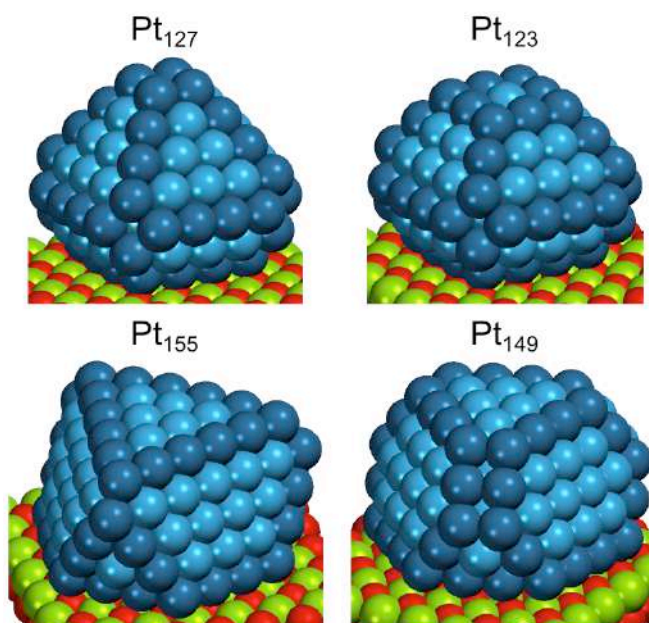


Institut de Química Teòrica i Computacional de la Universitat de Barcelona (IQTCUB)





L'Institut de Química Teòrica i Computacional de la Universitat de Barcelona (IQTCUB) és un dels instituts de recerca propis d'aquesta universitat; 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 com es el cas del *Marenostrum*, ordinador del *Barcelona Supercomputing Center*, ó els superordinadors del Centre de Supercomputació de Catalunya (CESCA) que molts equips de l' IQTCUB empen quasi bé diàriament. 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.

Els darrers anys hem viscut una situació econòmica difícil i complicada i per aquest motiu el suport institucional de la Universitat de Barcelona a través del Vicerectorat de Recerca, mereix ser agraït especialment car ha permès mantenir i millorar la 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 segueix 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 d'aquest institut de recerca. L'any 2013 representa també un final de cicle ja que acaba el meu primer mandat com a Director de l'Institut. En els propers anys esperem mostrar que el projecte mereix seguir tenint la confiança de la institució i mantenir el nivell científic, ben palès a l'avaluació externa que podeu consultar a la nostra pàgina web.

A handwritten signature in blue ink, consisting of several overlapping loops and lines.

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	19
II.1 Activitats de tipus general	19
II.2 Seminaris i conferències de l'IQTCUB	22
II.3 Investigadors convidats per l'IQTCUB	24
III. ACTIVITAT CIENTÍFICA DELS MEMBRES DE L'IQTCUB	27
III.1 Resultats més rellevants	27
III.2 Llista de publicacions	44
Articles publicats	
Capítols de llibres i proceedings	
III.3 Altres activitats	55
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 77 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	Química Orgànica

Investigadors Postdoctorals*Juan de la Cierva*

Pastor del Campo	Isabel	Química Física
Viñes Solana	Francesc	Química Física
Jover Modrego	Jesús	Química Inorgànica

Ramón y Cajal

Casanova Casas	David	Química Física
Ribas Ariño	Jordi	Química Física

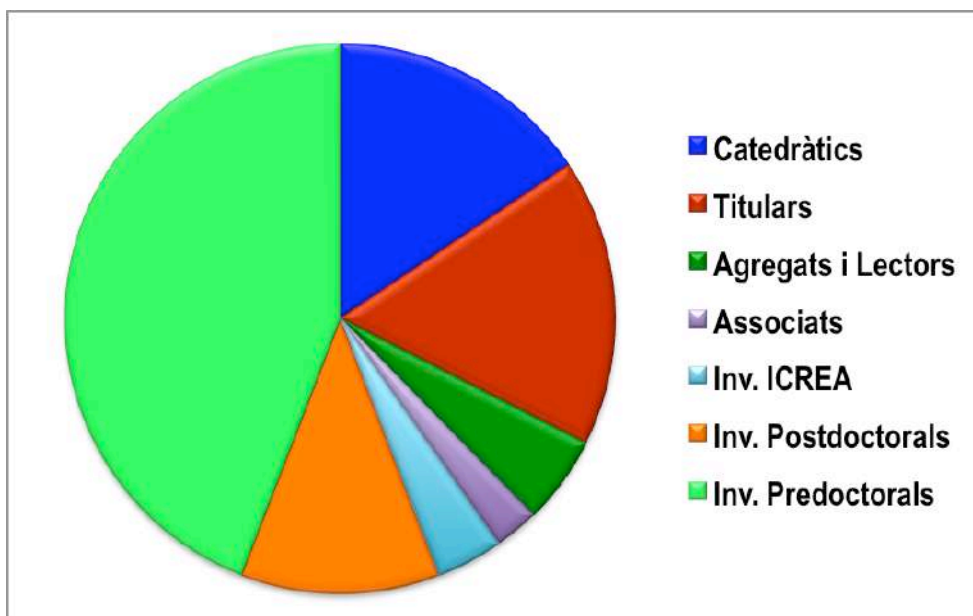
Altres

Álvarez Falcón	Leny	Química Física
Dos Santos Politi	Jose Roberto	Química Física
Kovács	Gábor	Química Física
Tosoni	Sergio	Química Física

Investigadors Predoctorals*Beca FPI*

Aguilar Fargas	Javier	Química Física
Alonso Gil	Santiago	Química Orgànica
Bruix Fusté	Albert	Química Física
Caballero Puig	Marc	Química Física
Carreras Conill	Abel	Química Física
Climent Biescas	Clàudia	Química Física
Falceto Palacín	Andrés	Química Inorgànica
Jurado Sáez	Manuel	Química Física

Vela Llausi	Sergi	Química Física
Vilà Casanova	Arnau	Química Física
<i>Beca FPU</i>		
Capdevila Cortada	Marçal	Química Física
Gómez Coca	Silvia	Química Inorgànica
Kozlov	Sergey M.	Química Física
Rojas Cervellera	Victor	Química Orgànica
<i>Beca UB</i>		
Fumanal Quintana	Maria	Química Física
Lamiel Garcia	J. Oriol	Química Física
<i>Beca FI</i>		
López Marne	Estefanía	Química Física
<i>Altres</i>		
Aravena Ponce	Daniel	Química Inorgànica
Balcells Nadal	Cristina	Química Física
Cremades Martí	Eduard	Química Inorgànica
Conejeros Espíndola	Sergio	Química Física
Demiroglu	Ilker	Química Física
Figueroba Sánchez	Alberto	Química Física
Iglesias Fernández	Javier	Química Orgànica
Maxwell	Lindley	Química Inorgànica
Mondelo Martell	Manel	Química Física
Morales Martínez	Roser	Química Inorgànica
Peigné	Benjamin	Química Inorgànica
Prats Garcia	Hèctor	Química Física
Raich Armendáriz	Lluís	Química Orgànica
Rafels Ybern	Albert	Química Física
Reta Mañeru	Daniel	Química Física
Ruiz Martínez	Antonio	Química Inorgànica
Ruiz Puigdollers	Antonio	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 set clústers de càlcul disposats en dos sales condicionades dins la facultat de Física i Química. L'espai destinat a tots els clúster de càlcul es troba refrigerat per dues màquines d'aire condicionat de 44.000 i 66.000 frigories respectivament. En el cas de iqtc06 es troba a un altre espai refrigerat per una màquina d'aire condicionat de 30.000 frigories.

CLÚSTERS DE CÀLCUL

cerqt2 (valor aproximat 400.000 €)

Tipus de màquina Clúster SUN (4 armaris).

Sistema Operatiu SLES10.

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

Estructura Màster + 111 nodes en clúster.

Comentaris Accessible des del exterior. Conté tant processadors Xeon (32 bits) com Opterons (64 bits), això implica instal·lar aplicacions per 32 i 64 bits. Cada grup és propietari d'alguns nodes en concret. Conté una pantalla+teclat integrada a l'armari per gestionar totes les màquines.

Especificacions

Màster

CPU: Opteron Dual a 1.80GHZ (64bits)

RAM: 8GB

HD: 1 disc de 146GB + cabina discos amb 2.5TB

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

7 nodes 32 bits a 3.06GHZ Sun 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

17 nodes INTEL HP ProLiant DL160 G5
CPU: 2 Xeon QuadCore 2,66GHZ
RAM: 16GB
HD: 2 discos de 250GB
Xarxa: 2 targetes 100/1000 (xarxa interna)
Xarxa d'administració ILO

5 nodes INTEL HP ProLiant DL160 G5
CPU: 2 Xeon QuadCore 2,66GHZ
RAM: 16GB
HD: 4 discos de 250GB
Xarxa: 2 targetes 100/1000 (xarxa interna)
Xarxa d'administració ILO

1 node INTEL HP ProLiant DL160 G5
CPU: 2 Xeon QuadCore 2,66GHZ

RAM: 16GB
 HD: 2 discos de 500GB
 Xarxa: 2 targetes 100/1000 (xarxa interna)
 Xarxa d'administració ILO

3 INTEL HP ProLiant DL160 G5 nodes

CPU: 2 Xeon QuadCore 2,66GHZ
 RAM: 32GB
 HD: 2 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. Forma part del cluster iqtc02.
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:

95 INTEL HP ProLiant DL160 G6 nodes

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

4 INTEL HP ProLiant DL160 G6 nodes

CPU: 2 Xeon SixCore 2,66GHZ
RAM: 48GB
HD: 4 discos de 500GB
Xarxa: 2 targetes 100/1000 (xarxa interna)
Xarxa: 2 targetes Infiniband (xarxa calcul)
Xarxa d'administració ILO

2 INTEL HP ProLiant DL160 G6 nodes

CPU: 2 Xeon SixCore 2,66GHZ
RAM: 48GB
HD: 1 disc de 500GB
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

iqtc06 (valor aproximat 300.000 €)

Tipus de màquina Clúster HP
Sistema Operatiu SLES11.
Serveis Clúster de càlcul.
Estructura 23 nodes en clúster
Comentaris Tots els processadors son de 64 bits
Especificacions:

23 nodes INTEL HP ProLiant DL560 Gen8

CPU: 4 2.2GHZ Xeon OctoCore
RAM: 512GB
HD: 2 discos de 300GB
Xarxa: 4 targetes 100/1000 (xarxa interna)
Xarxa: 2 targetes 10GB (xarxa calcul)
Xarxa d'administració ILO

Clúster GPU (valor aproximat 20.000 €)

<i>Tipus de màquina</i>	Clúster heterogeni
<i>Sistema Operatiu</i>	SLES11.
<i>Serveis</i>	Clúster de càlcul amb GPU
<i>Estructura</i>	23 nodes en clúster
<i>Comentaris</i>	Tots els processadors son de 64 bits
<i>Especificacions:</i>	

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

Node INTEL Tyan FT72B7015

CPU: 2 Xeon SixCore 2,66GHZ
RAM: 48GB
HD: 1 disc dur de 500GB
Xarxa: 4 targetes 100/1000 (xarxa interna)
Xarxa d'administració IPMI

Node

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

Node INTEL ASUS ESC4000 G2

CPU: 2 Xeon SixCore 2GHZ
RAM: 24GB
HD: 1 disc dur de 2TB
Xarxa: 2 targetes 100/1000 (xarxa interna)
Xarxa d'administració IPMI

SERVIDORS**Servidors de discos glusterfs** (valor aproximat: 30.000 €)

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

Node INTEL DELL PowerEdge 2950 III

CPU: 2 Xeon QuadCore E5420

RAM: 8GB

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

Xarxa: 2 targetes 100/1000 xarxa interna

Tipus de màquina Clúster HP

Sistema Operatiu SLES 11

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

Estructura 2 nodes

Comentaris Servei crític amb un sai dedicat i fonts redundants.

Especificacions:

Node INTEL HP ProLiant DL180 G6

CPU: 2 Xeon QuadCore E5520

RAM: 56GB

HD: 12 discs 2TB (raid 5)

Xarxa: 4 targetes 100/1000 xarxa interna

Xarxa d'administracio ILO

Node INTEL HP ProLiant DL380e Gen8

CPU: 2 Xeon QuadCore E5-2407

RAM: 48GB

HD: 12 discs 2TB (raid 5)

Xarxa: 4 targetes 100/1000 xarxa interna

Xarxa d'administracio ILO

Servidors d'entrada portals (valor aproximat 2.300 €)

Tipus de màquina 2 maquines 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

Xarxa d'administracio ILO.

Servidors de virtualització (valor aproximat 18.300 €)

<i>Tipus de màquina</i>	4 màquines redundants
<i>Sistema Operatiu</i>	Debian stable
<i>Serveis</i>	Xenha i tots els serveis virtuals ofertats al IQTCUB
<i>Estructura</i>	4 nodes redundants
<i>Comentaris</i>	Màquina que encabeix les màquines virtuals del IQTCUB (SGE, dhcp, servidor llicències etc.). Suportada per un SAI conjuntament amb portals.

