Martin-Gondre, P. Gamallo, R. Sayós.

J. Phys. Chem. C 116 (2012) 21482.

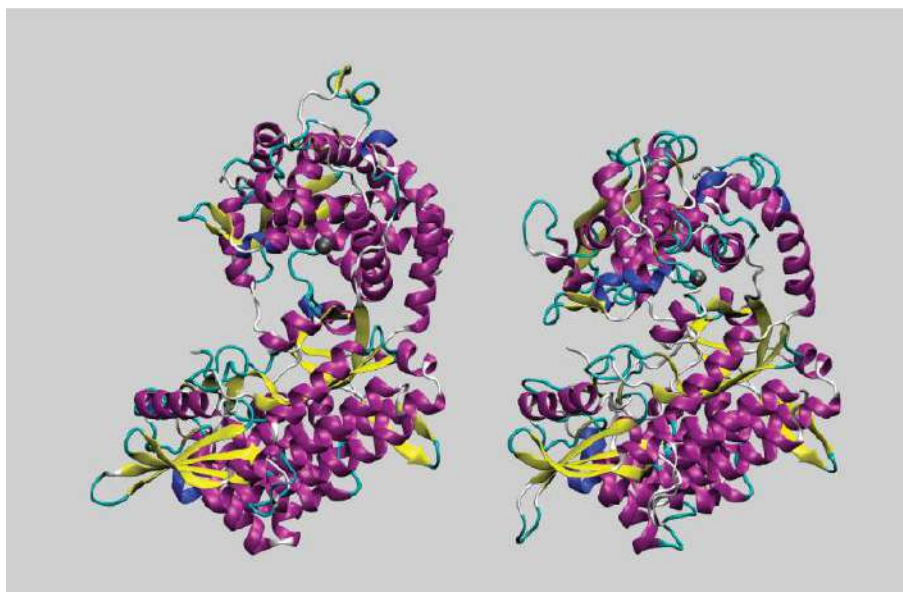


Hem realitzat un estudi dinàmic mitjançant trajectòries quasiclàssiques de les col·lisions d'O₂ sobre una superfície de grafit (0001) lliure de defectes i neta. Per a això hem emprat una superfície d'energia potencial periòdica flexible tipus London-Eyring-Polanyi-Sato, basada en càlculs DFT, i que ha permès estudiar prèviament també la col·lisió d'O amb O preadsorbit sobre aquesta mateixa superfície, produint també la reacció Eley-Rideal. Hem considerat diferents condicions inicials: energies de col·lisió ($0.2 \leq E_{\text{col}} \leq 1.2$ eV), angles d'incidència ($\theta_v = 0^\circ, 45^\circ$), temperatures de la superfície ($100 \leq T_{\text{surf}} \leq 900$ K) i alguns estats rovibracionals de l'O₂ ($v = 0, 1, 2$ and $j = 1, 17, 25$). Les distribucions calculades de l'angle polar d'scattering estan en molt bon acord amb les experimentals. També hem calculat aquesta distribució per a una distribució hipertèrmica d'O₂ ($\langle E_{\text{col}} \rangle = 10.46$ eV), $T_{\text{surf}} = 503$ K, $v=0$, $j=1$ i $\theta_v = 45^\circ$, obtenint una excel·lent comparació amb les dades experimentals.

The Large Scale Conformational Change of the Human DPP III–Substrate Prefers the “Closed” Form.

A. Tomić, M. González, S. Tomić.

J. Chem. Inf. Model., 52 (2012) 1583.



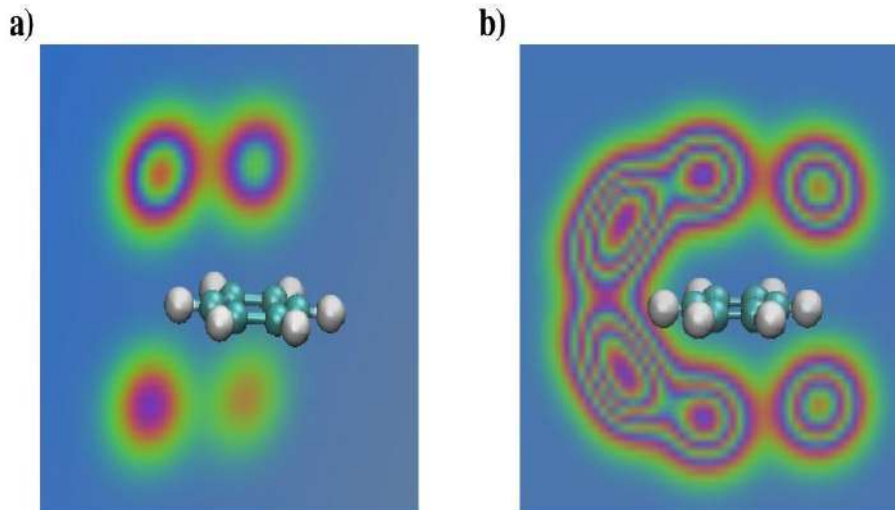
Initial structure of DPP III (left) and structure obtained after 101 ns of MD simulation (right).

L'ample espai disponible entre els dos dominis i l'àmplia especificitat pels substrats que presenta la variant humana de l'enzim dipeptidil peptidasa III (DPP III) suggereix que aquesta podria experimentar canvis conformationals significatius. I, efectivament, això és el que s'ha observat en simulacions (> 100 ns) de Dinàmica Molecular (MD), i els càlculs d'energia lliure posen de manifest que el substrat sintètic preferit (Arg-Arg-2-naphtylamide) presenta una unió més forta amb l'enzim en la conformació "tancada" que en la "oberta". La nostra suposició de que Asp372 juga un paper crucial en el tancament interdomini va ser demostrat per les simulacions MD de la variant Asp372Ala. D'acord amb els càlculs MM-PBSA, la component electrostàtica de l'energia lliure de solvatació resultar ser major per a la proteïna tancada que per la seva forma menys compacta. No obstant això, el guany en entropia causat per l'aigua alliberada de l'espai interdomini equilibra aquest efecte negatiu. Per tant ens trobem amb un procés molt interessant que és guiat per l'increment d'entropia, en acord amb el que s'ha suggerit a nivell experimental molt recentment.

Competitive Role of CH₄-CH₄ and CH- π interactions in the C₆H₆-(CH₄)_n aggregates: The transition from dimmers to cluster features.

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

J. Phys. Chem. A, 116 (2012) 5480.



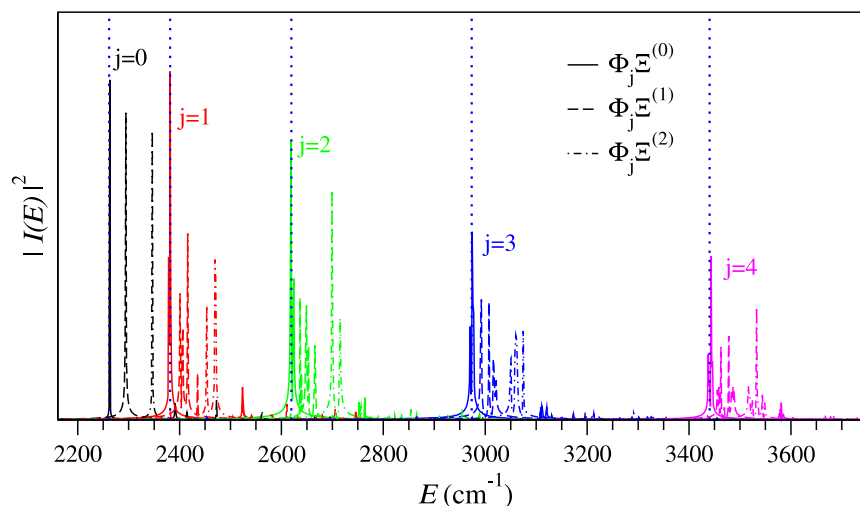
Mapes bidimensionals de la densitat de probabilitat de les molècules de CH₄ al voltant de la molècula de benzè.

La formulació de les interaccions entre molècules de metà i entre les molècules de metà i benzè (Bz) s'ha aplicat a l'estudi, mitjançant mètodes de la Dinàmica Molecular (MD), d'algunes propietats macroscòpiques del metà i al de la distribució espacial de les molècules de metà al voltant del benzè. L'estudi de sistemes contenint un nombre petit de molècules de metà ha permès observar freqüents interconversions entre diferents isòmers, fins i tot a baixes temperatures, la qual cosa implica que l'energia dels diferents isòmers és força semblant. Tot i això, les molècules de CH₄, tal i com pot observar-se a l'esquerra de la figura per al sistema Bz-(CH₄)₃ i a la dreta per al Bz-(CH₄)₇ prefereixen ocupar posicions axials al voltant del benzè.

Hydrogen confined in single-wall carbon nanotubes: Anisotropy effects on ro-vibrational quantum levels.

J. Suárez, F. Huarte-Larrañaga.

J. Chem. Phys. 137 (2012) 064320.



Espectre d'energies per a la molècula de H₂ en el seu estat vibracional fonamental i confinada en un nanotub de quiralitat (8,0). Les línies de diferents colors corresponen a diferents estats rotacionals. El diferent traç de les línies distingeix el nombre quàntic rotacional.