*Especificacions:***2 Nodes INTEL DELL PowerEdge 2950 III**

CPU: 2 Xeon QuadCore E5420

RAM: 8GB

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

Xarxa: 2 targetes 100/1000 xarxa interna

Xarxa d'administració ILO

2 Nodes HP ProLiant DL120 G5

CPU: 1 Xeon Dual Core 2.33GHZ

RAM: 8GB

HD: 2 discos de 160GB (Sistema operatiu)

Xarxa: 2 targetes 100/1000 xarxa interna

Servidor de visualització (valor aproximat 3.000 €)

<i>Tipus de màquina</i>	1 màquina HP ProLiant DL385
<i>Sistema Operatiu</i>	SLES10
<i>Serveis</i>	Màquina per utilització d'aplicacions gràfiques
<i>Estructura</i>	1 màquina
<i>Comentaris</i>	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 publica des de la xarxa del iqtcb).
- Switch Layer 3 HP Procurve de 24 ports (dona cobertura a tota la infraestructura dels CPD del IQTCUB).
- 8 Switchs Layer 2 Dlink de 48 ports (xarxa interna clústers cerqt2, iqtcb01, iqtcb02, iqtcb03).
- 4 Switchs Layer 2 HP de 48 ports (xarxa interna clúster iqtcb04, iqtcb05 i iqtcb06).
- 3 Switchs Infiniband Voltaire de 36 ports (xarxa càlcul iqtcb04).
- Switch modulable HP (8 mòduls per xarxa interna clúster iqtcb01,iqtcb02,iqtcb03).
- 2 Switchs modulables HP 10GB (xarxa interna clúster iqtcb06 i servidors de fitxers)

El valor de l'equipament/maquinari addicional del que disposa l'IQTCUB és d'aproximadament 50.000 €

RESUM DEL POTENCIAL DE CÀLCUL _____

Processadors2788 CPU's

Memòria 18616 GB RAM

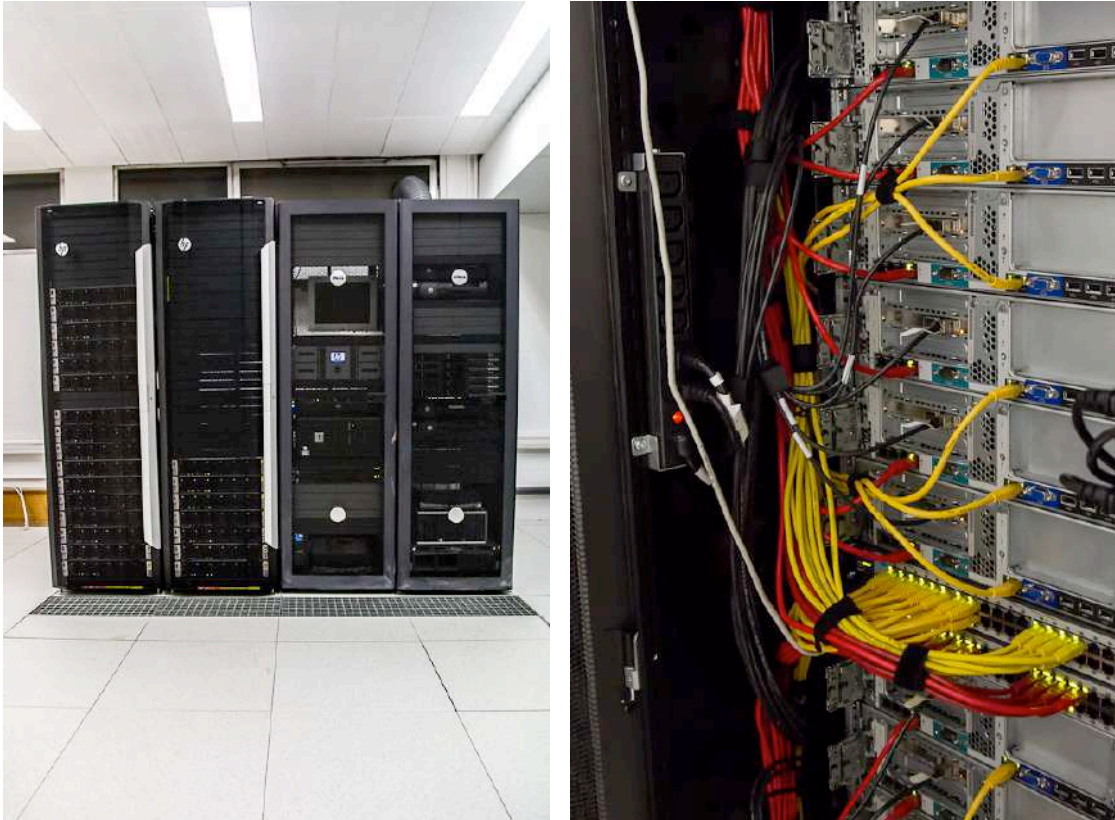
Discs de Càlcul..... 170 TB

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

2.000.000 €*

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



Un dels clústers de càlcul intensiu de l'IQTCUB

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 2013.

- a. *4^a Jornada de l'IQTCUB*. El dia 21 de Juny del 2013 tingué lloc la quarta 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 del professor Piero Ugliengo de la *Universit  di Torino* aix  com els doctors Emilio Mart nez N n ez de la *Universidad de Santiago de Compostela* i Ram n Creuhet de l' *Institut de Qu mica Avançada, CSIC*. Les despeses totals de la Jornada es corresponen al cost de les estades dels Prof. Ugliengo i Dr. Mart nez, juntament amb el servei de c tering per als assistents.
Despesa pressupostada: 1721 €



- b. *Promoci  i incentivaci  a la recerca*. Enguany l'IQTCUB ha concedit un total de quatre *Ajuts d'iniciaci  a la recerca* consistents en beques personals per valor de 2.000 €. 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 realitzaci  d'un m ster oficial de la UB i la col·laboraci  en les tasques de recerca dels grups de l'IQTCUB. Aquestes beques han estat concedides a la senyora Cristina Balcells i als senyors H ctor Prats, Antonio Ru z i Miquel Blancafort.
Despesa associada: 8000 €



- 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. Aquest any se n'ha celebrat la tercera edició amb un gran èxit de participació, rebent prop de 30 sol·licituds d'inscripció. En l'edició d'enguany, celebrada del 25 al 28 de Juny hi participaren 25 alumnes. L'IQTCUB ha destinat un total de 250 € a despeses de càterring durant la realització del curs.
- d. *Curs Avançat de Química Computacional.* Donat l'èxit de l'edició 2012 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 de l'1 al 5 de juliol i ha estat adreçat principalment als alumnes que van cursar el curs d'introducció a la Química Computacional en l'edició de 2012. L'IQTCUB ha destinat un total de 236 € a despeses de càterring durant la realització del curs.



Imatge realitzada 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 2013 i fins a la data, l'IQTCUB ha organitzat un total de catorze seminaris i/o conferències.

- 1. Prof. Henrik Ottoson** (Uppsala University) Suècia
Excited State Aromaticity and Antiaromaticity: Opportunities for Photophysical and Photochemical Rationalizations
16 de Gener de 2013
- 2. Dra. Anapaola Migani** (Centre d'Investigació en Nanociència i Nanotecnologia, CIN2) Espanya
Advanced Modeling of Hole and Acceptor States for Methanol on TiO₂
20 de Febrer de 2013
- 3. Mrs. Miroslava Nedyalkova** (University of Sofia) Bulgària
Molecular dynamics simulation of the spherical electrical double layer of a soft nanoparticle: Effect of the surface charge and counterion valence
1 de Març de 2013
- 4. Prof. José Valderrama** (Universidad de la Serena) Xile
Correlation and Prediction of the Physical and Physicochemical Properties of Ionic Liquids
9 de Maig de 2013
- 5. Prof. Natia Frank** (University of Victoria) Canadà (CONFERÈNCIA MAGISTER)
Open-Shell Organic Electronic Materials
28 de Maig de 2013
- 6. Prof. Ponnadurai Ramasami** (University of Mauritius) Maurici
Computational Chemistry at the Univeristy of Mauritius: Past, Present & Future
4 de Juny de 2013
- 7. Prof. Joan Bertran** (Universitat Autònoma de Barcelona) Espanya (CONFERÈNCIA MAGISTER)

From free energy surfaces to an insight in enzymatic catalysis

27 de Juny de 2013

8. **Dr. Albert Rimola** (Universitat Autònoma de Barcelona) Espanya

Computational modelling of gas-grain chemical processes in the interstellar medium

17 de Juliol de 2013

9. **Dr. Juan M. Randazzo** (Consejo Nacional de Investigaciones Científicas y Técnicas, CONICET) Argentina

Reactive dynamics and bound states study of the $Li^+ + H + H$ system in the Born-Oppenheimer approximation.

11 d'Octubre de 2013

10. **Prof. Sambhu Datta** (Indian Institute of Technology Bombay) Índia

Theoretical Investigation of Magnetic and Conducting Properties of Substituted Silicon Chains: Hydrogen and Oxo-Verdazyl Ligands.

28 d'Octubre de 2013

11. **Prof. Michael Probst** (Universität Innsbruck) Àustria

Some aspects of computational material science with respect to the ITER reactor

4 de Novembre de 2013

12. **Dr. Santiago Schnell** (University of Michigan Medical School) Estats Units

Designing Simulations to Investigate Reactions Inside Cells

12 de Novembre de 2013

13. **Prof. Jean Paul Malrieu** (Université Paul Sabatier) França

Magnetism of polycyclic conjugated hydrocarbons and graphene

15 de Novembre de 2013

14. **Prof. John Plane** (Head of School of Chemistry, University of Leeds) Regne Unit

Meteoric Smoke in the Earth's Upper Atmosphere

21 de Novembre de 2013

II.3 INVESTIGADORS CONVIDATS PER L'IQTCUB

Durant el 2013 el IQTCUB ha acollit un total de setze visites temporals d'investigadors externs.

- 1. Dr. Juan Martín Randazzo** (visitant convidat)
Centro Atómico de Bariloche, Argentina
Gener-Desembre 2013
- 2. Patanachai Janthon** (visitant convidat)
Kasetsart University, Bangkok, Tailàndia
Gener-Maig 2013
- 3. Ichraf Oueslati** (visitant ITN)
Observatoire de Paris – Meudon, Paris, França
Abril-Maig i Desembre 2013
- 4. Julian Gebhardt** (visitant convidat)
Friedrich-Alexander Universität Erlangen-Nürnberg, Alemanya
Abril-Juliol 2013
- 5. Anderson dos Reis Albuquerque** (visitant convidat)
São Paulo University, Brasil
Abril-October 2013
- 6. Miroslava Nedyalkova** (visitant amb programa de mobilitat professors)
Universitat de Sofia, Bulgària
Juny-Juliol 2013
- 7. Prof. Maria Marta Branda** (visitant convidada)
Universidad Nacional del Sur, Argentina
Juliol 2013
- 8. Prof. Georgi N. Vayssilov** (visitant convidat)

Universitat de Sofia, Bulgària

Juliol 2013

9. Dr. Hristiyan A. Aleksandrov (visitant convidat)

Universitat de Sofia, Bulgària

Juliol-Agost 2013

10. Laura Pitulice (visitant amb programa de mobilitat professors)

West University of Timisoara, Romania

Setembre 2013

11. Alexander Kaiser (visitant convidat)

Universität Innsbruck, Àustria

Setembre-Desembre 2013

12. Prof. Jose A. Rodriguez (visitant convidat)

Brookhaven National Laboratory, Estats Units

Octubre 2013

13. Prof. Santiago Schnell (visitant convidat amb el programa BKC excellence)

University of Michigan Medical School, USA

Novembre 2013

14. Prof. Jürgen Vogt (visitant convidat)

Universität Ulm, Alemanya

Novembre 2013

15. Prof. Bouthaina Kerkeni (visitant convidat)

Observatoire de Paris – Meudon, Paris, França

Desembre 2013

16. Dr. Jaime Suárez Corujo (visitant convidat)

Universidad Autónoma de Madrid, Espanya

Desembre 2013

III. ACTIVITAT CIENTÍFICA DELS MEMBRES DE L'IQTCUB

III.1 RESULTATS MÉS RELLEVANTS

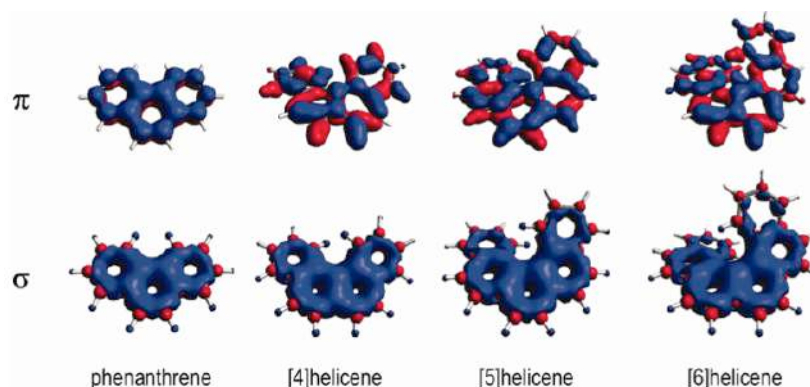
En aquesta secció es descriuen alguns dels resultats més rellevants obtinguts per cada línia de recerca de l'IQTCUB.

LÍNIA 1. DESENVOLUPAMENT DE MÈTODES, ALGORITMES I EINES COMPUTACIONALS

Pseudosymmetry Analysis of Molecular Orbitals.

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

J. Comp. Chem., 34 (2013) 1321.



Orbitals enllaçants de tipus σ i π de més baixa energia per al fenantrè i els [n]helicens ($n = 4-6$).

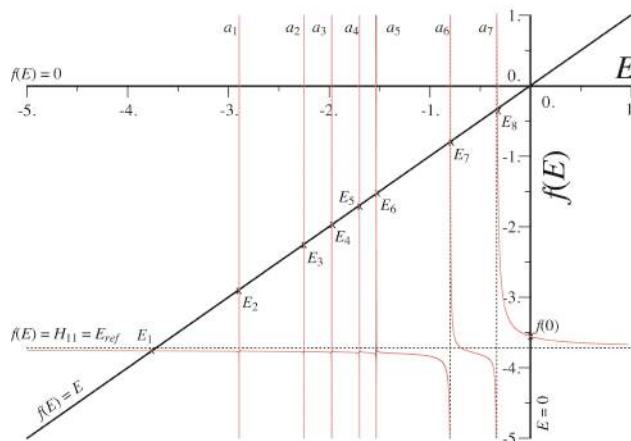
S'ha desenvolupat un mètode per a l'anàlisi de pseudosimetria d'orbitals moleculars usant les mesures de representació irreductible proposades recentment. Per a això s'ha definit en primer lloc el concepte de pseudosimetria molecular així com la seva relació amb els conceptes de simetria aproximada i quasisimetria. Posteriorment s'ha desenvolupat un algoritme general per quantificar el contingut de pseudosimetria d'un objecte usant el formalisme de les àlgebres de grups finits. Les expressions matemàtiques trobades permeten descomposar els orbitals d'una molècula usant les representacions irreductibles de qualsevol grup puntual de simetria. La implementació i la utilitat de l'anàlisi de pseudosimetria dels orbitals moleculars es mostra comparant els orbitals σ i π d'hidrocarburs aromàtics policíclics plans i no plans, així com en la determinació del caràcter t_{2g} i e_g dels orbitals d per a l'anió $[\text{FeH}_6]^{3-}$ al llarg del camí de

distorsió Bailar.

A Comparison Model Between Density Functional and Wave Function Theories by Means of the Löwdin Partitioning Technique.

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

J. Chem. Phys., 138 (2013) 174107.



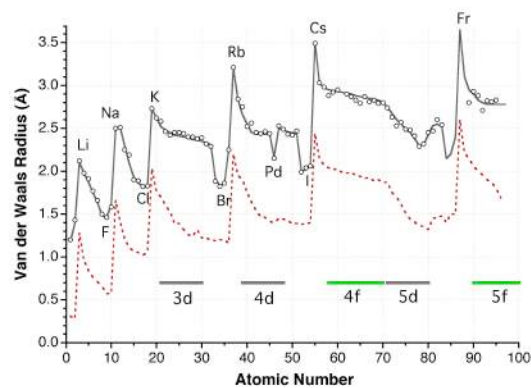
Representació qualitativa de la funció de Löwdin, $f(E)$, per a un problema d'Interacció de Configuracions Total de dimensió 8 CSF i prenent $H_{1,1} = E_{REF}$.

Un model de comparació basat en la tècnica de partició Löwdin és utilitzat per analitzar les diferències entre la funció d'ona i els models funcionals de densitat. S'argumenta que la teoria funcional de la densitat es pot comparar amb la teoria de la funció d'ona utilitzant la funció Löwdin, $f(E)$, a $E = 0$. La teoria funcional de la densitat pot ser vista com un cas especial de la funció Löwdin que no satisfà totes les condicions variacionals a $\rho(\mathbf{r})$ i també en el terme $E_{xc}[\rho]$. Aquesta anàlisi mostra que fent cas omís de les restriccions imposades pels requisits d'espí i de simetria de l'espai la correlació expressada per la funció $\rho(\mathbf{r})$ és incompatible a la de $\gamma_1(\mathbf{r}_1; \mathbf{r}_1')$ que és una funció derivable d'una funció d'ona $\Psi(r_1 s_1, \dots, r_n s_n)$ adaptada a l'espí i a la simetria de l'espai. Aquest esquema de comparació proporciona una visió sobre els requisits variacionals per tal d'aconseguir una descripció de l'estructura electrònica molecular dels estats fonamental i excitats.

A Cartography of the Van der Waals Territory

S. Alvarez

Dalton Trans. 42 (2013), 8617-8636.



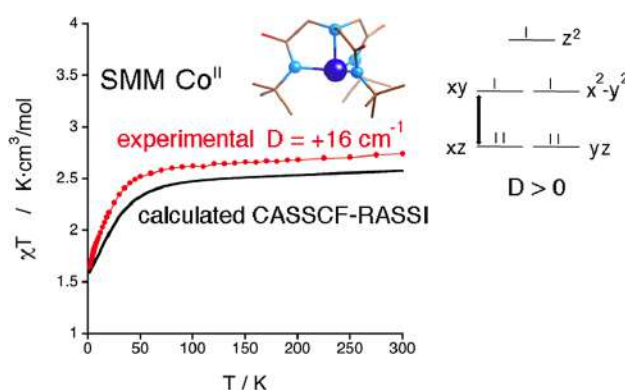
En aquest treball s'ha proposat un nou conjunt de radis de Van der Waals que mostra tendències periòdiques coherents (veure Figura) i hom espera que acabi substituint els radis de Bondi emprats habitualment.

LÍNIA 2. CIÈNCIA DELS MATERIALS COMPUTACIONAL

Mononuclear Single-Molecule Magnets: Tailoring the Magnetic Anisotropy of First Row Transition-Metal Complexes

S Gómez-Coca, E. Cremades, N. Aliaga-Alcaide, E. Ruiz

J. Am. Chem. Soc. 135 (2013), 7010-7018

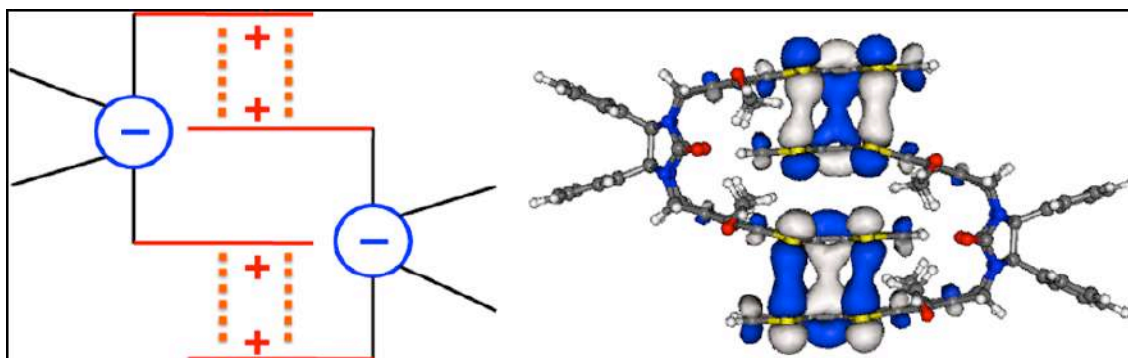


Aquest treball combinat teòric i experimental se centra en l'estudi dels factors que determinen l'anisotropia magnètica de compostos de metalls de transició, un factor clau per a poder controlar el seu comportament com a imants unimoleculars. En concret, es mostra que l'anisotropia magnètica es pot predir basant-se en el nombre de coordinació i la configuració electrònica del centre paramagnètic. A partir d'aquestes prediccions s'han re-sintetitzat dos compostos de cobalt de la bibliografia i s'han caracteritzat magnèticament, de manera que s'ha pogut confirmar la seva naturalesa d'imants unimoleculars predita per la teoria.

Keys for the Existence of Stable Dimers of Bis-tetrathiafulvalene (bis-TTF)-Functionalized Molecular Clips Presenting [TTF]⁺⋯[TTF]⁺ Long, Multicenter Bonds at Room Temperature

M. Fumanal, M. Capdevila-Cortada, J. S. Miller, J. J. Novoa.

J. Am. Chem. Soc. 135 (2013) 13814.

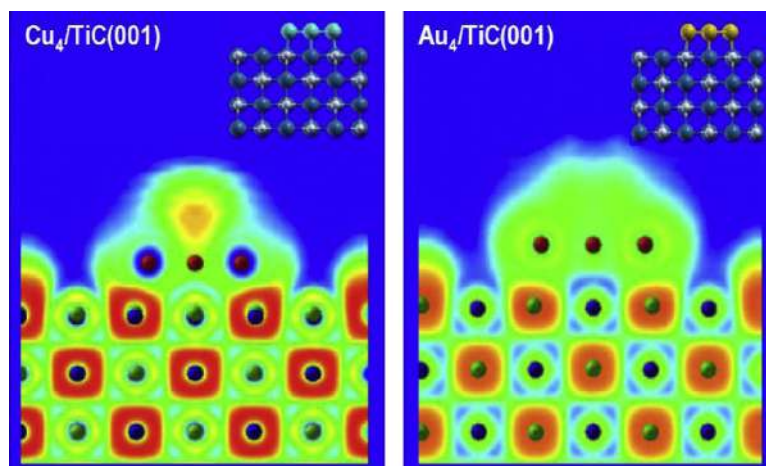


Aquest estudi computacional s'ha realitzat per tal de determinar les claus de l'existència, en acetonitril, de dímers de clips moleculars (bis-TTF)-difenílglicoluril ($\text{clip}_{2^{n+}}$) estables a temperatura ambient quan $n \leq 4$. Estudis d'absorció electrònica suggereixen interaccions curtes $[\text{TTF}]^{+} \cdots [\text{TTF}]^{m+}$ a temperatura ambient. Demostrem que els $\text{clip}_{2^{n+}}$ $n \leq 4$ presenten una geometria òptima que conté tres interaccions curtes $[\text{TTF}]^{+} \cdots [\text{TTF}]^{m+}$ i la $\Delta G(298\text{K})$ obtinguda reproduïx els resultats experimentals. El nostre estudi evoca l'origen de la seva estabilitat a: (1) el caràcter *zwitteriònic* de la seva distribució de càrrega, (2) la pròpia geometria del dímer, que permet la formació de dos contactes entre el grup TTF carregat (+) i l'anell central carregat (-), (3) la presència de tres contactes curts entre els grups TTF, els quals són dos enllaços a llarga distància i un contacte vdW quan els quatre TTF són oxidats (1+), i (4) l'estabilització produïda per l'efecte del dissolvent.

CO₂ Hydrogenation on Au/TiC, Cu/TiC, and Ni/TiC Catalysts: Production of CO, Methanol, and Methane.

J.A. Rodriguez, J. Evans, L. Feria, A.B. Vidal, P. Liu, K. Nakamura, F. Illas

J. Catal., 307 (2013) 162.



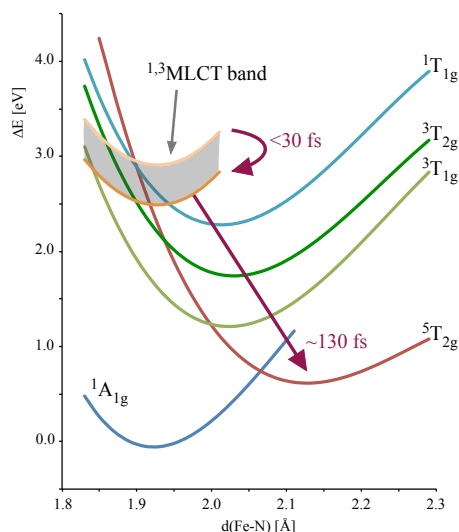
Electron-polarization plots for Cu₄ (left) and Au₄ (right) supported on TiC(001)

Petites partícules de Au, Cu, i Ni en contacte amb la superfície TiC(001) mostren una elevada activitat vers la hidrogenació de CO₂. El producte majoritari sobre aquests catalitzadors és CO, que es produeix mitjançant el desplaçament invers d'aigua en gas (RWGS, CO₂ + H₂ → CO + H₂O). En els casos de Au/TiC(001) i Cu/TiC(001) es produeix una quantitat substancial de metanol, però no es detecta metà. El Ni/TiC(001) produeix una mescla de CO, metanol, i metà. La activitat més elevada es troba per a partícules bidimensionals o petits agregats de metalls adsorbits en contacte íntim amb el TiC(001). L'activitat catalítica dels metalls suportats pot ser ordres de magnitud més gran que les superfícies de Au(100), Cu(100), i Ni(100). Càlculs de la teoria del funcional de la densitat mostren que el HOCO és un intermedi clau en la generació de CO a través de la RWGS, amb la producció de metanol probablement incloent la hidrogenació del intermedi HCOO o del CO generat en la RWGS.

Ultrafast Deactivation Mechanism of the Excited Singlet in the Light-Induced Spin Crossover of $[\text{Fe}(\text{2,2}'\text{-bipyridine})_3]^{2+}$.

C. Sousa, C. de Graaf, A. Rudavskiy, R. Broer, J. Tatchen, M. Etinski, C. M. Marian

Chem. Eur. J. 19 (2013) 17541



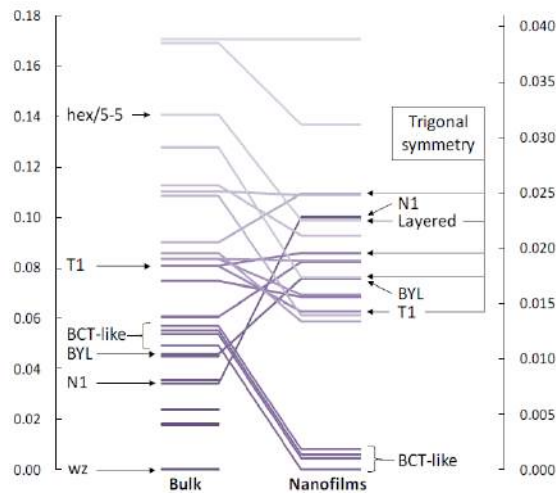
Procés de desactivació des de la banda d'estats de transferència de càrrega metall-ligand, MLCT

En aquest treball s'ha estudiat el mecanisme del procés de canvi d'espín induït per radiació electromagnètica del complex $[\text{Fe}(\text{bpy})_3]^{2+}$ ($\text{bpy} = 2,2'$ -bipiridina) combinant càlculs molt acurats de l'estructura electrònica amb aproximacions depenents del temps per calcular les velocitats dels creuaments entre estats de diferent espín. S'han determinat tots els estats electrònics intermitjos involucrats en el camí que connecta l'estat de baix espín i el d'alt espín estimant-se els temps de desactivació de les diferents etapes. Això ha permès proposar el mecanisme global del procés. Els resultats donen un temps total de desactivació del mateix ordre de magnitud que el valor mesurat experimentalment, de l'ordre de 130 fs, i mostren que el complex pot arribar a l'estat final d'alt espín via diferents canals de desactivació. L'estat excitat singlet, ocupat per excitació òptica, decau ràpidament cap a un estat triplet amb configuració $\text{Fe-d}^6(t_{2g}^5e_g^1)$ bé directament, bé per via d'un triplet MLCT. Aquest triplet en principi podria decaure directament a l'estat final quintet, no obstant existeix un canal molt més ràpid que implica conversió interna cap a un estat triplet més baix en energia i subseqüentment un creuament d'estats cap a l'estat quintet d'alt espín. La velocitat de desactivació cap a l'estat fonamental singlet és molt més petita, cosa que justifica el gran valor del rendiment quàntic determinat pel procés global.

Nanofilm versus Bulk Polymorphism in Wurtzite Materials

I. Demiroglu and S. T. Bromley

Phys. Rev. Lett., 110 (2013) 245501.

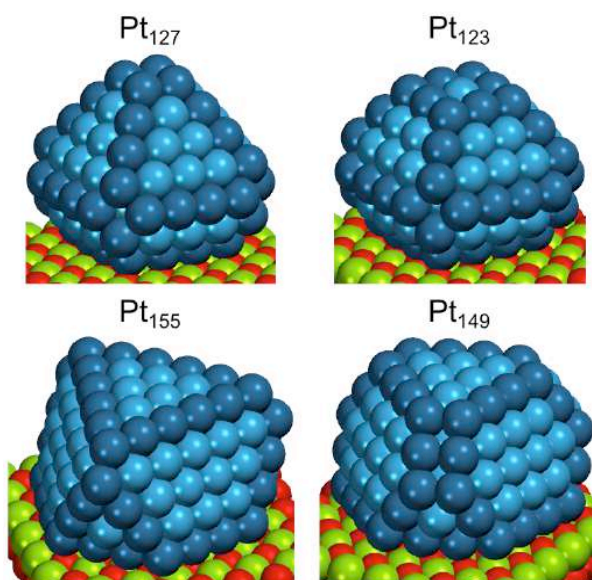


Hem trobat un ric polimorfisme de nanopel·lícules de ZnO de baixa energia amb un ordre d'estabilitat totalment diferent al del bulk. Aquest estudi proporciona nous coneixements sobre les transicions estructurals observades durant el creixement epitaxial i és útil per predir com depèn l'estabilitat de la nanopel·lícula en funció de diferents tensions o gruixos.

Effect of MgO(100) support on structure and properties of Pd and Pt nanoparticles with 49-155 atoms.

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

J. Chem. Phys., 139 (2013) 084701, 1-10



Nanopartícules de platí de diferents formes, mides i orientacions en suport de MgO(100) estudiades mitjançant càlculs basats en el funcional de la densitat.