L'article presenta l'estudi de dinàmica quàntica en el que es van obtenir els nivells d'energia de la molècula d'hidrogen quan aquesta es troba confinada a la cavitat interior d'un nanotub de carboni de paret única. Ens els darrers anys, els efectes que provoca el nanoconfinament han generat un interès creixent. Per altra banda, la capacitat mostrada pels nanotubs de carbonis per encapsular molècules en entorns pràcticament unidimensionals fa que aquests efectes puguin ser particularment importants en processos com ara la fisorció de l'hidrogen. Les simulacions que hem dut a terme, inclouen de manera explícita tots els graus de llibertat de la molècula confinada, revelant respecte treballs anteriors com el moviment vibracional es veu afectat per la presència del potencial de confinament que generen les parets de la nanoestructura. De totes maneres, els efectes més importants són, el moviment de rotació de la molècula i l'aparició d'un moviment de translació quantitzada. S'ha analitzat a més la dependència dels efectes de confinament sobre el potencial d'interacció tenint en compte diferents paràmetres per a la interacció de carboni-hidrogen.

III.2 LLISTA DE PUBLICACIONS

A més de les publicacions corresponents a l'any 2012, en la present memòria també s'inclouen els treballs corresponents a l'any 2011 que, per motius d'agenda, no aparegueren en el recull de publicacions de l'IQTCUB d'aquell any.

ARTICLES PUBLICATS

1. *Conformational analyses of the reaction coordinate of glycosidases.*
G. J. Davies, A. Planas, C. Rovira.
Acc. Chem. Res. 45 (2012) 308.
2. *Formation of one-dimensional electronic states along the step edges of CeO₂(111).*
N. Nilius, S.M. Kozlov, J.-F. Jerratsch, M. Baron, X. Shao, F. Viñes, S. Shaikhutdinov, K.M. Neyman, H.J. Freund.
ACS Nano 6 (2012) 1126.
3. *Chemistry: A Panoply of Arrows.*
S. Alvarez.
Angew. Chem. Int. Ed. 51 (2012) 590.
4. *The reaction coordinate of a bacterial GH47 α -mannosidase: a combined quantum mechanical and structural approach.*
A. J. Thompson, J. Dabin, J. Iglesias-Fernández, A. Ardèvol, Z. Dinev, S. J. Williams, O. Bande, A. Siriwardena, C. Moreland, T.C. Hu, D. K. Smith, H. J. Gilbert, C. Rovira, G. J. Davies.
Angew. Chem. Int. Ed. 51 (2012) 10997.
5. *The reaction mechanisms of heme catalases: An atomistic view by ab initio molecular dynamics.*
M. Alfonso-Prieto, P. Vidossich, C. Rovira.
Arch. Biochem. Biophys. 525 (2012) 121.
6. *Size-controlled nanopores in lipid membranes with stabilizing electric fields.*
M.L. Fernández, M. Risk, R. Reigada, P.T. Vernier.
Biochem. Biophys. Res. Comm. 423 (2012) 325.
7. *On the Interaction of Polycyclic Aromatic Compounds with Graphene.*
S.M. Kozlov, F. Viñes, A. Görling.
Carbon 50 (2012) 2482.
8. *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.

9. *Evidence for atomic mixing via multiple intermediates during the dynamic interconversion of silicate oligomers in solution.*
K. Jelfs, E. Flikkema, S. T. Bromley .
Chem. Commun. 48 (2012) 46.
10. *Octahedrality versus tetrahedrality in stoichiometric ceria nanoparticles.*
A. Migani, K. Neyman, S. T. Bromley.
Chem. Commun. 48 (2012) 4199.
11. *Enhanced bistability by guest inclusion in Fe(II) spin crossover porous coordination polymers.*
F. J. Muñoz Lara, A. B. Gaspar, D. Aravena, E. Ruiz, M. C. Muñoz, M. Ohba, R. Ohtani, S. Kitagawa, J. A. Real.
Chem. Commun. 48 (2012) 4686.
12. *Field and dilution effects on the slow relaxation of a luminescent DyO₉ low-symmetry single-ion magnet.*
J. Ruiz, A. J. Mota, A. Rodríguez-Diéguez, S. Títos, J. M. Herrera, E. Ruiz, E. Cremades, J. P. Costes, E. Colacio.
Chem. Commun. 48 (2012) 7916.
13. *Electronic structure and symmetry in conjugated π -electron systems.*
P. Alemany, D. Casanova, C. Dryzun.
Chem. Eur. J. 17 (2011) 14896.
14. *Triangular Nickel Complexes Derived from 2-Pyridylcyanoxime: An Approach to the Magnetic Properties of the [Ni₃(μ -OH){pyC(R)NO}₃]²⁺ Core.*
J. Esteban, E. Ruiz, M. Font-Bardia, T. Calvet, A. Escuer.
Chem. Eur. J. 18 (2012) 3637.
15. *The Nature of the [TTF]⁺...[TTF]⁺ Interactions in the [TTF]₂²⁺ Dimers Embedded in Charged [3]Catenanes: Room-Temperature Multicenter Long Bonds.*
M. Capdevila-Cortada, J.J. Novoa.
Chem. Eur. J. 18 (2012) 5335.
16. *The structural Diversity Triggered by Intermolecular Interactions between Au^IS₂ groups: Auophilia and Beyond.*
M.-R. Azani, O. Castillo, M. L. Gallego, T. Parella, G. Aullón, O. Crespo, A. Laguna, S. Alvarez, R. Mas-Ballesté, F. Zamora.
Chem. Eur. J. 18 (2012) 9965.
17. *Unraveling the Role of Water in the Stereoselective Step of Aqueous Proline-Catalyzed Aldol reactions .*
J. Ribas-Arino, M.A. Carvajal, A. Chaumont, M. Masia.
Chem. Eur. J. (2012) (acceptat)
18. *Tuning surface chemistry of Pd by atomic C and H: A microscopic picture.*
H.A. Aleksandrov, F. Viñes, W. Ludwig, S. Schaueremann, K.M. Neyman.
Chem. Eur. J. 18 (2012) (acceptat).

19. *Conformational Isomerism Induces Paramagnetism in Purely Organic Molecules With an Even Electron Count: the Case of Dithiole and Thiazole Derivatives.*
S. Latorre, C. Heras, I. P. R. de Moreira, J. M. Bofill, F. López-Calahorra.
Chem. Eur. J. (2012) (acceptat).
20. *An Artist's Hommage to the Elements.*
S. Alvarez.
Chem. Int. 34 (2012) 5.
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. *Quantum mechanical and quasiclassical Born-Oppenheimer dynamics of the reaction $N_2(X^1\Sigma_g^+) + O(^3P) \rightarrow N(^4S) + NO(X^2\Pi)$ on the N_2O a^3A'' and b^3A' surfaces.*
S. Akpınar, I. Armenise, P. Defazio, F. Esposito, P. Gamallo, C. Petrongolo, R. Sayós.
Chem. Phys. 398 (2012) 81.
23. *Exact activation energies and phenomenological description of quantum tunneling for model potential energy surfaces. The $F+H_2$ reaction at low temperature.*
V. Aquilanti, K.C. Mundim, S. Cavalli, D. De Fazio, A. Aguilar, J.M. Lucas.
Chem. Phys. 398 (2012) 186.
24. *Benzene water interaction: From gaseous dimers to solvated aggregates.*
M. Albertí, N. Faginas Lago, F. Pirani.
Chem. Phys. 399 (2012) 232.
25. *Methane dissociation on Ni(111): Reaction probabilities using direct and initial state selected approaches.*
M. Moix Teixidor, F. Huarte-Larrañaga.
Chem. Phys. 399 (2012) 264.
26. *Propensities in the solvation of M^+ -benzene systems ($M=Na,K,Rb$) investigated by cluster dynamics.*
M. Albertí, A. Aguilar, F. Pirani.
Chem. Phys. 399 (2012) 290.
27. *O oxidation by co-adsorbed atomic O on the Au(321) surface with Ag impurities: A mechanistic study from first-principles calculations.*
L.V. Moskaleva, V. Zielasek, T. Klüner, K.M. Neyman, M. Bäumer.
Chem. Phys. Lett. 525-526 (2012) 87.
28. *Interaction of adenine Cu (II) complexes with BN-doped fullerene differentiates electronically equivalent tautomers.*
N. Krainara, F. Illas, J. Limtrakul,
Chem. Phys. Lett. 537 (2012) 88.

29. *Search for Conical Intersection Points (CI) by Newton Trajectories.*
W. Quapp, J.M. Bofill, M. Caballero.
Chem. Phys. Lett. 541 (2012) 122.
30. *A molecular beam scattering investigation of methanol-noble gas complexes: Characterization of the isotropic potential and insights into the nature of the interaction.*
D. Cappelletti, P. Candori, S. Falcinelli, M. Alberti, F. Pirani.
Chem. Phys. Lett. 545 (2012) 14.
31. *Assessing the importance of Van der Waals interactions on the adsorption of azobenzene on the rutile TiO₂(110) surface.*
J. P. Prates Ramalho, F. Illas,
Chem. Phys. Lett. 545 (2012) 60.
32. *Structure and energetics of hydroxylated silica clusters, (SiO₂)_M(H₂O)_N, M=8,16 and N=1-4: a global optimisation study.*
E. Flikkema, K. Jelfs, S. T. Bromley.
Chem. Phys. Lett. 554 (2012) 117.
33. *Covalent Mechanochemistry: Theoretical Concepts and Computational Tools with Applications to Molecular Nanomechanics.*
J. Ribas-Arino, D. Marx.
Chem. Rev. 112 (2012) 5412.
34. *Classical dynamics study of atomic oxygen over graphite (0001) with new interpolated and analytical potential energy surfaces.*
V. Morón, L. Martin-Gondre, C. Crespos, P. Larregaray, P. Gamallo, R. Sayós.
Comp. Theor. Chem. 990 (2012) 132.
35. *Co^{II}Ln^{III} dinuclear complexes (Ln^{III} = Gd, Tb, Dy, Ho and Er) as platforms for 1,5-dicyanamide-bridged tetranuclear Co^{II}₂Ln^{III}₂ complexes: A magneto-structural and theoretical study.*
E. Colacio, J. Ruiz, A. J. Mota, M. A. Palacios, E. Ruiz, E. Cremades, M. H. Hanninen, R. Sillanpää, E. K. Brechin.
C. R. Chimie 15 (2012) 878.
36. *Are the phenyl embrace motifs between Ph₄P⁺ cations in crystals attractive? An accurate theoretical evaluation.*
E. D'Oria, D. Braga, J.J. Novoa.
CrystEngComm. 14 (2012) 792.
37. *Exchange coupling and magnetic anisotropy of exchanged-biased quantum tunnelling single-molecule magnet Ni₃Mn₂ complexes using theoretical methods based on Density Functional Theory.*
S. Gómez-Coca, E. Ruiz.
Dalton Trans. 41 (2012) 2659.