L'estudi computacional tracta l'efecte d'un òxid suport, el MgO(100), tant en les energies relatives com en d'altres propietats de nanopartícules (NPs) de Pd i Pt de fins a 155 àtoms (1.6 nm de mida). Mentre que s'ha trobat que el suport afecta significativament les estabilitats relatives de les NPs, altres propietats com ara l'estructura electrònica o les distàncies interatòmiques dintre de la NP no canvien notablement després de la deposició. Es tracta d'un dels primers estudis d'estructura electrònica on s'investiga l'efecte de l'òxid suport en nanopartícules de metall amb mides considerables. Aquest treball pavimenta el camí cap a la modelització més realista de fenòmens tan complexos com la interacció metall-suport en catàlisi heterogènia.

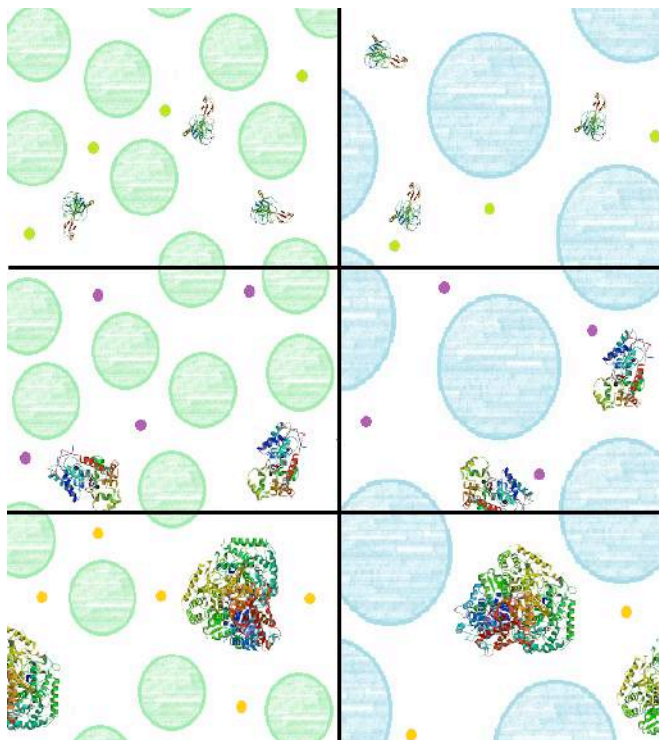
LÍNIA 3. BIOQUÍMICA COMPUTACIONAL I *SOFT MATTER*

Effect of crowding by Dextrans in enzymatic reactions

I. Pastor, C. Balcells, L. Pitulice, E. Vilaseca, S. Madurga, A. Isvoran, M. Cascante, F.

Mas

Biophysical Chemistry, 185 (2013) 8



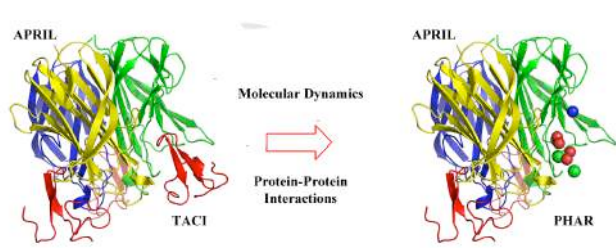
Efecte del crowding en enzims de diferent mida

L'interior de les cèlules és un medi altament concentrat i estructurat amb molècules de formes i mides variades. Les conseqüències d'aquest crowding molecular sobre les reaccions enzimàtiques encara no està clar. En aquest treball s'estudia i es compara la cinètica de l'alfa-chimotripsina, HRP i la LDH. Aquestes reaccions s'han escollit com a processos enzimàtics models en diferents medis crowded en condicions in vitro. El sistema crowding s'ha introduït amb medis de Dextrans de concentracions i mides variades. Els resultats indiquen que el volum ocupat per l'agent crowder i no la seva mida juga un paper important en la velocitat inicial de les reaccions de enzims petits. Per altra banda, la mida de l'enzim es un factor important que afecta a la velocitat de reacció d'enzims grans en medis crowding. En aquesta situació, la velocitat inicial de reacció depèn del volum ocupat i de la dimensió del agent crowder.

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., 39 (2013) 13



Farmacófor de les interaccions April-Taci

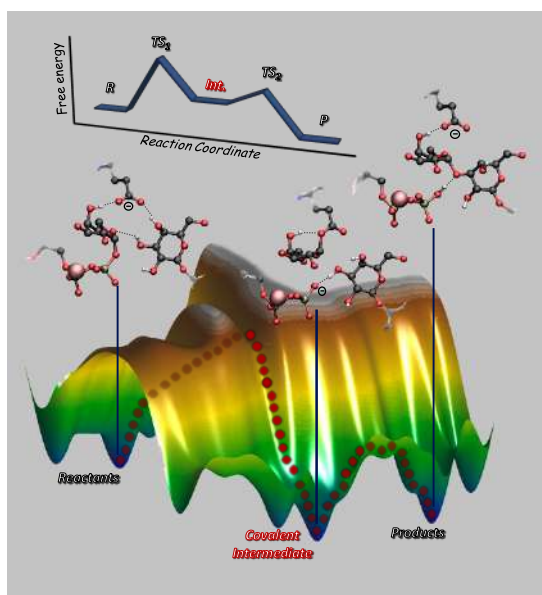
APRIL (A Proliferation-Inducing Ligand) és un membre de la superfamília Factor de Necrosi Tumoral (TNF) que s'uneix als receptors (RTNF) TACI i BCMA. Hi ha una gran quantitat de proves sobre la implicació d'April a les malalties autoimmunes i en diferents tipus de tumora on s'han detectat alts nivells de mRNA. Per tant, el disseny de compostos que imiten la inhibició d'April pels seus receptors sembla ser una manera prometedora per al tractament de malalties autoimmunes i càncer.

En aquest treball, es presenta una anàlisi estructural detallat de la inhibició de la proteïna April, tan humana com de ratolí, pel seus receptors humans TACI i BCMA obtingut mitjançant simulacions de dinàmica molecular. Es descriuen noves interaccions que amb les descrites experimentalment podem contribuir a un millor disseny dels inhibidors d'April. Aquest és un primer pas cap al disseny de petits compostos per inhibir l'activitat biològica d'April que està desregulat en moltes malalties.

Formation of a covalent glycosyl-enzyme species in a retaining glycosyltransferase.

V. Rojas-Cervellera, A. Ardèvol, M. Boero, A. Planas, C. Rovira.

Chem. Eur. J. 42 (2013) 14018.



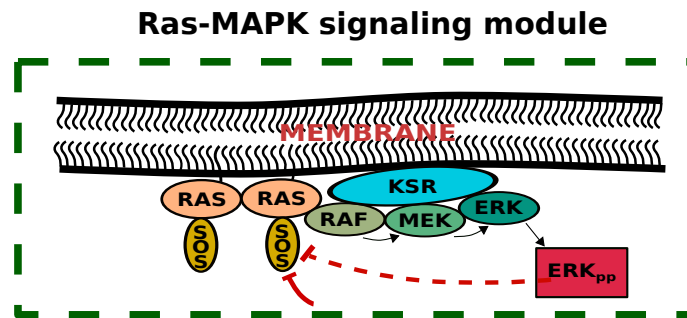
Mecanisme molecular de síntesi de l'enllaç glicosídic per part de l'enzim α 3-galactosiltransferasa obtingut mitjançant tècniques QM/MM.

Les glicosiltransferases (GTs) són un dels enzims responsables de la formació dels carbohidrats, ja que catalitzen la síntesi dels enllaços glicosídics. Aquesta síntesi es realitza mitjançant la transferència d'un monosacàrid des d'un donador (sucre activat per un nucleòtid) a un acceptor (generalment, un altre sucre o carbohidrat). La manca o alteració d'aquests enzims són la causa de malalties com ara infecció, inflamació i determinades malalties congènites (les anomenades malalties lisosomals). Un dels grans reptes de cara al disseny racional de fàrmacs per aquest tipus d'enzims és desxifrar el seu mecanisme d'acció a nivell molecular. Mitjançant tècniques de dinàmica molecular clàssica i metadinàmica QM/MM (quantum mechanics/molecular mechanics), hem pogut caracteritzar l'intermedi més important de la reacció de l'enzim α 3-galactosiltransferasa. L'existència d'aquest intermedi ha estat envoltada de gran controvèrsia en els darrers anys.

Negative feedback self-regulation contributes to robust and high-fidelity transmembrane signal transduction.

M.A. Serrano, M. Jurado, R. Reigada.

J. R. Soc. Interface, 10 (2013) 20130581.



Esquema del circuit de senyalització Ras-MAPK modelitzat a l'article. Es comparen dues opcions de feedback negatiu en el circuit: control extern (línea vermella contínua) o autocontrol (línea vermella discontinua).

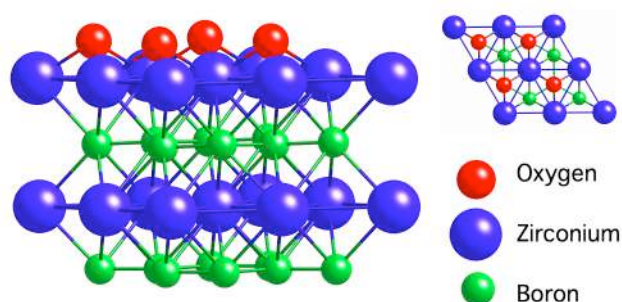
En aquest article hem presentat un model de circuit mínim de senyalització cel·lular transmembrane basat en el circuit Ras-MAPK. El model suposa que els events de senyalització tenen lloc en agregats espacialment distribuïts per la membrana i amb una dinàmica de creació/destrucció. La combinació dels aspectes espacio-temporals d'aquesta dinàmica poden ser modulats per tal de donar una resposta robusta i fidel sense invocar sofisticats circuits de senyalització com seqüència de cascades i cicles, i valors particulars dels paràmetres cinètics. Els nostres resultats demostren que el fet de que els events de senyalització tinguin lloc en agregats específics amb un temps de vida autoregulat per la seva producció senyal és suficient per obtenir respostes fidels i robustes. No és necessari doncs, un control extern d'aquests event de senyalització per obtenir respostes robustes.

LÍNIA 4. REACTIVITAT I DINÀMICA DE REACCIONS

Elementary reaction processes involving atomic and molecular oxygen on ZrB_2 (0001) surface

P. Gamallo, R. Sayós

J. Phys. Chem. C 117 (2013) 5831.



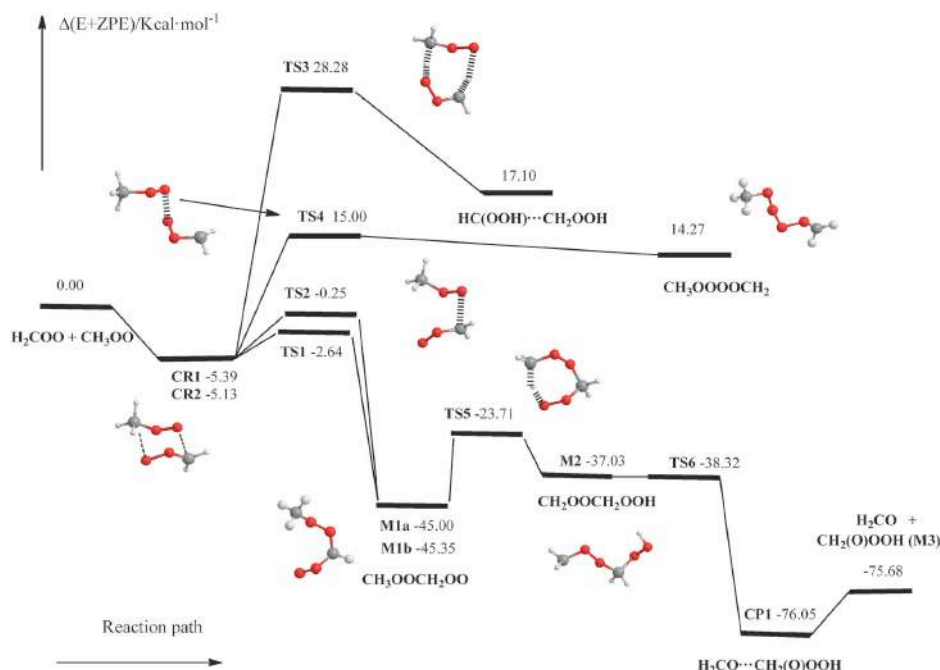
Oxigen atòmic interaccionant amb una superfície de ZrB_2 (0001)

La interacció de l'oxigen atòmic i molecular juntament amb la recombinació atòmica sobre superfícies primes de ZrB_2 prim (0001) acabades en Zr i B han estat estudiades mitjançant càlculs (GGA / PBE) amb la teoria funcional de la densitat. L'adsorció d'oxigen atòmic es produeix predominantment en forats tri-coordinats de la superfície acabada en Zr i en ponts entre bors de la superfície acabada en B. Els pics experimentals de pèrdua de HREELS especular i els desplaçaments a altes exposicions d'O poden ser explicats satisfactòriament pels actuals càlculs. La interacció d' O_2 sobre les dues superfícies produeix principalment la seva dissociació a través de processos no activats. Aquest fet està d'acord amb la fàcil dissociació observada a temperatura ambient. La recombinació d'oxigen atòmic a través de les dues superfícies ZrB_2 mostra que la reacció Eley-Rideal serà molt més important que la reacció de Langmuir-Hinshelwood a totes les temperatures i encara més accessible en el cas de la superfície acabada en B.

The reaction of formaldehyde carbonyl oxide with the methyl peroxy radical and its relevance in the chemistry of the atmosphere

J.M. Anglada, S. Olivella, A. Solé

Phys. Chem. Chem. Phys., 15 (2013) 18921.



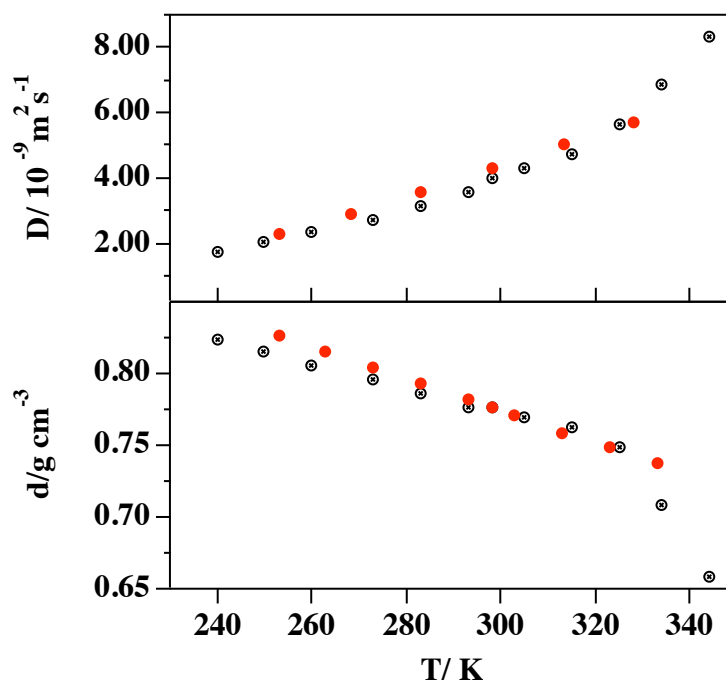
La reacció de l'òxid de carbonil del formaldehid (H_2COO) amb el radical metilperòxid (CH_3OO), un prototip per a les reaccions d'òxids de carbonil amb radicals alquilperòxid de potencial interès en la química atmosfèrica, s'ha investigat mitjançant mètodes mecano-quàntics de càlcul d'estructura electrònica (CASSCF, CASPT2, UQCISD i UCCSD(T)) i funcionals DFT (B3LYP, BH&HLYP, and M06-2X). S'han trobat dos camins de reacció per la reacció de barrera més baixa, a saber, l'addició del radical CH_3OO a l'àtom de carboni del H_2COO que condueix a la formació de l'adducte radical $\text{CH}_3\text{OOCH}_2\text{OO}$. Ambdós camins comencen amb la formació d'un complex pre-reactiu amb energies d'enllaç de 5,39 i 5,13 $\text{kcal}\cdot\text{mol}^{-1}$. Els estats de transició corresponents s'han trobat 2,64 i 0,25 $\text{kcal}\cdot\text{mol}^{-1}$, respectivament per sota de l'energia dels reactius i la constant de velocitat calculada de la reacció global és de $3,74 \times 10^{-12} \text{ cm}^3 \text{ molecules}^{-1} \text{ s}^{-1}$ a 298 K. Com que l'adducte radical $\text{CH}_3\text{OOCH}_2\text{OO}$ es forma amb un excés d'energia interna d'aproximadament 45 $\text{kcal}\cdot\text{mol}^{-1}$, es pot descompondre unimolecularment en formaldehid i el radical $\text{CH}_2(\text{O})\text{OOCH}$. Aquesta descomposició unimolecular implica una transferència intramolecular d'un àtom d'H seguida per la descomposició del radical intermedi $\text{CH}_2\text{OOCH}_2\text{OOH}$. Els càlculs cinètics basats en la "collision-reaction master equation" fets amb el

conjunt de programes Multiwell revelen que l'adducte radical $\text{CH}_3\text{OOCH}_2\text{OO}$ està estabilitzat en un 86,9%, mentre que el 13,10% de la reacció correspon a la formació de H_2CO més el radical $\text{CH}_2(\text{O})\text{OOH}$. Es conclou que l'addició del radical metilperòxid als òxids de carbonil substituïts podria ser la font d'oligòmers de baixa volatilitat observats en els aerosols orgànics secundaris en estudis de cambra d'aire.

A Model Potential for Acetonitrile: from Small Clusters to Liquid

M. Albertí, A. Amat, F. De Angelis, F. Pirani

J. Phys. Chem. B., 117 (2013) 7065.



Coefficients de difusió (D) i densitat (d) de l'acetonitril en funció de la temperatura obtinguts mitjançant simulacions de Dinàmica Molecular usant un col·lectiu NpT (N=343, p= 1bar) comparats amb resultats experimentals (cercles vermells).

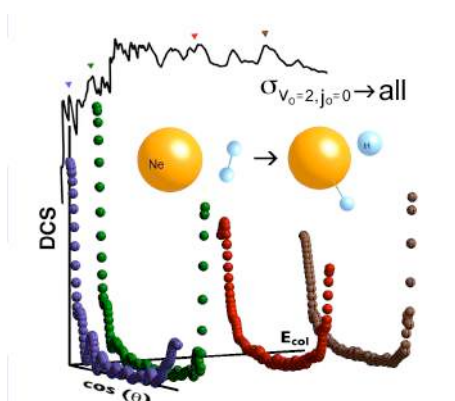
Es presenten els potencials d'interacció $\text{CH}_3\text{CN}-\text{CH}_3\text{CN}$ i $\text{I}^+-\text{CH}_3\text{CN}$ ($\text{I}^+ = \text{Li}^+, \text{Na}^+, \text{K}^+, \text{I}^-$), que permeten modelar tant l'acetonitril pur com les seves dissolucions amb els ions esmentats. El potencial d'interacció s'ha construït pensant en aplicar-lo a l'estudi de cel·les solars sensibilitzades per colorants (dye-sensitized solar cell). El model de potencial comença suposant la total separabilitat de les interaccions electrostàtiques i no electrostàtiques i aquestes últimes es representen mitjançant la funció *Improved Lennard Jones*, els paràmetres rellevants de la qual es determinen a partir de la polarizabilitat dels ions i de la corresponent a certs grups de la molècula de CH_3CN , compatibles amb el valor de la polarizabilitat molecular. Mitjançant

simulacions de Dinàmica Molecular i l'aplicació del potencial d'interacció s'analitzen petits clusters d'acetonitril $(\text{CH}_3\text{CN})_{2,3,4}$, clusters del tipus ió-acetonitril, $\text{I}^+(\text{CH}_3\text{CN})_{36}$ i acetonitril en fase líquida.

Resonances in the $\text{Ne} + \text{H}_2^+ \rightarrow \text{NeH}^+ + \text{H}$ Proton-Transfer Reaction.

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

J. Phys. Chem. A, 117 (2013) 5393-5400



Gràfic combinat de la funció excitació i la secció eficaç diferencial en funció de l'energia de col·lisió.

La reacció $\text{Ne} + \text{H}_2^+ \rightarrow \text{NeH}^+ + \text{H}$ té particular importància en la física de plasmes i ha estat per molt de temps un sistema de referència per les reaccions triatòmiques, generant gran interès experimental i teòric. Una de les característiques més importants és la presència de oscil·lacions en la funció excitació que podrien arribar a ser mesurades. En aquest treball, dos grups del IQTCUB van unir els seus esforços per investigar aquestes oscil·lacions en la secció eficaç del $\text{Ne} + \text{H}_2^+$, combinant simulacions de dinàmica quàntica dependent i independent del temps. A tal efecte es va emprar la millor superfície d'energia potencial disponible, obtinguda a partir de càlcul MRCI. De l'anàlisi de les nostres simulacions es va poder comprovar que aquestes oscil·lacions corresponen a veritables ressonàncies que s'originen degut a la influència d'un mínim d'energia potencial en la SEP. Donat que la majoria de dades disponibles sobre ressonàncies corresponen a sistemes neutres i cinemàtiques del tipus "heavy-light-heavy", aquests resultats i els avenços més recents en el camp experimental engrescaran els equips experimentals a realitzar estudis sobre aquest sistema amb major resolució.

III.2 LLISTA DE PUBLICACIONS

ARTICLES PUBLICATS

1. *Structural analysis and insights into the glycon specificity of the rice GH1 Os7BGlu26 β -D-mannosidase.*
A. Tankrathok, J. Iglesias-Fernández, S. Luang, R. C. Robinson, A. Kimura, C. Rovira, M. Hrmova, J. Ketudat Cairns.
Acta Crystallogr. D 69 (2013) 2124
2. *Interconversion of Quadruply- and Quintuply-Bonded Dimolybdenum Complexes by Reductive Elimination and Oxidative Addition Reactions of Dihydrogen*
M. Carrasco, N. Curado, C. Maya, R. Peloso, A. Rodríguez, E. Ruiz, S. Alvarez, E. Carmona
Angew. Chem. Int. Ed. 52 (2013), 3227-3231.
3. *Evidence for Multicenter Bonding in Dianionic Tetracyanoethylene Dimers by Raman Spectroscopy.*
J. Casado, P. Mayorga Burrezo, F.J. Ramírez, J.T. López Navarrete, S.H. Lapidus, P.W. Stephens, H.-L. Vo, J.S. Miller, F. Mota, J.J. Novoa.
Angew. Chem. Int. Ed. 52 (2013) 6481-6485.
4. *Slow Magnetic Relaxation in a Co^{II}-Y^{III} Single-Ion Magnet with Positive Axial Zero-Field Splitting*
E. Colacio, J. Ruiz, E. Ruiz, E. Cremades, J. Krzystek, S. Carretta, J. Cano, T. Guidi, W. Wernsdorfer, E. K. Brechin
Angew. Chem. Int. Ed. 52 (2013), 9130-9134.
5. *Combined inhibitor free-energy landscape and structural analysis reports on the mannosidase conformational coordinate.*
R. J. Williams, J. Iglesias-Fernández, J. Stepper, A. Jackson, A. J. Thompson, E. C. Lowe, J. M. White, H. J. Gilbert, C. Rovira, G. J. Davies, S. J. Williams.
Angew. Chem. Int. Ed. (2013). In press (DOI: 10.1002/anie.201308334).
6. *Electroporation of heterogeneous lipid membranes.*
R. Reigada.
Biochimica et Biophysica Acta (2013), accepted.
7. *Effect of crowding by Dextrans in enzymatic reactions*
I. Pastor, C. Balcells, L. Pitulice, E. Vilaseca, S. Madurga, A. Isvoran, M. Cascante, F. Mas
Biophysical Chemistry, 185 (2014) 8.
8. *Enantioselective preparation of δ -valerolactones using horse liver alcohol dehydrogenase.*
A. Díaz-Rodríguez, J. Iglesias-Fernández, C. Rovira, V. Gotor-Fernández.
ChemCatChem (2013). Available on-line (DOI: 10.1002/cctc.201300640).

9. *Two 3d-4f Nanomagnets Formed via Two-step in-situ Reaction of Picolinaldehyde*
J.-L. Liu, Y.-C. Chen, Q.-W. Li, S. Gómez-Coca, D. Aravena, E. Ruiz, W.-Q. Lin, J.-D. Leng, M.-L. Tong
Chem. Commun. 49 (2013), 6549-6551.
10. *Unprecedented Ferromagnetic Dipolar Interaction in a Dinuclear Holmium(III) Complex: a combined Experimental and Theoretical Study*
D. Leng, J. L. Liu, W. Q. Lin, S. Gomez-Coca, D. Aravena, E. Ruiz, M. L. Tong
Chem. Commun. 49 (2013), 9341-9343.
11. *Tuning the Surface Chemistry of Pd by Atomic C and H: A Microscopic Picture.*
H.A. Aleksandrov, F. Viñes, W. Ludwig, S. Schauer mann, K.M. Neyman.
Chem. Eur. J. 19 (2013) 1335-1345.
12. *Copper Versus Thioether-Centered Oxidation: Mechanistic Insight into the Non-Innocent Redox Behavior of Tripodal Benzimidazolylaminothioether Ligands*
P. R. Martínez-Alanís, B. N. Sánchez-Eguía, V. M. Ugalde-Saldívar, I. Regla, P. Demare, G. Aullón, I. Castillo
Chem. Eur. J. 19 (2013), 6067-6079.
13. *Formation of a covalent glycosyl-enzyme species in a retaining glycosyltransferase.*
V. Rojas-Cervellera, A. Ardèvol, M. Boero, A. Planas, C. Rovira.
Chem. Eur. J. 42 (2013) 14018. Section cover.
14. *Ultrafast Deactivation Mechanism of the Excited Singlet in the Light-Induced Spin Crossover of $[Fe(2,2'-bipyridine)_3]^{2+}$.*
C. Sousa, C. de Graaf, A. Rudavskyi, R. Broer, J. Tatchen, M. Etinski, C. M. Marian.
Chem. Eur. J. 19 (2013) 17541-17551.
15. *Cu^{II} - Gd^{III} Cryogenic Magnetic Refrigerants and Cu_8Dy_9 Single-Molecule Magnet Generated by In Situ Reactions of Picolinaldehyde and Acetylpyridine: Experimental and Theoretical Study*
J.-L. Liu, W.-Q. Lin, Y.-C. Chen, S. Gómez-Coca, D. Aravena, E. Ruiz, J.-D. Leng, M.-L. Tong
Chem. Eur. J. 19 (2013), en prensa (doi: 10.1002/chem.201303275)
16. *Electronic structure calculations for the study of D- π -A organic sensitizers: Exploring polythiophene linkers.*
C. Climent, D. Casanova.
Chem. Phys. 423 (2013) 157
17. *Assessing the importance of Van der Waals interactions on the adsorption of azobenzene on the rutile $TiO_2(110)$ surface.*
J.P. Prates Ramalho, F. Illas.
Chem. Phys. Lett. 557 (2013) 194-194
18. *Effect of spin ordering on structure and structural transitions in the $(MnS)_6$ magic cluster.*
A. D. Lewoczko, J. J. BelBruno, S. T. Bromley
Chem. Phys. Lett. 556 (2013) 207.

19. *Theoretical Approaches to Excited-State-Related Phenomena in Oxide Surfaces.*
C. Sousa, S. Tosoni, F. Illas.
Chem. Rev. 113 (2013) 4456-4495.
20. *Computational Comparison of CPDT to other Conjugated Linkers in Triarylamine-based Organic Dyes.*
C. Climent, D. Casanova.
Chimia 67 (2013) 116.
21. *Highly Fluorescent Complexes with Gold, Palladium or Platinum linked to Perylene through a Tetrafluorophenyl Group*
S. Lentijo, G. Aullón, J. A. Miguel, P. Espinet
Dalton Trans. 42 (2013), 6353-6365.
22. *Stereo-spin Isomerism in Pentacoordinate Iron Porphyrin Complexes: The Case of [Fe(porphyrinato)(CN)]⁻ Systems*
J. Cirera, S. Alvarez
Dalton Trans. 42 (2013), 7002-7008.
23. *A Cartography of the Van der Waals Territory*
S. Alvarez
Dalton Trans. 42 (2013), 8617-8636.
24. *Spins on a Curved Surface: an Fe^{III}₁₄ Ferracalixarene*
A. M. Ako, Y. Lan, V. Mareacre E. Ruiz, D. Aravena, C. E. Anson, A. K. Powell
Dalton Trans. 42 (2013), 9606-9612.
25. *Explanation of the site-specific spin crossover in Fe(mtz)₆(BF₄)₂.*
A. Rudavskiy, R.W.A. Havenith, R. Broer, C. de Graaf, C. Sousa.
Dalton Trans. 42 (2013) 14702-14709.
26. *Factors affecting the magnetic coupling in Sr₂V₃O₉ type oxides: As for V substitution in the VO₄ tetrahedra and nature of the cation.*
A. Rodriguez-Forteza, M. Llunell, P. Alemany, E. Canadell.
Dalton Trans. 42 (2013) 15555.
27. *Competitive solvation of K⁺ by C₆H₆ and H₂O in the K⁺-(C₆H₆)_n-(H₂O)_m (n = 1–4; m = 1–6) aggregates*
M. Albertí, N. Faginas Lago
Eur. Phys. J. D 67 (2013) 73.
28. *Self-Assembly of Pentanuclear Mesocate versus Octanuclear Helicate: Size Effect of the [M^{II}₂(μ₃-O/X)]ⁿ⁺ Triangle Core*
X. Bao, W. Liu, J.-L. Liu, S. Gómez-Coca, E. Ruiz, M.-L. Tong
Inorg. Chem. 52 (2013), 1099-1107.