38. *Electronic Structure and Geometries of o-carborane derived Cyclic Structures* $[\{1,2-(C_2B_{10}H_{10})_nM_n\}Ag_m]^{z-}$, $M = \{Au, Hg\}$, $n = \{3, 4\}$, $m = \{0, 1, 2\}$, $z = \{n - m, -m\}$.
G. Aullón, A. Laguna, J. M. Oliva.
Dalton Trans. 41 (2012) 14146.
39. *Synthesis, crystal structure and magnetism of new salicylamidoxime-based hexanuclear manganese(III) single-molecule magnets.*
J. Martínez-Lillo, A.-R. Tomsa, Y. Li, L.-M. Chamoreau, E. Cremades, E. Ruiz, A.-L. Barra, A. Proust, M. Verdaguer, P. Gouzerh.
Dalton Trans. 41 (2012) 13668.
40. *On the Coordination of Dinitrogen to Group 4 Metallocenes.*
B. Peigné, J. Cano, G. Aullón.
Eur. J. Inorg. Chem. (2012) 797.
41. *Structural stability of quaternary ACuFeS₂ (A = Li, Na, K, Cs) phases: A theoretical approach.*
S. Conejeros, P. Alemany, M. Llunell, V. Sánchez, J. Llanos, L. Padilla-Campos.
Inorg. Chem. 51 (2012) 362.
42. *Exchange Coupling Mediated by N-H...Cl Hydrogen Bonds: Experimental and Theoretical Study of the Frustrated Magnetic System in Bis(o-phenylenediamine)nickel(II) Chloride.*
R. D. Willett, C. J. Gomez-Garcia, B. Twamley, S. Gomez-Coca, E. Ruiz.
Inorg. Chem. 51 (2012) 5487.
43. *Family of Carboxylate- and Nitrate-diphenoxo Triply Bridged Dinuclear Ni(II)Ln(III) Complexes (Ln = Eu, Gd, Tb, Ho, Er, Y): Synthesis, Experimental and Theoretical Magneto-Structural Studies, and Single-Molecule Magnet Behavior.*
E. Colacio, J. Ruiz, A. J. Mota, M. A. Palacios, E. Cremades, E. Ruiz, F. J. White, E. K. Brechin.
Inorg. Chem. 51 (2012) 5857.
44. *Synthesis, Structure, Magnetic Behavior, and Theoretical Analysis of Diazine-Bridged Magnetic Ladders: Cu(quinoline)X₂ and Cu(2,3-dimethylpyrazine)X₂ (X = Cl, Br).*
J. Jornet-Somoza, N. Codina-Castillo, M. Deumal, F. Mota, J.J. Novoa, R.T. Butcher, M.M. Turnbull, B. Keith, C.P. Landee, J.L. Wikaira.
Inorg. Chem. 51 (2012) 6315.
45. *A Heterometallic (NiII-CuII) Decanuclear Cluster Containing Two Distorted Cubane-like Pentanuclear Cores: Synthesis, Structure, and Magnetic Properties.*
A. Chakraborty, B.K. Ghosh, J. Ribas-Arino, J. Ribas, T.K. Maji.
Inorg. Chem. 51 (2012) 6440.
46. *Hexanuclear Copper(II) Cages Built on a Central $\{\mu_3-O \cdots H \cdots \mu_3-O\}$ Moiety, 1,3-Bis(dimethylamino)-2-propanolato and Capping R-phosphonates: Crystal Structures, Magnetic Behavior, and DFT Studies.*
S. Speed, R. Vicente, D. Aravena, E. Ruiz, O. Roubeau, S. J. Teat.
Inorg. Chem. 51 (2012) 6842.

47. *Tracing the Sources of the Different Magnetic Behavior in the Two Phases of the Bistable (BDTA)₂[Co(mnt)₂] Compound.*
S. Vela, M. Deumal, J. Ribas-Arino, J.J. Novoa.
Inorg. Chem. 51 (2012) 8646.
48. *Staple motifs, initial steps in the formation of thiolate-protected gold nanoparticles: How do they form?*
V. Rojas, E. Giralt, C. Rovira.
Inorg. Chem. 51 (2012) 11422.
49. *A Molecular dynamics study of Sodium dodecyl sulfate-methane system in water using the improved Lennard Jones.*
A. Costantini, M. Albertí, F. Pirani, A. Laganà.
Inter. J. Quantum Chem. 112 (2012) 1810.
50. *Electronic, structural, and optical properties of host materials for inorganic phosphors.*
P. Alemany, I. de P. R. Moreira, R. Castillo, Jaime Llanos.
J. Alloy. Comp. 513 (2012) 630.
51. *Coherent transport through spin-crossover single molecules.*
D. Aravena, E. Ruiz.
J. Am. Chem. Soc. 134 (2012) 777.
52. *Charge Transfer and Tunable Ambipolar Effect Induced by Assembly of Cu(II) Binuclear Complexes on Carbon Nanotube Field Effect Transistor Devices.*
G. Magadur, J.-S. Lauret, G. Charron, F. Bouanis, E. Norman, V. Huc, C.-S. Cojocar, S. Gómez-Coca, E. Ruiz, T. Mallah.
J. Am. Chem. Soc. 134 (2012) 7896.
53. *A New type of Strong Metal-Support Interaction and the Production of H₂ through the Transformation of Water on Pt/CeO₂(111) and Pt/CeO_x/TiO₂(110) catalysts.*
A. Bruix, J. A. Rodríguez, P. J. Ramírez, S. D. Senanayake, J. Evans, J. B. Park, D. Stacchiola, P. Liu, J. Hrbek, F. Illas,
J. Am. Chem. Soc. 134 (2012) 8968.
54. *Theoretical Study of Exchange Coupling in 3d-Gd Complexes: Large Magnetocaloric Effect Systems.*
E. Cremades, S. Gómez-Coca, S. Alvarez, E. Ruiz
J. Am. Chem. Soc. 134 (2012) 10532.
55. *The Large Scale Conformational Change of the Human DPP III—Substrate Prefers the “Closed” Form.*
A. Tomić, M. González, S. Tomić.
J. Chem. Inf. Model. 52 (2012) 1583.
56. *Molecular Determinants of Bim(BH3) Peptide Binding to Pro-Survival Proteins.*
L. Delgado-Soler, M. Pinto, K. Tanaka-Gil, J. Rubio-Martinez.
J. Chem. Inf. Model. 52 (2012) 2107.

57. *Nonadiabatic dynamics of $O(^1D) + N_2(^1\Sigma^+_g) \rightarrow O(^3P) + N_2(^1\Sigma^+_g)$ on three coupled potential surfaces: Symmetry, Coriolis, spin-orbit, and Renner-Teller effects.*
P. Defazio, P. Gamallo, C. Petrongolo.
J. Chem. Phys. 136 (2012) 054308.
58. *State-to-state reaction probabilities within the quantum transition state framework.*
R. Welsch, F. Huarte-Larrañaga, U. Manthe.
J. Chem. Phys. 136 (2012) 064117.
59. *Kinetics of the Sulfur Oxidation on Palladium: A Combined In Situ X-Ray Photoelectron Spectroscopy and Density-Functional Study.*
K. Gotterbarm, N. Luckas, O. Höfert, M.P.A. Lorenz, R. Streber, C. Papp, F. Viñes, H.P. Steinrück, A. Görling.
J. Chem. Phys. 136 (2012) 094702.
60. *Size effects on water splitting by Pt nanoparticles.*
J. L. C. Fajín, A. Bruix, M.N. D. S. Cordeiro, J.R.B. Gomes, F. Illas.
J. Chem. Phys. 137 (2012) 034701.
61. *Hydrogen confined in single-wall carbon nanotubes: Anisotropy effects on ro-vibrational quantum levels.*
J. Suárez, F. Huarte-Larrañaga.
J. Chem. Phys. 137 (2012) 064320.
62. *Avoided crossings, conical intersections, and low-lying excited states with single reference method: The restricted active space spin-flip configuration interaction approach.*
D. Casanova.
J. Chem. Phys. 137 (2012) 084105.
63. *Crossed molecular beams study of inelastic non adiabatic processes in gas phase collisions between sodium ions and $ZnBr_2$ molecules in the 0.10 – 3.50 keV energy range.*
J. de Andrés, J.M. Lucas, M. Albertí, J.M. Bofill, A. Belyaev, A. Aguilar.
J. Chem. Phys. 137 (2012) 154202.
64. *Long range coupling between defect centres in inorganic nanostructures: Valence alternation pairs in nanoscale silica.*
M.A.Zwinenburg, F. Illas, S. T. Bromley.
J. Chem. Phys. 137 (2012) 154313.
65. *Molecular dynamics simulation of the spherical electrical double layer of a soft nanoparticle. Effect of the surface and counterion valence.*
M. Nedyalkova, S. Madurga, S. Pisov, I. Pastor, E. Vilaseca, F. Mas.
J. Chem. Phys. 137 (2012) 174701.
66. *The Variational Structure of Gradient Extremals.*
J.M. Bofill, W. Quapp, M. Caballero.
J. Chem. Theory Comput. 8 (2012) 927.