29. *Magnetic Interactions Mediated by Diamagnetic Cations in $[Mn_{18}M]$ ($M = Sr^2, Y^{3+}, Cd^{2+}$, and Lu^{3+}) Coordination Clusters*
A. M. Ako, B. Burger, Y. Lan, V. Mereacre, R. Clérac, G. Buth, S. Gómez-Coca, E. Ruiz, C. E. Anson, A. K. Powell
Inorg. Chem. 52 (2013), 5764-5774.
30. *Pseudosymmetry Analysis of the d-block Molecular Orbitals in Four-coordinate Complexes*
A. Falceto, D. Casanova, P. Alemany, S. Alvarez
Inorg. Chem. 52 (2013), 6510-6519.
31. *Structures, magnetochemistry, Spectroscopy, Theoretical Study, and Catechol Oxidase Activity of Dinuclear and Dimer-of-Dinuclear Mixed-Valence $Mn^{III}Mn^{II}$ Complexes Derived from a Macrocyclic Ligand*
A. Jana, N. Aliaga-Alcalde, E. Ruiz, S. Mohanta
Inorg. Chem. 52 (2013), 7732-7746.
32. *A $Mn^{II}_6Mn^{III}_6$ Single-Strand Molecular Wheel with a Reuleaux Triangular Topology: Synthesis, Structure, Magnetism, and DFT Studies*
S. Zartilas, C. Papatrifaftyllopoulou, T. C. Stamatatos, V. Nastopoulos, E. Cremades, E. Ruiz, G. Christou, C. Lampropoulos, A. J. Tasiopoulos
Inorg. Chem. 52 (2013), 12070-12079.
33. *Reversible Chemisorption of Sulfur Dioxide in a Spin Crossover Porous Coordination Polymer*
Z. Arcis-Castillo, F. J. Muñoz-Lara, M. C. Muñoz, D. Aravena, A. B. Gaspar, J. F. Sanchez-Royo, E. Ruiz, M. Ohba, R. Matsuda, S. Kitagawa, J. A. Real
Inorg. Chem. 52 (2013), 12777-12783.
34. *Dividing the Spoils: Role of pyrazine ligands and perchlorate counterions in the magnetic properties of bis(pyrazine)diperchloratecopper(II), $[Cu(pz)_2](ClO_4)_2$.*
S. Vela, J. Jornet-Somoza, M.M. Turnbull, R. Feyerherm, J.J. Novoa, M. Deumal
Inorg. Chem. 52 (2013) 12923-12932.
35. *Shedding Light on the Single-Molecule Magnet Behavior of Mononuclear Dy(III) Complexes*
D. Aravena, E. Ruiz
Inorg. Chem. 52 (2013), en prensa (doi: 10.1021/ic402367c)
36. *Analyzing the Electronic Structure of Molecules Using Continuous Symmetry Measures*
P. Alemany
Int. J. Quantum Chem. 113 (2013), 1814-1820.
37. *Mononuclear Single-Molecule Magnets: Tailoring the Magnetic Anisotropy of First-Row Transition-Metal Complexes*
S Gómez-Coca, E. Cremades, N. Aliaga-Alcaide, E. Ruiz
J. Am. Chem. Soc. 135 (2013), 7010-7018.

38. *Keys for the existence of stable dimers of bis-TTF-functionalized molecular clips presenting short-distance [TTF]⁺⋯[TTF]⁺ interactions at room temperature.*
M. Fumanal, M. Capdevila-Cortada, J.S. Miller, J.J. Novoa.
J. Am. Chem. Soc. 135 (2013) 13814-13826.
39. *Structures of the substrate-free and the product-bound forms of HmuO, a heme oxygenase from Corynebacterium diphtheriae: X-ray crystallography and molecular dynamics investigation.*
M. Unno, A. Ardèvol, C. Rovira, M. Ikeda-Saito.
J. Biol. Chem. 288 (2013) 34443. Selected as Paper of the Week.
40. *Influence of macromolecular crowding on the oxidation of ABTS by hydrogen peroxide catalyzed by HRP.*
L. Pitulice, I. Pastor, E. Vilaseca, S. Madurga, A. Isvoran, M. Cascante, F. Mas
Journal of Biocatalysis & Biotransformation, 2 (2013) 1000107.
41. *CO₂ Hydrogenation on Au/TiC, Cu/TiC, and Ni/TiC Catalysts: Production of CO, Methanol, and Methane.*
J.A. Rodríguez, J. Evans, L. Feria, A.B. Vidal, P. Liu, K. Nakamura, F. Illas.
J. Catal. 307 (2013) 162-169.
42. *A Comparison Model Between Density Functional and Wave Function Theories by Means of the Löwdin Partitioning Technique.*
M. Caballero, I. de P.R. Moreira, J.M. Bofill.
J. Chem. Phys. 17 (2013) 1118.
43. *Effect of MgO(100) support on structure and properties of Pd and Pt nanoparticles with 49-155 atoms.*
S.M. Kozlov, H.A. Aleksandrov, J. Goniakowski, K.M. Neyman.
J. Chem. Phys. 139 (2013) 084701, 1-10 (journal front cover).
44. *Conical-intersection quantum dynamics of OH(A²Σ⁺) + H(²S) collisions*
P. Gamallo, S. Akpınar, P. Defazio, C. Petrongolo
J. Chem. Phys. 139 (2013) 094303/1.
45. *One-dimensional embedded cluster approach to modeling CdS nanowires*
J. Buckeridge, S. T. Bromley, A. Walsh, C. R. A. Catlow, A. A. Sokol
J. Chem. Phys., 139 (2013) 124101.
46. *Experimental study of the reactive processes in the gas phase K⁺ + i-C₃H₇Cl collisions. A comparison with Li and Na ions.*
J. Aguilar, J.M. Lucas, J. de Andrés, M. Albertí, D. Bassi and A. Aguilar
J. Chem. Phys. 138 (2013) 184310
47. *Theoretical assessment of graphene-metal contacts.*
J. Patanachai, F. Viñes, S.M. Kozlov, J. Limtrakul, F. Illas.
J. Chem. Phys. 138 (2013) 244701.

48. *A comparison model between density functional and wave function theories by means of the Lowdin partitioning technique.*
M. Caballero, I.P.R. Moreira, J.M. Bofill.
J. Chem. Phys. 138 (2013) 174107.
49. *Understanding the Nature of the CH \cdots HC Interaction in Alkanes*
D. Danovich, S. Shaik, F. Neese, J. Echeverría, G. Aullón, S. Alvarez
J. Chem. Theor. Comput. 9 (2013), 1977-1991.
50. *Establishing the Accuracy of Broadly Used Density Functionals in Describing Bulk Properties of Transition Metals.*
J. Patanachai, S.M. Kozlov, F. Viñes, J. Limtrakul, F. Illas.
J. Chem. Theo. Comput. 138 (2013) 244701.
51. *Efficient implementation of restricted active space configuration interaction with the hole and particle approximation*
D. Casanova
J. Comput. Chem. 34 (2013), 720.
52. *Pseudosymmetry Analysis of Molecular Orbitals*
D. Casanova, P. Alemany, A. Falceto, A. Carreras, S. Alvarez
J. Comput. Chem. 34 (2013), 1321-1331.
53. *Analysis of the Valley-Ridge Inflection Points through the Partitioning Technique of the Hessian Eigenvalue Equation.*
J.M. Bofill, W. Quapp.
J. Math. Chem. 51 (2013) 1099
54. *Level sets as progressing waves: an example for wake-free waves in every dimension.*
W. Quapp, J.M. Bofill.
J. Math. Chem. (2013). DOI: 10.1007/s10910-013-0286-9.
55. *Structural analysis of the inhibition of APRIL by TACI and BCMA through molecular dynamics simulations.*
M. González-Mendióroz, A.B. Álvarez-Vázquez, J. Rubio-Martínez.
J. Mol. Graph. Model 39 (2013) 13
56. *Structure-based approach to the design of BakBH3 mimetic peptides with increased helical propensity.*
L. Delgado-Soler, M.M. Orzaez, J. Rubio-Martínez.
J. Mol. Model 19 (2013) 4305
57. *Theoretical Investigation of Stilbene as Photochromic Spin Coupler.*
A.K. Pal, S. Hansda, S.N. Datta, F. Illas.
J. Phys. Chem. A 117 (2013) 1773-1783.
58. *Resonances in the Ne + H $_2^+$ \rightarrow NeH $^+$ + H proton-transfer reaction.*
P. Gamallo, F. Huarte-Larrañaga, M. González.
J. Phys. Chem. A 117 (2013) 5393.

59. *Carbon Dioxide Clathrate Hydrates: Selective Role of Intermolecular Interactions and Action of the SDS Catalyst*
M. Albertí, F. Pirani, A. Laganà
J. Phys. Chem. A 117 (2013) 6991.
60. *Microsolvation of the Potassium-Ion with Aromatic Rings: Comparison between Hexafluorobenzene and Benzene.*
J. Marques, J. Llanio-Trujillo, M. Albertí, A. Aguilar and F. Pirani.
J. Phys. Chem. A 117 (2013) 8043.
61. *A Model Potential for Acetonitrile: from Small Clusters to Liquid*
M. Albertí, A. Amat, F. De Angelis, F. Pirani
J. Phys. Chem. B 117 (2013) 7065.
62. *Brønsted-Evans-Polanyi Relationship for Transition Metal Carbide and Transition Metal Oxide Surfaces.*
F. Viñes, A. Vojvodic, F. Abild-Pedersen, F. Illas.
J. Phys. Chem. C 117 (2013) 4168-4171.
63. *Elementary reaction processes involving atomic and molecular oxygen on ZrB₂ (0001) surface*
P. Gamallo, R. Sayós
J. Phys. Chem. C 117 (2013) 5831
64. *Magic Numbers in a One-Dimensional Nanosystem: ZnS Single-Walled Nanotubes*
N. Krainara, J. Limtrakul, F. Illas, S. T. Bromley
J. Phys. Chem. C 117 (2013) 22908.
65. *Negative feedback self-regulation contributes to robust and high-fidelity transmembrane signal transduction.*
M.A. Serrano, M. Jurado, R. Reigada.
J. R. Soc. Interface 10 (2013) 20130581
66. *Remarks on the Exact Energy Functional for Fermions: an Analysis using the Löwdin Partitioning Technique.*
M. Caballero, I. de P.R. Moreira, J.M. Bofill.
Mol. Phys. (2013) (accepted).
67. *Competing mechanisms of catalytic H₂ formation and dissociation on ultrasmall silicate nanocluster dust grains*
B. Kerkeni, S. T. Bromley
Mon. Not. R. Astron. Soc., 435 (2013) 1486.
68. *Spin-polarized Transport through Single-molecule Magnet Mn₆ Complexes*
E. Cremades, C. D. Pemmaraju, S. Sanvito, E. Ruiz
Nanoscale 5 (2013), 4751-4757.
69. *The Janus-faced role of external forces in mechanochemical disulfide bond cleavage.*

- P. Dopieralski, J. Ribas-Arino, P. Anjukandi, M. Krupicka, J. Kiss, D. Marx.
Nature Chem. 5 (2013) 685-691.
70. *Molecular physics of elementary processes relevant to hypersonics: atom-molecule, molecule-molecule and atom-surface processes*
A. Laganà, A. Lombardi, F. Pirani, P. Gamallo, R. Sayós, I. Armenise, M. Cacciatore, F. Esposito, M. Rutigliano
O. Plasma. Phys. J. (in press).
71. *Stardust silicate nucleation kick-started by SiO + TiO₂*
T. P. M. Goumans, S. T. Bromley
Phil. Trans. R. Soc. A 371 (2013) 20110580.
72. *Restricted active space spin-flip (RAS-SF) with arbitrary number of spin-flips.*
F. Bell, P. M. Zimmerman, D. Casanova, M. Goldey, M. Head-Gordon.
Phys. Chem. Chem. Phys. 15 (2013) 358.
73. *Hetero triply-bridged dinuclear copper(II) compounds with ferromagnetic coupling: a challenge for current density functionals.*
N. Wannarit, C. Pakawatchai, I. Mutikainen, R. Costa, I.P.R. Moreira, S. Youngme, F. Illas.
Phys. Chem. Chem. Phys. 15 (2013) 1966-1975.
74. *Impact of short and long-range effects on the magnetic interactions in neutral organic radical-based materials.*
A. Domingo, M. Vérot, F. Mota, C. de Graaf, J.J. Novoa, V. Robert.
Phys. Chem. Chem. Phys. 15 (2013) 6982-6989.
75. *Atomic and electronic structure of molybdenum carbide phases: bulk and low Miller-index surfaces.*
J.R. dos Santos Politi, F. Viñes, J.A. Rodriguez, F. Illas.
Phys. Chem. Chem. Phys. 15 (2013) 12617-12625.
76. *The reaction of formaldehyde carbonyl oxide with the methyl peroxy radical and its relevance in the chemistry of the atmosphere*
J.M. Anglada, S. Olivella, A. Solé
Phys. Chem. Chem. Phys., 15 (2013) 18921
77. *Hydroxylation of silica nanoclusters (SiO₂)_M(H₂O)_N, M = 4, 8, 16, 24: stability and structural trends*
K. Jelfs, E. Flikkema, S. T. Bromley
Phys. Chem. Chem. Phys. 15 (2013) 20438.
78. *General model for explicitly hole-doped superconductor parent compounds: Electronic structure of Ca_{2-x}Na_xCuO₂Cl₂ as a case study.*
P. Rivero, I.P.R. Moreira, R. Grau-Crespo, S.N. Datta, F. Illas.
Phys. Rev. B 88 (2013) 085108.
79. *Microscopic origin of n-type behavior in Si-doped AlN.*
D.F. Hevia, C. Stampfl, F. Viñes, F. Illas.