67. *On the need for spin polarization in heterogeneously catalyzed reactions on non-magnetic metallic surfaces.*
 J. L. C. Fajín, M. N. D. S. Cordeiro, J. R. B. Gomes, F. Illas.
J. Chem. Theory Comput. 8 (2012) 1737.
68. *A Relation Between the Eikonal Equation Associated to a Potential Energy Surface and a Hyperbolic Wave Equation.*
 J.M. Bofill, W. Quapp, M. Caballero.
J. Chem. Theory Comput. (2012) (acceptat)
69. *Catalases versus peroxidases: DFT investigation of H₂O₂ oxidation in models systems and implications for heme protein engineering.*
 P. Vidossich, M. Alfonso-Prieto, C. Rovira.
J. Inorg. Biochem. (2012) (acceptat)
70. *Topography of Cyclopropyl Radical Ring Opening to Allyl Radical on the CASSCF(3,3) Surface: Valley-Ridge Inflection Points by Newton Trajectories.*
 W. Quapp, J.M. Bofill.
J. Math. Chem. 50 (2012) 2061.
71. *A benchmark calculation for the fuzzy c-means clustering algorithm: initial memberships*
 Alex Rodriguez, M. Santos Tomas , Jaime Rubio-Martinez.
J. Math. Chem. 50 (2012) 2703.
72. *Evidence of intrinsic ambipolar charge transport in a high band gap organic semiconductor*
 C. Moreno, R. Pfattner, M. Mas-Torrent, J. Puigdollers, S. T. Bromley, C. Rovira, J. Veciana, R. Alcubilla.
J. Mater. Chem. 22 (2012) 345.
73. *Calcium-based functionalization of carbon nanostructures for peptide immobilization in aqueous media.*
 C. Cazorla, V. Rojas-Cervellera, C. Rovira.
J. Mater. Chem. 22 (2012) 19684.
74. *Structural analysis of the inhibition of APRIL by TACI and BCMA through molecular dynamics simulations.*
 M. González-Mendióroz, A.-B. Álvarez-Vázquez, J. Rubio-Martinez.
J. Mol. Graph. Model. (2012) (acceptat)
75. *Ion Size Influence on the Ar Solvation Shells of M⁺-C₆H₆ clusters (M=Na, K, Rb, Cs).*
 M.Alberti, N. Faginas Lago.
J. Phys. Chem. A 116 (2012) 3094.
76. *Alkali-ion microsolvation with benzene molecules.*
 J.M.C. Marques, J.L.Llanio-Trujillo, M. Albertí, A. Aguilar, F. Pirani.
J. Phys. Chem. A 116 (2012) 4947.
77. *Dynamics of the O(³P) + CH₄ → OH + CH₃ reaction is similar to that of a triatomic reaction.*
 R. Martínez, P.A. Enríquez, M.P. Puyuelo, M. González.
J. Phys. Chem. A 116 (2012) 5026.

78. *The competitive role of CH₄-CH₄ and CH-π interactions in the C₆H₆-(CH₄)_n aggregates: The transition from dimmers to cluster features.*
M. Albertí, A. Aguilar, J.M. Lucas, F. Pirani.
J. Phys. Chem. A 116 (2012) 5480.
79. *Adiabatic quantum dynamics of CH(X²I)+H(²S) reactions on the CH₂(X³A'') surface and role of the excited states.*
P. Gamallo, P. Defazio, S. Akpınar, C. Petrongolo.
J. Phys. Chem. A 116 (2012) 8291.
80. *Theoretical Study of the Dynamics and Kinetics of the O + CS → CO + S Chemical Laser Reaction, Where CO Shows a Very High Vibrational Excitation.*
P. Gamallo, R. Francia, R. Martínez, R. Sayós, González.
J. Phys. Chem. A (2012) (acceptat)
81. *Are Micelles Needed to Form Methane Hydrates in Sodium Dodecyl Sulfate Solutions?*
M. Albertí, A. Costantini, A. Laganà, F. Pirani.
J. Phys. Chem. B 116 (2012) 4220.
82. *Nature of Ag islands and nanoparticles on the CeO₂ (111) surface.*
P. Luches, F. Pagliuca, S. Valeri, F. Illas, G. Preda, G. Pacchioni.
J. Phys. Chem. C 116 (2012) 1122.
83. *Bonding Mechanisms of Graphene on Metal Surfaces.*
S.M. Kozlov, F. Viñes, A. Görling.
J. Phys. Chem. C 116 (2012) 7360.
84. *Water chemistry on model ceria and Pt/ceria catalysts.*
Y. Lykhach, V. Johánek, H.A. Aleksandrov, S.M. Kozlov, M. Happel, T. Skála, P.S. Petkov, N. Tsud, G.N. Vayssilov, K.C. Prince, K.M. Neyman, V. Matolín, J. Libuda.
J. Phys. Chem. C 116 (2012) 12103.
85. *Electronic structure of F-doped bulk rutile, anatase and brookite polymorphs of TiO₂.*
S. Tosoni, O. Lamiel-Garcia, D. Fernandez-Hevia, J. M. Doña, F. Illas.
J. Phys. Chem. C, 116 (2012) 12738.
86. *Quasiclassical trajectory dynamics study of atomic oxygen collisions on an O-preadsorbed graphite (0001) surface with a new analytical potential energy surface.*
V. Morón, L. Martín-Gondre, P. Gamallo, R. Sayós.
J. Phys. Chem. C 116 (2012) 13092.
87. *Disruption of the Chemical Environment and Electronic Structure in p-Type Cu₂O Films by Alkaline Doping.*
F. Caballero-Briones, A. Palacios-Padros, O. Calzadilla, I. de P. R. Moreira, F. Sanz.
J. Phys. Chem. C. 116 (2012) 13524.

88. *Geometric arrangement of components in bimetallic PdZn/Pd(111) surfaces modified by CO adsorption: A combined study by density functional theory calculations, polarization-modulated infrared reflection absorption spectroscopy, and temperature-programmed desorption.*
C. Weilach, S.M. Kozlov, H. Holzzapfel, K. Föttinger, K.M. Neyman, G. Rupprechter.
J. Phys. Chem. C 116 (2012) 18768.
89. *Interplay between Magnetism and Magicness in Nanoclusters.*
G. Giacomo, A. D. Lewoczko, A. Burnin, J. J. BelBruno, S. T. Bromley.
J. Phys. Chem. C 116 (2012) 20625.
90. *Dynamics of the oxygen molecules scattered from graphite (0001) surface and comparison with experimental data.*
V. Morón, L. Martin-Gondre, P. Gamallo, R. Sayós.
J. Phys. Chem. C 116 (2012) 21482.
91. *Chiral Conformation at a Molecular Level of a Propeller-Like Open-Shell Molecule on Au(111).*
F. Grillo, V. Mugnaini, M. Oliveros, S. M. Francis, D-J. Choi, M. V. Rastei, L. Limot, Cinzia Cepek, M. Pedio, S. T. Bromley, N. V. Richardson, J-P. Bucher, J. Veciana.
J. Phys. Chem. Lett. 3 (2012) 1559.
92. *Absolute surface step energies: Accurate theoretical methods applied to ceria nanoislands.*
S.M. Kozlov, F. Viñes, N. Nilius, S. Shaikhutdinov, K.M. Neyman.
J. Phys. Chem. Lett. 3 (2012) 1956.
93. *Mechanisms of defect generation and clustering in CH₃S self-assembled monolayers on Au(111).*
P. Carro, D. Torres, R. Diaz, R. C. Salvarezza, F. Illas.
J. Phys. Chem. Lett., 3 (2012) 2159.
94. *Origin of optical excitations in fluorine-doped Titania from response function theory: relevance to photocatalysis.*
S. Tosoni, D. Fernandez Hevia, O. González Díaz, F. Illas.
J. Phys. Chem. Lett. 3 (2012) 2269.
95. *Cyclin-dependent kinases 4 and 6 control tumor progression and direct glucose oxidation in the pentose cycle.*
M. Zanuy, A. Ramos-Montoya, O. Villacañas, N. Canela, A. Miranda, E. Aguilar, N. Agell, O. Bachs, J. Rubio-Martinez, M.D. Pujol, W.-N. P. Lee, S. Marin, M. Cascante.
Metabolomics 8 (2012) 454.
96. *Efficient nucleation of stardust silicates via heteromolecular homogeneous condensation*
F. Goumans S. T. Bromley
Mon. Not. R. Astron. Soc. 420 (2012) 3344.
97. *Uncovering the hidden geometry behind metabolic networks.*
M.A. Serrano, M. Boguñà, F. Sagués.
Mol. Biosys. 8 (2012) 843.

98. *Self-Assembly of Heterometallic Metallomacrocycles via Ditopic Fluoroaryl Gold(I) Organometallic Metalloligands.*
M. Ferrer, A. Gutiérrez, L. Rodríguez, O. Rossell, E. Ruiz, M. Engeser, Y. Lorenz, R. Schilling, P. Gómez-Sal, A. Martín.
Organometallics 31 (2012) 1533.
99. *Activation of Noble Metals on Metal-Carbide Surfaces: Novel Catalysts for CO Oxidation, Desulfurization and Hydrogenation Reactions.*
J.A. Rodriguez and F. Illas.
Phys. Chem. Chem. Phys. 14 (2012) 427.
100. *Continuous Symmetry Measures of Irreducible Representations: Application to Molecular Orbitals.*
P. Alemany, D. Casanova, S. Alvarez.
Phys. Chem. Chem. Phys. 14 (2012) 11816.
101. *Growth and Electronic Structure of Nitrogen-Doped Graphene on Ni(111).*
R.J. Koch, M. Weser, W. Zhao, F. Viñes, K. Gotterbarm, S.M. Kozlov, O. Höfert, M. Ostler, C. Papp, J. Gebhardt, H.P. Steinrück, A. Görling, T. Seyller.
Phys. Rev. B 86 (2012) 075401.
102. *Accurate description of optical absorption of F centers from quasiparticle band structure calculations.*
S. Tosoni, D. Fernandez-Hevia, J. Perez Peña, F. Illas.
Phys. Rev. B 85 (2012) 115114.
103. *Essential role of anions in the charge ordering transition of α -(BEDT-TTF)₂I₃.*
P. Alemany, J.-P. Pouget, E. Canadell.
Phys. Rev. B 85 (2012) 195118.
104. *Nanoscale thermal stabilization via permutational premelting.*
F. Viñes, J. Carrasco, S. T. Bromley.
Phys. Rev. B 85 (2012) 195425.
105. *Competition for Graphene: Graphynes with Direction-Dependent Dirac Cones.*
D. Malko, C. Neiss, F. Viñes, A. Görling.
Phys. Rev. Lett. 108 (2012) 086804.
106. *Charge ordering in low dimensional organic conductors: Structural aspects.*
J.P. Pouget, P. Foury-Leylekian, P. Alemany, E. Canadell.
Phys. Stat. Sol. B 249 (2012) 937-942.
107. *Diphenyl urea derivatives as inhibitors of transketolase: a structure-based virtual screening.*
C. Obiol-Pardo, G. Alcarraz-Vizán, M. Cascante, J. Rubio-Martinez.
PLoS One 7 (2012) 32276.

108. *Effects of Dimethyl Sulfoxide in Cholesterol-Containing Lipid Membranes: A Comparative Study of Experiments In Silico and with Cells.*
M-A. de Ménorval, LL.M. Mir, M.L. Fernández, R. Reigada.
PLoS One 7 (2012) 41733.
109. *Two isosceles coordination [Ni₃] triangles strongly interacting via hydrogen bonds.*
G. A. Craig, O. Roubeau, J. Ribas-Arino, S.J. Teat, G. Aromí.
Polyhedron (2012) (acceptat).
110. *Assigning the dimensionality in low-dimensional materials: a rigorous study of the dimensionality of (2,5-dimethylpyrazine)CuCl₂.*
S. Vela, M. Deumal, M. M. Turnbull, J.J. Novoa.
Polyhedron (2012) (acceptat).
111. *Predicting effects of structural stress in a genome-reduced model bacterial metabolism.*
O. Güell, F. Sagués, M.A. Serrano.
Scientific Reports 2 (2012) 621.
112. *Theoretical study of the structure and reactivity descriptors of Cu_nM (M=Ni, Pd, Pt; n=1-4) bimetallic nanoparticles supported on MgO (001).*
E. Florez, F. Mondragon, F. Illas.
Surf. Sci. 606 (2012) 1010.
113. *Role of step sites on water dissociation on stoichiometric ceria surfaces.*
S. Fuente, M. M. Branda, F. Illas.
Theor. Chem. Acc. 131 (2012) 1190.
114. *Analysis of the Valley-Ridge Inflection Points through the Partitioning Technique of the Hessian Eigenvalue Equation.*
J.M. Bofill, W. Quapp.
Theor. Chem. Acc. (2012) (acceptat).

CAPÍTOLS DE LLIBRES I PROCEEDINGS

1. Self-Assembly of Coordination Compounds: Design Principles", en *Supramolecular Chemistry, From Molecules to Nanomaterials*
S. Alvarez, E. Ruiz.
J. W. Steed, P. A. Gale, eds., John Wiley & Sons, Chichester, UK, Vol. 5, 1993-2044 (2012). ISBN 978-0-470-74640-0.
2. *Potential energy surfaces for the dynamics of elementary gas-surface processes.*
P. Gamallo, L. Martin-Gondre, R. Sayós, C. Crespos, P. Larregaray.
Dynamics of gas-surface interactions: atomic-level understanding of scattering processes at surfaces (2012) (Springer-Verlag, in press).
3. *Molecular dynamics study of hydrogen atom recombination over silica, based on a new analytical DFT potential energy surface*
P. Gamallo, M. Rutigliano, S. Orlandini, M. Cacciatore, R. Sayós.
Proceedings of the 28th International Symposium on Rarefied Gas Dynamics. AIP Conference Proceedings (July, 2012) (in press).
4. *Assaig sobre una manera de determinar les masses relatives de les molècules elementals dels cossos, així com de les proporcions amb què entren en aquests compostos, d'Amedeo Avogadro.*
Xavier Giménez, Pere Alemany.
Clàssics de la Química 6 (2012) (Societat Catalana de Química, Barcelona) .
5. *Les sortides de camp com a recurs en educació química: itinerari ambiental de Castellciuró a Santa Creu d'Olorda.*
Francesc Centellas, Montserrat Inglés, Laura Rosell, Enric Brillas, Robert Cruañas, Montserrat Cruells i Xavier Giménez.
IV Jornades sobre l'Ensenyament de la Química, Societat Catalana de Química. Barcelona, 2012.
6. *Dynamics of Alkali Ions-Neutral Molecules Reactions: Radio Frequency-Guided Beam Experimental Cross-Sections and direct Quasiclassical Trajectory Studies.*
J. Aguilar, J. de Andrés, J.M. Lucas, M. Albertí, F. Huarte-Larrañaga, D. Bassi and A. Aguilar.
28th International Symposium on Rarefied Gas Dynamics, M. Mareschal and A. Santos, eds. (AIP Conference Proceedings, Melville, NY, 2013)

III.3 ALTRES ACTIVITATS

TESIS DOCTORALS 2012

1. *Propietats magnètiques i transport quàntic en imants unimoleculars: Un estudi teòric.*
Eduard Cremades Martí
Facultat de Química, Universitat de Barcelona.
Gener 2012.
2. *Study of molecular mechanisms in glycoside hydrolases and transferases by ab initio molecular dynamics.*
Albert Ardèvol Grau
Facultat de Ciències, Universitat Autònoma de Barcelona.
Gener 2012.
3. *QM/MM investigation of the reaction mechanism of the NS3/NS4A hepatitis C protease with its main substrates.*
Alejandro Rodríguez García
Facultat de Química, Universitat de Barcelona.
Abril 2012.
4. *Aplicació i desenvolupament de mètodes mecano- quàntics multiconfiguracionals per a l'estudi de reaccions químiques.*
Marc Moix Teixidor
Facultat de Química, Universitat de Barcelona.
Octubre 2012.
5. *Medidas de forma y simetría en compuestos con número de coordinación elevados y clústeres de alta nuclearidad.*
Antonio Ruiz Martínez
Facultat de Química, Universitat de Barcelona.
Novembre 2012.

6. *Active e-learning and a distributed computing approach to the simulation of chemical reactions.*

Oswaldo Gervasi

Facultat de Química, Universitat de Barcelona.

Novembre 2012.

7. *Complejación y activación de moléculas diatómicas en sistemas biomiméticos.*

Benjamin Peigné

Facultat de Química, Universitat de Barcelona.

Novembre 2012.

MÀSTERS 2012

1. *Estudio teórico de la formación de dímeros derivados del TTF en clips moleculares a temperatura ambiente.*

Maria Fumanal Quintana

Facultat de Química, Universitat de Barcelona.

Setembre 2012.

2. *Química Teórica y Computacional y Estudio Monte Carlo de la difusión 2D en medios densos.*

Santiago Alonso Gil

Facultat de Química, Universitat de Barcelona.

Setembre 2012.

PARTICIPACIÓ A CONGRESSOS 2012

2nd International Symposium on Intermetallic Compounds in Methanol Steam Reforming Munich (Alemanya)

First-principles modelling of catalytically relevant surface alloys: PdAg, PdAu and AuAg
(Oral)

K.M. Neyman

Arrangement of components in intermetallic PdZn films on Pd(111) modified by CO adsorption (Oral)

S.M. Kozlov, C. Weilach, G. Rupprechter, K.M. Neyman

Structure and stability of PdAu bimetallic nanocrystallites under hydrogenation conditions: A DFT study (Oral)

I.V. Yudanov, K.M. Neyman

5th International Conference on Molecular Materials (MOLMAT) Barcelona (Espanya)

A Novel Metal-free Full Organic Magnet (Poster)

S. Latorre, I. de P. R. Moreira, J. M. Bofill, F. López-Calahorra

Study of magneto-structural correlations of ferromagnetic triply heterobridged dinuclear copper(II) compounds" (Poster)

R. Costa, I. de P. R. Moreira, F. Illas, N. Wannarit, C. Pakawatchai, S. Youngme

Stereochemical Analysis of Coordination Spheres with Shape 2.0 (Oral)

S. Alvarez

7th International Conference on Surfaces, Coatings and Nanostructured Materials (NANOSMAT) Praga (República Txeca)

Alkaline Doping Causes Disruption Through the Chemical Environment and Electronic Structure in Anodic p-Type Cu₂O Films (Poster)