- Phys. Rev. B** 88 (2013) 085202.
80. *Nanofilm versus Bulk Polymorphism in Wurtzite Materials*
I. Demiroglu, S. T. Bromley
Phys. Rev. Lett., 110 (2013) 245501.
81. *Atomistic study of lipid membranes containing chloroform: looking for a lipid-mediated mechanism of anesthesia.*
R. Reigada.
PLoS One 8 (2013) e52631
82. *Microwave-assisted facile and Expeditive Syntheses of Phosphorescent Cyclometallated Iridium(II) Complexes*
P. Alam, I. R. Laskar, C. Climent, D. Casanova, P. Alemany, M. Karanam, A. R. Choudhury, J. R. Butcher
Polyhedron 53 (2013), 286-294.
83. *A theoretical analysis of the magnetic properties of the low dimensional bis(2-chloropyrazine)dichlorocopper(II) molecule-based magnet.*
S. Vela, M. Deumal, M.M. Turnbull, J.J. Novoa.
Polyhedron 64 (2013) 163-171; Special Issue
84. *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 52 (2013) 699-705.
85. *Two isosceles coordination [Ni₃] triangles strongly interacting via hydrogen bonds.*
G. A. Craig, O. Roubeau, J. Ribas-Arino, S. J. Teat, G. Aromí.
Polyhedron 52 (2013) 1369-1374.
86. *Performance analysis of two quantum reaction dynamics codes: time-dependent and time-independent strategies*
P. Gamallo, M. González, F. Huarte-Larrañaga
Proc. Comp. Sci. 18 (2013) 835.
87. *Water (H₂O)_m or Benzene (C₆H₆)_n Aggregates to Solvate the K⁺?*
N. Faginas Lago, M. Albertí, A. Laganà, A. Lombardi
Rev. Lect. Not. Comp. Sci. 7971 (2013) 1.
88. *Accounting for van der Waals interactions between adsorbates and surfaces in density functional theory based calculations: selected examples.*
J.P. Prates Ramalho, J.R.B. Gomes, F. Illas.
RSC Advances 3 (2013) 13085-13100.
89. *Interplay of cytoskeletal activity and lipid phase stability in dynamic protein recruitment and clustering.*
J. Gómez-Llobregat, J. Buceta, R. Reigada.
Scientific Reports 3 (2013) 2608.

90. *Theoretical and experimental study of the interaction of CO on TiC surfaces: Regular versus low coordinated sites.*
B.P. Mant, G.G. Asara, J.A. Anderson, N. Homs, P.R. de la Piscina, S. Rodriguez, J.M. Ricart, F. Illas.
Surf. Sci. 613 (2013) 63-73.
91. *Theoretical study of the F doped anatase surfaces*
Y. Ortega, O. Lamiel Garcia, D. Fernandez Hevia, S. Tosoni, J. Oviedo, M. A. San-Miguel and F. Illas,
Surf. Sci. 618 (2013) 154-158
92. *Structure and stability of acrolein and allyl alcohol networks on Ag(111) from density functional theory based calculations with dispersion corrections*
R. M. Ferullo, M. M. Branda, F. Illas,
Surf. Sci. 617 (2013) 175-182
93. *Low-energy nanoscale clusters of (TiC)(n) n=6, 12: a structural and energetic comparison with MgO.*
O. Lamiel-Garcia, S.T. Bromley, F. Illas.
Theo. Chem. Acc. 132 (2013) 1312 .
94. *Preface to the ESPA-2012 special issue.*
J. J. Novoa, M. F. Ruiz-Lopez.
Theor. Chem. Acc. 132, (2013) UNSP 1369.
95. *Catalysis from first principles: Towards accounting for the effects of nanostructuring.*
S.M. Kozlov, K.M. Neyman
Top. Catal. 56 (2013) 867-873.
96. *The description of electronic processes inside proteins from Car-Parrinello molecular dynamics: chemical transformations.*
C. Rovira.
WIREs Comput. Mol. Sci. 3 (2013) 393.

CAPÍTOLS DE LLIBRES I PROCEEDINGS

1. *Theory and Methods*
S. Alvarez, volume editor
Comprehensive Inorganic Chemistry II (J. Reedijk, K. Poeppelmeier, eds.), vol. 9 (2013), 501-549 (Elsevier: Amsterdam). ISBN 9780080977744.
<http://www.sciencedirect.com/science/referenceworks/9780080965291>
2. *Volume Editor's Introduction*
S. Alvarez
Comprehensive Inorganic Chemistry II (J. Reedijk, K. Poeppelmeier, eds.), vol. 9 (2013), XXXVII-XLI (Elsevier: Amsterdam).
3. *Exchange Coupling in Di- and Polynuclear Complexes*
E. Ruiz
Comprehensive Inorganic Chemistry II (J. Reedijk, K. Poeppelmeier, eds.), vol. 9 (2013), 501-549 (Elsevier: Amsterdam).
4. *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 (2013) (Springer-Verlag), 25-50.
5. *Activation of Gold on Metal Carbides and the Discovery of Novel Catalysts for DeSOx and HDS Reactions*
J.A. Rodriguez, P. Liu, K. Nakamura and F. Illas,
Catalysis over gold-based materials, G. Avgouropoulos and T. Tabakova Editors, Royal Society of Chemistry, RSC Catalysis Series No. 13, (2013), ISBN: 978-1-84973-571-1
6. *From static to reacting Systems on transition-metal surfaces.*
S.M. Kozlov, H.A. Aleksandrov, L.V. Moskaleva, M. Bäumer, K.M. Neyman.
Comprehensive Inorganic Chemistry and Heterogeneous Catalysis (2nd Edition), Eds. J. Reedijk, K. Poeppelmeier, Vol. 7: *Surface inorganic Chemistry and Heterogeneous Catalysis*, Eds. R. Schögl, J.W. Niemantsverdriet (2013) 475-503 (Elsevier, Oxford).
7. *The biosynthesis of isoprenoid precursors as a new target for the development of specific antibiotics for the treatment of Helicobacter pylori associated diseases.*
J. Perez-Gil, J. Miralles, M. Bergua, A. Boronat, J. Rubio-Martinez, S. Imperial.
Helicobacter Pylori: Detection Methods, Diseases and Health Implications . Edited by M. Manfredi, Nova publishers, 2013.

III.3 ALTRES ACTIVITATS

TESIS DOCTORALS 2013

1. *De la superfície d'energia potencial a la reactivitat química*
Marc Caballero Puig
Facultat de Química, Universitat de Barcelona
Novembre de 2013
2. *Moléculas Funcionales y Nanotubos Funcionalizados*
Silvia Gómez Coca
Facultat de Química, Universitat de Barcelona
Novembre de 2013
3. *Estudio QM/MM del mecanismo y cinética de las reacciones de la proteasa NS3 del virus de la hepatitis C con sus sustratos principales*
José Ángel Martínez González
Departament de Química, Universitat de la Rioja
Novembre de 2013
4. *Transporte Cuántico y Magnetismo en Sistemas Inorgánicos: un Estudio Computacional*
Daniel Aravena Ponce
Facultat de Química, Universitat de Barcelona
Desembre de 2013
5. *Estudi teòric de la estereodinàmica de rotors i engranatges moleculars*
Abel Carreras Conill
Facultat de Química, Universitat de Barcelona
Desembre de 2013
6. *Estructura electrónica de sólidos inorgánicos*
Sergio Conejeros Espíndola
Facultat de Química, Universitat de Barcelona
Desembre de 2013

MÀSTERS 2013

1. *Estructura Geométrica y Electrónica del Dianión de Benceno*
Andrés Falceto Palacín
Facultat de Química, Universitat de Barcelona
Gener de 2013
2. *Estudi Teòric pel Disseny d'inhibidors de B-Raf. Preparació de nous agents potencialment inhibidors de B-Raf.*
Luis Eduardo Coronel Cordero
Màster Experimental en Ciències Farmacèutiques, Universitat de Barcelona
Febrer de 2013
3. *Structure based identification of inhibitors for TKTL1, a tumor specific transketolase-like protein.*
Hindujaraj Mannar Vijayanandaraj
Erasmus Mundus Masters – Bio-Health Computing, Universitat de Barcelona
Juny de 2013
4. *Compuestos basados en Derivados Nitrogenados de la Heptacina*
Lindley Maxwell Villacorta
Facultat de Química, Universitat de Barcelona
Juliol 2013
5. *Rational Design of new Mononuclear Single-molecule Magnets*
Jordi Trigueros Enguíanos
Facultat de Física, Universitat de Barcelona
Juliol de 2013
6. *Simulation of Intracellular protein diffusion using Brownian Dynamics*
Albert Ràfels
Facultat de Química, Universitat de Barcelona
Juliol de 2013
7. *La substitució nucleòfila interna: estudi computacional de la descomposició d'alquil clorosulfits per mitjà de càlculs estàtics i dinàmics.*
Lluís Raich
Facultat de Química, Universitat de Barcelona
Setembre de 2013
8. *H₂ confined in Single-walled Carbon Nanotubes: a MCTDH quantum dynamics study.*
Manel Mondelo Martell
Facultat de Química, Universitat de Barcelona
Setembre de 2013

9. *Estudi de l'estructura electrònica, l'enllaç i les propietats elèctriques de compostos de metalls de transició amb estructura tipus NbAs₂.*
Alberto Figueroba Sánchez
Facultat de Química, Universitat de Barcelona
Setembre de 2013

10. *Exploring efficient phosphorescence emission in purely organic materials.*
Clàudia Climent Biescas
Facultat de Química, Universitat de Barcelona
Setembre de 2013

11. *Docking, Molecular Dynamics Simulation and Free Energy Studies of the Binding Mechanism of Inhibitors with B-Raf, c-Abl and p38 Kinases.*
Ignacio Pasamontes Fúnez
Master in Bioinformatics for Health Sciences, Universitat Pompeu Fabra
2013

12. *Molecular Dynamics Simulation and Energy Calculation Studies of the Binding Mechanism of Inhibitors with c-Abl.*
Erim Yurci
Màster de Biotecnologia Molecular, Universitat de Barcelona
2013

PARTICIPACIÓ A CONGRESSOS 2013

Binational and National SCF Prizes (Award Ceremony 2012)

Société Chimique de France, Mulhouse (França)

Theoretical and Structural Exploration of the Van der Waals Territory

S. Alvarez (conferència)

Journées de Modélisation

Paris (França)

Theoretical and Structural Exploration of the Van der Waals Territory

S. Alvarez (conferència)

13th Conference of the Doctoral School

École Doctorale de Chimie Moléculaire de Paris Centre, Paris (França)

Molecular Symmetry and Pseudosymmetry: Some Concepts and Tools

S. Alvarez (conferència)

Singlet Fission Workshop

Lyons (Colorado, Estats Units)

RAS-SF: A simple and suitable approach for the electronic structure study of singlet fission

D. Casanova (comunicació oral)

8a Reunión Científica de Bioinorgánica

Burgos (Espanya)

Oxidación de Complejos de Cobre(I) con Ligandos Benzimidazolilaminotioéter

P. R. Martínez-Alanis, G. Aullón, I. Castillo (póster)

SMASH- Small Molecule NMR Conference

Santiago de Compostela (Espanya)

Representation and Abstraction: Art, Music and Chemistry

S. Alvarez (conferència convidada)

The Como Moments: Theoretical&Computational Modelling of Magnetically Ordered Molecules & Electronic Nano-Transport of Spins.

Como (Itàlia)

Ligand-Induced Changes of Magnetic Anisotropies in Transition Metal Complexes

Jordi Ribas (comunicació oral)

4th European Conference on Molecular Magnetism

Karlsruhe (Alemanya)

Dividing the spoils of the different magnetic behavior in the two phases of bistable (BDTA)₂[Co(mnt)₂] compound: the role of magnetic topology and g-tensor.

M. Deumal, S. Vela, J.J. Novoa, J. Ribas-Arino (póster)

Computational modeling of Molecular Magnetic Materials

S. Vela, J. Ribas-Arino, M. Deumal, J. J. Novoa (póster)

A theoretical Study of the Magnetic Properties of Benzotriazinyl-based Molecular Magnets

M. Fumanal, S. Vela, J. Ribas-Arino, J. J. Novoa (póster)

Workshop in honor of J. M. Tel

Salamanca (Espanya)

Organitzador del congrés:

J.J. Novoa

Molecule-based Magnetism using Theoretical Methods

J.J. Novoa

Past, Present and Future of Crystallography @ Politecnico di Milano: From Small Molecules to Macromolecules and Supramolecular Structures

(Politecnico di Milano, Milano, Itàlia).

Intermolecular interactions in molecule-based magnets: Long distance bonds between radical-ions

J.J. Novoa (conferència convidada)

7th Workshop on Crystal Forms – Bologna

Università degli Studi di Bologna (Itàlia).

Bistable crystals: keys to their existence and polymorphic transformation

J.J. Novoa (conferència convidada)

3rd New trends in Computational Chemistry for Industry Applications

Barcelona (Espanya)

Membre del comité organitzador

F. Illas

Molecular dynamics study of CO over O-preadsorbed β -cristobalite surface

P. Gamallo, H. Prats, R. Sayós

Effect of crowding by Dextrans in enzymatic reactions

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

Simulation of intracellular protein diffusion using Brownian Dynamics

A. Rafels, S. Madurga, I. Pastor, E. Vilaseca, M. Cascante, F. Mas

H adsorption and absorption in Pd nanoparticles supported on MgO(100).
S.M. Kozlov, H.A. Aleksandrov, K.M. Neyman

Dynamics of the $O(^3P) + HCD_3(v_1=0,1) \rightarrow OH + CD_3$ combustion reaction
R. Martínez, P. Gamallo, A. Vilà, M. González

Theoretical studies of enzymatic reactivity: The reaction of the HCV NS3/NS4A protease with the NS5A/5B substrate
J.A. Martínez, R. Martínez, M.P. Puyuelo, L. Masgrau, M. González

IV Jornada Institut Química Teòrica i Computacional de la UB Barcelona (Espanya)

Membre del comitè organitzador
F. Illas

Spin crossover in Fe(II) systems
C. Sousa

Taming the activity of complex Pt/CeO₂ heterogeneous catalysts
A. Bruix

Atomic and electronic structure of F-doped TiO₂
J.O. Lamiel-Garcia, S. Tosoni, F. Illas

Polymorphism in ZnO: a comparison of 3D bulk and 2D nanoslabs
I. Demiroglu, F. Illas, S.T. Bromley

ZnO Surfaces: Description, H-Passivation and IR Spectroscopy
F. Viñes, O. Lamiel, F. Illas

Effect of crowding by Dextrans in enzymatic reactions
Balcells, I. Pastor, L. Pitulice, E. Vilaseca, S. Madurga, A. Isvoran, M. Cascante, F. Mas

Simulation of intracellular protein diffusion using Brownian Dynamics
A. Rafels, S. Madurga, I. Pastor, E. Vilaseca, M. Cascante, F. Mas

Hydrogen confined in Single-walled Carbon Nanotubes: a MCTDH quantum dynamics study
M. Mondelo Martell, F. Huarte-Larrañaga

Vuitena Trobada de Joves Investigadors dels Països Catalans Andorra La Vella (Andorra)

Estudi dinàmic de reaccions moleculars de monòxid de carboni sobre sílice amb oxigen atòmic preadsorbit
H. Prats, P. Gamallo, R. Sayós

Efecte del crowding macroolecular en reaccions enzimàtiques
C. Balcells, I. Pastor, L. Pitulice, E. Vilaseca, S. Madurga, A. Isvoran, M. Cascante, F.