F. Caballero-Briones, A. Palacios-Padrós, O. Calzadilla, I. de P. R. Moreira, F. Sanz

8th Congress on Electronic Structure: Principles and Applications (ESPA 2012) Barcelona (Espanya)

President del congrés

J.J. Novoa

Comité Científic

F. Illas, J.J. Novoa, S. Álvarez

Membre del comitè organitzador

C. Sousa, I. de P. R. Moreira, R. Sayós, F. Mota, M. Deumal, J. Ribas, M. Capdevila, S.

Vela, A. Bruix

Photocycle of the light-induced spin-crossover process in the [Fe(bpy)₃]²⁺ complex (Poster)

C. Sousa

Exchange Coupling in Chalcopyrite (CuFeS₂): A DFT+U Study (Poster)

S. Conejeros, P. Alemany, M. Llunell, I. de P. R. Moreira

Synthesis of new molecules without metallic atoms with magnetic properties (Poster)

C. Heras, S. Latorre, F. López-Calahorra, J. M. Bofill, I. de P. R. Moreira

Quasiclassical trajectory dynamics study of O/O₂ collisions over a clean/O-preadsorbed graphite (0001) surface with a new FPLEPS potential energy surface

P. Gamallo, V. Morón, L. Martin-Gondre, R. Sayós

Nature of the electronic correlation in DFT (Poster)

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

Interaction of metal on son gold surfaces

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

Molecular Dynamics Simulation and Free Energy Calculation Studies of the Binding Mechanism of Inhibitors with B-Raf Kinase

Coronel Luis, Granadino-Roldán José Manuel, Tomás M. Santos, Pujol Maria Dolors, Rubio-Martinez Jaime

Towards the design of A Proliferation-Inducing Ligand (APRIL) inhibitors.

González-Mendióroz Maite, Álvarez-Vázquez Ana Belén, Planelles-Carazo Lourdes, Jaime Rubio-Martinez

Computation and rationalization of the photophysical properties of Ir(III) complexes as triplet emitters (Poster)

C. Climent, D. Casanova, P. Alemany, P. Alam, I. R. Laskar

A Continuous Symmetry Measures Analysis of the Electronic Structure in non Planar Conjugated Hydrocarbons (Poster)

P. Alemany, M. Llunell, A. Carreras y D. Casanova

Reactive processes in gas phase i-C₃H₇Cl + Na⁺ collisions. An experimental and theoretical comparison (Poster)

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

8th International Workshop on Oxide Surfaces (IWOX-VIII)

Baqueira-Beret (Espanya)

Modeling and understanding structure and reactivity of ceria well defined surfaces and nanoparticles (Invited Lecture)

F. Illas

11th Greta Pifat-Mrzljak International School of Biophysics

Primosten (Croàcia)

The reaction of the hepatitis C virus NS3/NS4A protease with its main substrate. A QM/MM investigation

J.A. Martínez, R. Martínez, M.P. Puyuelo, L. Masgrau, M. González

13-th V.A. Fock Meeting on Quantum and Computational Chemistry

Astana (Kazajstan)

Continuous Symmetry Measures: Definition and Applications in Theoretical Chemistry

P. Alemany

14th International Congress of Quantum Chemistry

Boulder (EUA)

Implementation and applications of the RASCI method with various spin-flip excitations: radicals, excited states, avoided crossings, conical intersections and more

D. Casanova.

15th International Congress on Catalysis

Munich (Alemanya)

O₂ activation by Ag impurities and CO oxidation on nanoporous gold. A computational study (Poster / Oral)

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

CO induced reconstruction of PdZn surface alloys (Poster)

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

Towards realistic models of nanostructures in catalysis described from first principles (Poster / Oral)

K.M. Neyman

24th American Chemical Society National Meeting

Philadelphia (EUA)

Bases and Features of the Potential Energy Surface and Reaction Path Models, their Extensions and Beyond

Josep Maria Bofill Villà, Wolfgang Quapp, Marc Caballero

Moving on Strongly Correlated Potential Surfaces: Are there Alternatives to CAS-SCF

Peter Pulay, Josep Maria Bofill Villà

26th International Carbohydrate Symposium

Madrid (Espanya)

The molecular mechanism of enzymatic glycosyl transfer with retention of configuration: evidence for a short-lived oxocarbenium ion-like species

C. Rovira

28th International Symposium on Rarefied Gas Dynamics (RGD 28)

Zaragoza (Espanya)

Dynamics of Alkali Ions-Neutral Molecules Reactions: Radio Frequency-Guided Beam Experimental Cross-Sections and Direct Quasiclassical Trajectory Studies

J. Aguilar, J. de Andrés, J.M. Lucas, M. Albertí, F. Huarte-Larrañaga, D. Bassi and A.Aguilar

Cross Section Measurements for Dissociative and Charge-Transfer Collisions Between Sodium Ions and ZnBr₂ Molecules

J. de Andrés, J.M. Lucas, M. Albertí, J.M. Bofill, A.Aguilar

Dynamics of Alkali Ions-Neutral Molecules Reactions: Radio Frequency-Guided Beam Experimental Cross-Sections and direct Quasiclassical Trajectory Studies.

J. Aguilar, J. de Andrés, JM. Lucas, M. Albertí, F. Huarte-Larrañaga, D. Bassi ,A. Aguilar.

Aalto Complex Networks Workshop

Sannäs Manor, Porvoo (Finlàndia)

Networks meet Geometry: the S1 model

M.A. Serrano, D. Krioukov, M. Bogunýà

Advances in Quantum Chemistry: Interfacing electronic structure with dynamics

University of Minnesota, Minneapolis (EUA)

How does nature break and form glycosidic bonds: QM/MM metadynamics investigations

C. Rovira

CECAM-Workshop: Enhancing Organocatalysis by Joining Advanced Theoretical and Experimental Approaches

Lugano (Suïssa)

Unravelling the Reaction Mechanism of Proline-Catalyzed Asymmetric Aldol Reactions in Water (Invited talk)

J.Ribas

CECAM-Workshop: Theoretical Challenges in Electronic Structure of Clusters and Nanoparticles

Lausanne (Suïssa)

Nanoclusters: real and hypothetical building blocks (Invited)

S. T. Bromley

CECAM-Workshop: "Modelling realistic inorganic nanostructures: Bridging the gap between theory and experiment"

Zaragoza (Espanya)

Density functional studies of ceria nanostructures relevant for catalysis and beyond (Invited lecture)

K.M. Neyman, S.M. Kozlov

Realistic first principles description of Pd nanoparticles applied in catalysis and energy technologies (Invited lecture)

H.A. Aleksandrov, S.M. Kozlov, K.M. Neyman

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

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

Electronic structure and absolute energies of steps on CeO₂(111) (Poster)

S.M. Kozlov, F. Viñes, K. M. Neyman

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

I. Demiroglu, S. T. Bromley

COST Redox General Meeting 2012,

Prague (República Txeca)

Exploring the electronic structure and optical excitations of F-doped TiO₂: Relevance to Photocatalysis (Invited Lecture)

F. Illas

Crystal Forms at Bologna: 6th Bologna Convention on Crystal Forms

Bologna (Itàlia)

Theoretical studies of the properties of bistable molecular crystals using first-principles methods. (Invited talk)

J.J. Novoa

Departamento de Física de la Materia Condensada Universidad de Zaragoza

Zaragoza (Espanya)

Modelización Computacional de Sistemas Magnéticos Moleculares

E. Ruiz

Dust in core-collapse supernovae near and far: understanding its formation and evolution

Monte Verità, Ascona (Suïssa)

A Bottom-up Approach to Dust Structure, Properties and Nucleation: Nano-silicates (Invited)

S. T. Bromley

Energy from the Sun: Computational Chemists and Physicists Take up the Challenge

Cagliari (Itàlia)

A computational investigation of organic dye-sensitized solar cells: the cyclopentadithiophene linker (Poster)

C. Climent, D. Casanova.

The conjugated linker's role in D- π -A organic dyes: a computational study (Poster)

D. Casanova, C. Climent.

Equifases

Concepción (Xile)

Interpretation of multisite binding to macromolecules and functionalized particles in terms of the microscopic equilibrium constants

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

Esmolna

Cuenca (Espanya)

Mononuclear Transition Metal Complexes: A Simple Alternative

E. Ruiz.

European Conference on the Dynamics of Molecular Systems (MOLEC 2012)

Oxford (Anglaterra)

Theoretical study of the dynamics and kinetics of the $O + CS \rightarrow CO + S$ chemical laser reaction, where CO shows a very high vibrational excitation

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

The dynamics of the $O(^3P) + CH_4 \rightarrow OH + CH_3$ reaction is similar to that of a triatomic reaction

R. Martínez, P.A. Enríquez, M.P. Puyuelo, M. González

Anatomy of the $OH + D_2 \rightarrow HOD(v_1', v_2', v_3') + D$ benchmark reaction from molecular beams and QCT-GB calculations

J.D. Sierra, D.R. Albert, H.F. Davis, L. Bonnet, M. González

Detailed resonance analysis in the $Ne + H_2^+(v_0=2, j_0=1) \rightarrow NeH^+(v'=0, j') + H$ proton transfer reaction. A challenge for experiment

P. Gamallo, F. Huarte-Larrañaga, M. González

Theoretical study of the dynamics and kinetics of the $O + CS \rightarrow CO + S$ chemical laser reaction, where CO shows a very high vibrational excitation

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

Detailed resonance analysis in the $Ne + H_2^+(v_0=2, j_0=1) \rightarrow NeH^+(v'=0, j') + H$ proton transfer reaction. A challenge for experiment.

P. Gamallo, F. Huarte-Larrañaga, M. González

First International Training School on NanoAlloys (ISNA)

Tirrenia, Pisa (Itàlia)

Realistic models of palladium nanoparticles for hydrogen storage (Poster)

H.A. Aleksandrov, S.M. Kozlov, K.M. Neyman

Arrangement of components in PdZn surface nanoalloy films on Pd(111) modified by CO adsorption (Poster)

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

First Ph. D. Workshop of the European Doctorate in Theoretical Chemistry and Computational Modeling

Barcelona (Espanya)

Nanoeffects on properties of model catalytic systems: Intermetallic PdZn films on Pd(111)
(Oral)

S.M. Kozlov

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

I. Demiroglu, S. T. Bromley

FunMol CECAM Bonn

Mononuclear Transition Metal Complexes: A Simple Alternative

E. Ruiz

General Meeting of the COST Action CM1104 "Reducible oxide chemistry, structure and functions"

Charles University, Praga (República Txeca)

Recent progress in density functional studies of ceria-based nanostructures (Oral)

K.M. Neyman

Adsorption induced rearrangement of PdZn surface alloys (Poster)

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

HPC-Europa2 Transnational Access Meeting (TAM)

Amsterdam (Països Baixos)

Modification of palladium nanoparticles by the surface and subsurface H and C species
(Oral)

H.A. Aleksandrov, K.M. Neyman

The effect of mono- and multivalent ions on the electrostatic properties of a charged spherical colloid. Molecular dynamics study (Oral)

M. Nedyalkova, S. Madurga

ICIQ Tarragona

Single Ion Magnets based on 3d Metal Atoms: Analysis and New Candidates

E. Ruiz

ICMM-2012 (13th International Conference on Molecule-based Magnets)

Orlando (EUA)

Bistability in the TTTA molecule-based magnet. (Contributed talk)

J.J. Novoa

Innovación docente en Química (INDOQUIM 2012)

Barcelona (Espanya)

Programas educativos de equilibrio de fases bajo la plataforma del Campus Virtual. Sistemas de un componente
S. Madurga, F. Mas, J. Ignés

In Silico Enzyme Design and Screening

International Centre for Theoretical Physics, Trieste (Itàlia)

Molecular dynamics based studies on human DPP III revealed determinants for its broad substrate selectivity
S. Tomić, A. Tomić, M. González

International Conference on Mathematical Methods in Science and Engineering (CMMSE 2012): Minisymposium on “From clusters to the solid state”

La Manga, Murcia (Espanya)

Prediction of Stable Low Density Materials Inspired by Nanocluster Building Block Assembly (Invited)
S. T. Bromley

International Congress of the Spanish Biophysical Society (SBE-12)

Barcelona (Espanya)

Effect of mixed crowding media on the diffusion of alpha-chymotrypsin
I. Pastor, E. Vilaseca, S. Madurga, J.L. Garcés, M. Cascante, F. Mas

Fractal trajectory of a diffusing particle in 2D crowded media investigated by Monte Carlo simulations
L. Pitulice, E. Vilaseca, A. Isvoran, S. Madurga, I. Pastor, J.L. Garcés, F. Mas, F

Diffusion of particles with physiological molecular weights within extracellular gels used in 3D cultures
R. Galgoczy, I. Pastor, A. Colom, A. Giménez, F. Mas, J. Alcaraz

International School of Quantum Electronics: 53rd Course Molecular Physics and Plasmas in Hypersonics II

Erice (Itàlia)

Molecular reaction dynamics at surfaces
R. Sayós

International workshop “Understanding Chemical Reactivity: from modeling to experiment”

Bilbao (Espanya)

Understanding dehydrohalogenations reactions induced by alkali ions: Experimental and Theoretical reaction dynamics studies
J. Aguilar, J.M. Lucas, F. Huarte-Larrañaga, M. Albertí, J. de Andrés and A. Aguilar

IX International Conference on “Mechanisms of Catalytic Reactions” (MCR-2012)

St. Petersburg (Rússia)

Catalysis from first principles: Is it crucial to account for the effects of nanostructuring?
(Keynote lecture)
K.M. Neyman

Joint Working Group Meetings of the COST-MP0903 Action "Nanoalloys as Advanced Materials: From Structure to Properties and Applications"

Antalya (Turquia)

Comparison between Pd-based intermetallic compounds and bimetallic alloys using density functional methods (poster)
S.M. Kozlov, K.M. Neyman

Materials Chemistry Consortium Meeting 2012

University College London, London (Regne Unit)

Combinatorial Complexity in Nanosystems (Invited)
S. T. Bromley

Master Química V

Barcelona (Espanya)

Estudi Montecarlo de la difusió 2D en medis densos
S. Alonso, I. Pastor, S. Madurga, F. Mas, E. Vilaseca

Mesilla Chemistry Workshop Ligand-Based Control of Spin and Reactivity in Metal Complexes

Mesilla (Mèxic)

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

National Institutes of Health Seminars

Washington DC (EUA)

Multireference systems with a single reference method: avoided crossings, conical intersections, multiradical character and more.
D. Casanova.

NoSIC-5 (Not Strictly Inorganic Chemistry)

Prullans de Cerdanya (Espanya)

Chemistry and Poetry in Raymond Queneau's Cosmography
S. Alvarez.

Quantum Chemistry in the Solid State: Magnetic Coupling and Excited States on the Occasion of the 60th Birthday of Prof. Ria Broer

Groningen (Països Baixos)

The light-induced spin-crossover process in the [Fe(bpy)₃]²⁺ complex (Invited Lecture)

C. Sousa

Quantum Days in Bilbao 2012: “Understanding Chemical Reactivity: from modeling to experiment”

Universitat del País Basc, Bilbao (Espanya)

A quantum MCTDH study of H₂ confined in a SWCNT.

J. Suárez, F. Huarte-Larrañaga

Understanding dehydrohalogenations reactions induced by alkali ions: Experimental and Theoretical reaction dynamics studies

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

RGD28: 28th International Symposium on Rarefied Gas Dynamics

Zaragoza (Espanya)

Molecular dynamics study of hydrogen atomic recombination over silica based on a new analytical DFT potential energy surface

P. Gamallo, M. Rutigliano, S. Orlandini, M. Cacciatore, R. Sayós

Satellite Workshop “In situ spectroscopy and model catalysis” of the 15th International Congress on Catalysis

Kloster Andechs / Munich (Alemanya)

First-principles modelling of nanostructures in catalysis and energy technologies (invited lecture)

K.M. Neyman

SPIE OPTO Oxide-based Materials and Devices III

Moscone Center, San Francisco (EUA)

Structure and properties of nano-oxides: a theoretical overview (Invited)

S. T. Bromley

University of Assiut

(Egipte)

Theoretical Approach to Molecular Magnetism

E. Ruiz

University of Sohag

(Egipte)

Theoretical Approach to Molecular Magnetism

E. Ruiz.

VI European Workshop on Molecular Magnetism (JUJOLS VI)

Sevilla (Espanya)

Bistability in molecule-based magnets. The TTTA case. (Invited talk)

J.J. Novoa

Photocycle of the light-induced spin-crossover process in the $[Fe(bpy)_3]^{2+}$ complex (Contributed Lecture)

C. Sousa

VII Trobada de Joves Investigadors dels Països Catalans

Palma de Mallorca (Espanya)

Estudi computacional de colorants orgànics per la millora de l'eficiència de cel·les solars de Grätzel: el pont ciclopentadienfè (CPDT)

C. Climent

Ab-initio i dinàmica directa en la reacció $i-C_3H_7Cl + Na^+$

J. Aguilar, E. López, J.M. Lucas, F. Huarte-Larrañaga, M. Albertí, J. De Andrés and A. Aguilar

Dinàmica de la reacció entre $i-C_3H_7Br$ i Li^+

E. López, J. Aguilar, J. De Andrés, J.M. Lucas, M. Albertí and A. Aguilar

Natura de la correlació electrònica en DFT: de les molècules senzilles als complexos de titani

Marc Caballero, Iberio de P.R. Moreira, Josep Maria Bofill

Winter Modeling: Special Edition, A workshop to celebrate Prof. Vincenzo Barone on the Occasion of his 60th Birthday

Pisa (Itàlia)

A quantum leap on surface modeling: from atoms on graphite to Pt nanoparticles on ceria (Invited Lecture)

F. Illas

Workshop on 'Nano-biocolloidal materials and non-equilibrium self-assembly'

Barcelona (Espanya)

Diffusion in macromolecular crowded media: Monte Carlo simulation of obstructed diffusion vs. FRAP experiments

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

Workshop on High-Dimensional Quantum Dynamics.

University of Birmingham, Birmingham (Regne Unit)

H₂ confined in CNTs: A Full Quantum 5-D study.

J. Suárez, F. Huarte-Larrañaga

World Resources Forum 2012

National Conference Center, Beijing (Xina)

Nanoscale Ceria: What Can Computational Modelling Tell Us? (Keynote)
S. T. Bromley

X Girona Seminar on Theoretical and Computational Chemistry for the Modeling of Biochemical Systems: From Theory to Application

Universitat de Girona, Girona (Espanya)

How does nature break and form glycosidic bonds
C. Rovira

XIII Escuela Nacional de Materiales Moleculares

Peñíscola (Espanya)

Theoretical studies of the properties of bistable molecular crystals using first-principles methods. (Invited talk)
J.J. Novoa

XVIII Congreso de Física Estadística, FisEs'12

Palma de Mallorca (Espanya)

Networks meet Geometry: the S1 model and beyond
M.A. Serrano, M. Bogunyà

XV International Symposium on Luminescence Spectrometry (ISLS2012)

Barcelona (Espanya)

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

XXIII Sitges Conference: Understanding and Managing Randomness in Physics, Chemistry and Biology

Sitges (Espanya)

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

XXVIII Reunió Anual de la Xarxa de Referència R+D+i en Química Teòrica i Computacional

Barcelona (Espanya)

The key role of thermal fluctuations on the magnetic properties of the TTTA crystal. (Contributed talk)
S. Vela

Electronic structure and stability of steps on CeO₂(111) (Oral)
S.M. Kozlov, F. Viñes, K.M. Neyman

Estudi Montecarlo de la difusió 2D en medis densos

S. Alonso, I. Pastor, S. Madurga, F. Mas, E. Vilaseca

Estudi computacional de les propietats fotofísiques de complexos d'Ir(III)

C. Climent, D. Casanova, P. Alemany, P. Alam, I. R. Laskar

Experimental and theoretical dynamics study of the $i\text{-C}_3\text{H}_7\text{Cl} + \text{Li}, \text{Na}, \text{K}$ ions reactions

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

Hydrogen confined in SWCNTs: Anisotropy effects on rovibrational quantum levels.

J. Suárez, F. Huarte-Larrañaga

Bandgap Engineering on Graphene (Invited talk)

F. Viñes

XXXII Reunión del Grupo de Electroquímica de la Real Sociedad Española de Química

Miraflores de la Sierra (Espanya)

Películas delgadas de CuO dopadas con iones alcalinos mediante anodización de Cu.

Estudio experimental y teórico de sus propiedades optoelectrónicas

F. Caballero-Briones, A. Palacios-Adrós, O. Calzadilla, I. de P. R. Moreira, F. Sanz
(Poster)

XXXVIII Congreso de Químicos Teóricos de Expresión Latina

Natal (Brasil)

*Towards the ab initio modeling of complex systems: Pt nanoparticles supported on ceria
(Invited Lecture)*

F. Illas

ESTADES EN CENTRES EXTERNS

- C. Sousa **University of Groningen, Groningen (Països Baixos)**
Professora visitant invitada, Department of Chemical Physics and Zernike Institute for Advanced Materials. Gener 2012.
- P. Alemany **Universidad Católica del Norte, Antofagasta (Chile)**
Professor visitant invitat, Departamento de Ciencias Químicas y Farmacéuticas. Març 2012.
- M. Albertí **Università di Perugia, Perugia (Itàlia)**
Professora visitant invitada, Dipartimento di Chimica. Març-Juny 2012.
- A. Carreras **UCLA, Los Angeles (EUA)**
Estada predoctoral, Department of Chemistry and Biochemistry. Maig-Juliol 2012.
- M. Llunell **Università degli Studi di Torino (Itàlia)**
Professor visitant invitat, Dipartimento di Chimica. Juny 2012.
- K.M. Neyman **Universität Erlangen-Nürnberg, Erlangen (Alemanya)**
Investigador visitant invitat Alexander von Humboldt, Department of Chemistry and Pharmacy. Juliol-Agost 2012.
- G. Aullón **Universidad de Concepción (Chile)**
Professor visitant invitat, Centro de Biotecnología. Curs de 20 hores "Teoría del Funcional de la Densidad Aplicada al Estudio de la Estructura Electrónica, la Reactividad y la Caracterización de Compuestos Químicos". Agost 2012.

PARTICIPACIÓ EN PROJECTES D'INVESTIGACIÓ _____

Theoretical study of tunable photomagnetic compounds

Ria Broer, Universitat de Groningen i Universitat de Barcelona

08PR2650, 2009-2013

Nederlandse organisatie voor toegepast natuurwetenschappelijk onderzoek TNO (The Netherlands)

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

Fisicoquímica de sistemes macromoleculars 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

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

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

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

Ajuts de suport als grups de recerca de Catalunya

Marta Cascante Serratosa, Universitat de Barcelona

2009SGR-1308, 2009-2013

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

Grup d'Estructura Electrònica

Santiago Alvarez Reverte, Universitat de Barcelona

2009SGR-1459, 2009-2013

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

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

Planetary entry integrated models (Phys4Entry)

Ramón Sayós Ortega, Universitat de Barcelona i Mario Capitelli, Universitat Bari (Itàlia)

242311, 2010-2014

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

Xarxa de Referència d'R+D+I en Química Teòrica i Computacional (XRQTC)

Francesc Illas Riera, Universitat de Barcelona

306261, 2011-2012

Departament d'Innovació, Universitats i Empresa. Generalitat de Catalunya

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

Stefan T. Bromley, Universitat de Barcelona

A e-GAP2 Project, 2010-2012

Cellular structure, networks and motifs

Ramon Reigada Sanz, Universitat de Barcelona

BFU2010-21847-C02-02, 2011-2013

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

Nuevos métodos de RMN y nuevos conceptos para el estudio de biomoléculas con interacciones dinámicas implicadas en la señalización.

Miquel Pons Vallés, Universitat de Barcelona

BIO2010-15683, 2011-2013

Ministerio de Ciencia e Innovación (MCI)

The Chemical Cosmos: Understanding Chemistry in Astronomic Environments

Stefan T. Bromley, Universitat de Barcelona

CM0805, 2010-2013

European Framework for Cooperation in Science and Technology (COST)

Nanoalloys as advanced materials: from structure to properties and applications

Konstantin Neyman (representant d'Espanya, líder Grup de Treballa "Catàlisi"), Francesc Illas Riera (representant adjunt), Universitat de Barcelona

MP0903, 2010-2014

European Framework for Cooperation in Science and Technology (COST)

Network for intermetallic compounds as catalysts for steam reforming of methanol

Konstantin Neyman, Universitat de Barcelona (representant d'Espanya)

CM0904, 2010-2014

European Framework for Cooperation in Science and Technology (COST)

Reducible oxide chemistry, structure and functions

Francesc Illas Riera, (representant d'Espanya), Konstantin Neyman (representant adjunt), Universitat de Barcelona

CM1104, 2012-2016

European Framework for Cooperation in Science and Technology (COST)

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)

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)

Dinámica cuántica de reacciones en sistemas poliatomicos y modelización de fisisorción de gases en nanoestructuras

Fermin Huarte Larrañaga, Universitat de Barcelona

CTQ2009-12215/BQU, 2010-2013

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)

Estructura y Dinámica de Reacciones Químicas, Mediante Modelos Extendidos de Camino de Reacción y la Teoría de la Función de Onda

Josep Maria Bofill Villà, Universitat de Barcelona

CTQ2011-22505, 2012-2014

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

Estructura electrónica y propiedades de moléculas y sólidos inorgánicos

Eliseo Ruiz Sabin, Universitat de Barcelona

CTQ2011-23862-C02, 2012-2014

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

Estructura electrónica y propiedades de moléculas y sólidos inorgánicos

Pere Alemany i Cahner, Universitat de Barcelona

CTQ2011-23862-C02-02, 2012-2014

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

Estudio teórico de reacciones de oxidación iniciadas por HO, O₃ y NO₃

Josep Maria Anglada Rull, CSIC

CTQ2011-27812, 2012-2014

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

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

Miguel González Pérez, Universitat de Barcelona

CTQ2011-27857-C02-01, 2012-2014

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

Diseño asistido por ordenador y síntesis de nuevos inhibidores enzimáticos de naturaleza heterocíclica con potencial actividad antitumoral

Jaime Rubio Martínez, Universitat de Barcelona

CTQ2011-29285-C02-02, 2012-2014

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

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

Francesc Illas Riera, Universitat de Barcelona

FIS2008-02238, 2009-2013

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

Design of Thin-Film Nanocatalysts for On-Chip Fuel Cell Technology (chipCAT)

Konstantin M. Neyman, Universitat de Barcelona

FP7-NMP-2012-SMALL-6-310191, 2012-2016

European Commission Framework Programme 7

Assessorament en projectes de fotocàtálisis

Francesc Illas i Riera

INAEL, 2011-2012

Propiedades magnéticas y transformaciones de fase en cristales con propiedades de interés tecnológico.

Juan J. Novoa Vide, Universitat de Barcelona

MAT2011-25972.2012, 2012-2014

Ministerio de Economía y Competitividad

Nanostructured materials for solid-state hydrogen storage

Konstantin Neyman, Universitat de Barcelona

MP1103, 2011-2015

European Framework for Cooperation in Science and Technology (COST)

Metabolic Flux Analysis and Cancer (METAFLUX)

Marta Cascante Serratosa, Universitat de Barcelona

PITN-GA-2010-264780, 2010-2014

Comissió Europea (FP7-People)

India-Spain bilateral Project on Theoretical and computational investigation of molecular magnets and extended systems as candidates of exotic nanomaterials with useful properties

Francesc Illas Riera, Universitat de Barcelona

PRI-PIBIN-2011-1028, 2012-2014

Ministerio de Economía y Competitividad

Desarrollo de modelos para el estudio del almacenamiento de hidrógeno en nanoestructuras metálicas mediante la Teoría del Funcional de la Densidad

Konstantin Neyman, Universitat de Barcelona

SB2010-0172, 2011-2012

Ministerio de Educación (MEDU)

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

Francesc Illas Riera, Universitat de Barcelona

2012

Universitat de Barcelona

Divulgació de la Química Teòrica i Computacional a l'Ensenyament Secundari.

Josep Maria Bofill Villà, Universitat de Barcelona

2012

Secretaria d'Universitats i Recerca del Departament d'Economia i Coneixement,
Generalitat de Catalunya