Mas

Disseny i síntesi de nous inhibidors enzimàtics amb potencial activitat antitumoral
A. Vinuesa, L. Navarro, V. Prieur, J. Rubio, R. Pouplana, G. Guillaumet, MD. Pujol.

Quantum Reactive Scattering (QRS13)

Bordeaux (França)

Resonances in the proton transfer reaction $Ne + H_2^+ \rightarrow NeH^+ + H$. A challenge for the experiment.

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

Non adiabatic quantum dynamics of the $N + H_2$ and $O + H_2^+$ isoelectronic systems

P. Gamallo, R. Martínez, P. Defazio, C. Petrongolo, M. Paniagua, M. González

Understanding the effect of vibrational excitation in $Ne + H_2^+ (v=0-17, j=1) \rightarrow NeH^+ + H$, $Ne + H^+ + H$.

P. Gamallo, R. Martínez, J.D. Sierra, M. González

QCT dynamics of the $OH + D_2 \rightarrow HOD + D$ benchmark reaction in a quantum spirit

J.D. Sierra, L. Bonnet, M. González

XII Iberian Meeting on Atomic and Molecular Physics (IBER2013)

Universidad Pablo de Olavide, Sevilla (Espanya)

Quasi-classical trajectory dynamics study of the $OH + D_2$ and $O + HCD_3$ benchmark combustion reactions

J.D. Sierra, L. Bonnet, R. Martínez, P. Gamallo, A. Vilà, M. González

Resonances and non-adiabatic processes in the $Ne + H_2^+$ and $O + H_2^+$ reactions.

M. González, P. Gamallo, F. Huarte-Larrañaga, M. Paniagua, P. Defazio, C. Petrongolo

Rate constants of the HCV NS3/NS4A protease reactions

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

Ultracold 4He nanodroplets doped with O and O_2

A. Vilà, M. González, R. Mayol

Molecular states of the $Li^+ + H + H$ system: nuclei dynamics in the BO approximation

J.M. Randazzo, A. Aguilar, F. Huarte, M. Albertí and J.M. Lucas

Reactive dynamics of the $Li^+ + H_2 \rightarrow LiH^+ + H$ collisions

J.M. Randazzo, A. Aguilar, F. Huarte, M. Albertí and J.M. Lucas

5th Iberian Meeting on Colloids and Interfaces, RIC15

San Sebastian (Espanya)

Dissolution of ZnO nanoparticles in aqueous media: A first essential step in nanotoxicological studies

C. Rey-Castro, C. David, S. Cruz-González, J. Salvador, F. Mas, J. Puy, J. Galceran

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

XVIII Reunió de la xarxa de Referència en Química Teòrica i Computacional de Catalunya (XrQTC)

CRAG, Campus UAB, Barcelona (Espanya)

Simulació de la difusió de proteïnes intracel·lulars usant dinàmica browniana
A. Rafels, S. Madurga, I. Pastor, E. Vilaseca, M. Cascante, F. Mas

Effect of MgO support on structures and H₂ ad-/absorption properties of Pd and Pt nanoparticles
S. M. Kozlov

Ion-Molecule Reactions with alkali metals
E.López, J.Aguilar, J.M.Lucas, J. de Andrés, M. Albertí and A. Aguilar

27th ECIS

Sofia (Bulgària)

Molecular dynamics simulation of the spherical electrical double layer of a soft nanoparticle
S. Madurga, M. Nedyalkova, S. Pisov, I. Pastor, E. Vilaseca, F. Mas

The role of citrate in the stabilization of gold nanoparticles. Conformational analysis of citric acid
M. Nedyalkova, S. Madurga, S. Pisov, I. Pastor, E. Vilaseca, F. Mas

Ceria Symposium 2013

Barcelona (Espanya)

Membre del comité organitzador
F. Illas

Strong Metal-Support interactions in Pt/CeO₂ heterogeneous catalysts.
A. Bruix

Steps on CeO₂(111): Characterization and O vacancy formation.
S.M. Kozlov

2nd Annual Spain Supercomputing Conference

Barcelona (Espanya)

Testing Au/TiC as a potential catalyst for CO₂ hydrogenation
F. Illas

Theoretical Chemistry in Spain told by women.

Tarragona (Espanya)

Spin states in Fe(II) systems

C. Sousa

7th Molecular Quantum Mechanics 2013. Electron Correlation: The Many-body problem at the Heart of Chemistry.

Lugano (Suïssa)

A Comparison Model Between Density Functional and Wave Function Theories by Means of the Löwdin Partitioning Technique

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

Large Matrix Diagonalization Algorithms Based on Lagrange-Newton-Raphson Schemes: Effective Krylov Space LNRd routine

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

Royal Golden Jubilee PhD (RGJ-Ph.D).Congress XIV

Pattaya (Tailàndia)

Modeling complex systems from first principles: The water gas shift reaction on Pt/ceria catalyts

Francesc Illas

XXXIX International Conference of Theoretical Chemist of Latin Expression

Granada(Espanya)

Prediction of Optical Excitation Energies of Bulk Oxides from Density Functional Theory and Quasi Particle Calculations

Sergio Tosoni and Francesc Illas

Theoretical study of CO oxidation by Cu, Ag and Au nanoparticles and extended surfaces

S. G. Otero, B. Pascucci, F. Illas, M. M. Branda, P. G. Belelli

Density Functional Theory bases study of metanol adsorption and decomposition on low index Miller CeO₂ surfaces

M.M. Branda, A. Bruix, F. Illas

Density Functional Theory based study of NO₂ reduction by Cu, Ag and Au: nanoparticles versus extended surfaces

B. Pascucci, G. S. Otero, P. G. Belelli, F. Illas, M.M. Branda.

Annual Meeting of COST 1104 action: Reducible oxide chemistry, structure and functions

Uppsala (Suècia)

Management committee

Francesc Illas

Oxygen vacancy formation on steps on CeO₂(111).

S.M. Kozlov, K.M. Neyman

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

S.M. Kozlov, F. Viñes, N. Nilius, S. Shaikhutdinov, K.M. Neyman

Substrate mediated diversity in Pt-CeO₂ interactions.

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

Ionic Pt-CeO₂ composites for fuel cells applications: Combined experimental and density-functional studies.

K.M. Neyman

WG1/WG3 Meeting of the COST Action CM1104 “Reducible oxide chemistry, structure and functions”

TU Vienna, Vienna (Austria)

Distinguishing different Pt sites in Pt/CeO₂ via CO adsorption: A DFT study.

H.A. Aleksandrov, P.S. Petkov, K.M. Neyman, G.N. Vayssilov

Steps on CeO₂(111): Step energies, STM appearance, O vacancy formation.

K.M. Neyman

On the concept of ionic platinum species in catalytic materials based on Pt-CeO₂

K.M. Neyman

**Convergent Distributed Environment for Computational Spectroscopy
CoDECS 2013 Workshop**

San Lorenzo de El Escorial (Espanya)

Electronic structure and properties of F-doped titania

S. Tosoni, O. Lamiel-Garcia, F. Illas

Atomic and electronic structure of F-doped TiO₂ bulk and surfaces

O. Lamiel-Garcia, S. Tosoni, F. Illas

On the low lying magnetic states of organic diradicals with phenyl bridges

D. Reta, I. de P.R. Moreira, F. Illas, A. K. Pal, S. N. Datta

Frontiers in Modelling Optical Excitations of Materials

Chicheley (Regne Unit)

*Optical Excitations in Bulk Oxides from Density Functional Theory
and Quasi Particle Calculations*

S. Tosoni and F. Illas

18 Quantum System in Chemistry and Physics

Paraty (Brasil)

Towards ab initio modeling of doped high T_c superconducting cuprate parent compounds

Francesc Illas

Laboratory Astrophysics 2013

Kassel (Alemanya)

Initial Stages of Silicate Dust Nucleation: Bottom-up Insights from Computational Modelling

S. T. Bromley

LASSIE 2013 Summer School: State-of-the-art Astrochemistry

París (França)

1.) *Structure of Nanoscale Dust Precursors*, 2.) *A Bottom-up Approach to Dust Nucleation: Nano-silicates*, 3.) *Calculating Surface Energies and Absorption Energies: VASP*

S. T. Bromley

Theory of Atomic and Molecular Clusters VII

Birmingham (Regne Unit)

Nucleation of Nanosilicate Clusters: from the Interstellar Medium to Aqueous Solution

S. T. Bromley

Density-functional modelling of CeO₂ nanoparticles: Structure, oxygen mobility and interactions with adsorbed molecules and metal species.

K.M. Neyman

Deutsche Physikalische Gesellschaft Spring Meeting of the Condensed Matter Section 2013

Regensburg (Alemanya)

Bandgap Engineering via Nanoporosity in ZnO

I. Demiroglu, S. Tosoni, F. Illas, S. T. Bromley

19th International Vacuum Congress IVC-19

París (França)

Competing Mechanisms of Catalytic H₂ Formation and Dissociation on an Ultrasmall Silicate Nanocluster Dust Precursor

B. Kerkeni, S. T. Bromley

International Symposium on Atomic Cluster Catalysis

Tsinghua University, Beijing (R. P. de la Xina)

Density-functional modelling of CeO₂ nanoparticles.

K.M. Neyman

China-Europe International Workshop on Alloy Nanoparticles

Beijing (R. P. de la Xina)

Density-functional modelling of mono- and bimetallic nanoparticles relevant to catalysis.

K.M. Neyman, S.M. Kozlov

I Jornada d'Investigadors Predoctorals Interdisciplinària (JIPI)

Universitat de Barcelona, Barcelona (Espanya)

Computational Chemistry for Nanostructuring Effects in Heterogeneous Catalysis.
S. M. Kozlov

An Experimental and Theoretical point of view of Ion-Molecule Reactions
E. López, J. Aguilar, J.M. Lucas, J. de Andrés, M. Albertí, A. Aguilar

International Summer School on Basic Concepts and First-Principles Computations for Surface Science: Applications in Chemical Energy Conversion
Nordeney (Alemanya)

H adsorption and absorption in Pd nanoparticles supported on MgO and unsupported Pd nanoparticles: Is consideration of a substrate always a must?
S.M. Kozlov, K.M. Neyman

International Conference on Computer Science ICCS 2013 / 7th Workshop on Computational Chemistry
Barcelona (Espanya)

Performance analysis of two quantum reaction dynamics codes: Time-dependent and time-independent strategies
P. Gamallo, M. González, F. Huarte-Larrañaga

Quantum Scattering of the Ne + H₂⁺ reaction: Comparison of TD and TI computational tools
F. Huarte-Larrañaga, M. González, P. Gamallo

9th EBSA European Biophysics Congress
Lisboa (Portugal)

QM/MM study of HCV NS3/NS4A protease with its main substrates: from the structure to the kinetics
J. A. Martínez, R. Martínez, M.P. Puyuelo, L. Masgrau, M. González

V Jornadas de Jóvenes Investigadores en Física Atómica I Molecular
Madrid (Spain)

Reacciones Ion-Molécula con Metales Alcalinos
E. López, J. Aguilar, J.M. Lucas, J. de Andrés, M. Albertí, A. Aguilar

XXV International Symposium on Molecular Beams (ISMB 2013)
Prague (República Txeca)

Gas Phase Dehydrohalogenation Reactions of Halogenated Organic Compounds Induced by Collisions with Alkali Ions (Li⁺, Na⁺ and K⁺)
J. Aguilar, J.M. Lucas, J. de Andrés, F. Huarte, M. Albertí, D. Bassi and A. Aguilar

Hybrid Quantum Mechanics / Molecular Mechanics (QM/MM) Approaches to Biochemistry (and beyond)

CECAM-EPFL Lausanne (Suïssa)

Membre del comitè organitzador de l'escola
Carme Rovira

EMBO conference - Spatial 2013: From Spatial Signaling to Sensing Spatiality

Dead Sea (Israel)

Negative-feedback self-regulation contributes to high-fidelity transmembrane signal transduction (pòster i comunicació oral)
M. Jurado, R. Reigada

IX Seminarios de Estudios Avanzados en Diseño Molecular y Bioinformática

Varadero (Cuba)

Analyzing the Electronic Structure of Molecules Using Continuous Symmetry Measures (conferència invitada)
P. Alemany

Electronic Properties of Covellite (CuS) (pòster)
S. Conejeros, I. Ribeiro, M. Llunell, P. Alemany

Computational Study of D- π -A Organic Dyes for Dye Sensitized Solar Cells (pòster)
C. Climent, D. Casanova

ESTADES EN CENTRES EXTERNS

- F. Illas **Indian Institute of Technology, Mumbai (Índia)**
Visita en el marc d'un programa India-Spain bilateral. Gener 2013
- K.M. Neyman **Nanyang Technological University, Singapur**
Professor associat visitant invitat, School of Chemical and Biomedical Engineering. Febrer-Març 2013
- S.M. Kozlov **University of Genova, Genova (Itàlia)**
Estada de recerca predoctoral. Març-Abril 2013
- M. Albertí **Università di Perugia, Perugia (Itàlia)**
Professor visitant, Dipartimento di Chimica. Abril-Juliol 2013.
- S. Madurga **Sofia University, Sofia (Bulgària)**
Professor visitant invitat, Chemistry Faculty. Maig 2013
- C. Sousa **University of Groningen, Groningen (Països Baixos)**
Professora visitant invitada, Department of Chemical Physics and Zernike Institute for Advanced Materials. Juliol 2013.
- K.M. Neyman **University in Prague, Prague (República Txeca)**
Investigador visitant invitat. Juliol-Agost 2013
- K.M. Neyman **Friedrich-Alexander-Universität Erlangen-Nürnberg, Erlangen
(Alemanya)**
Investigador visitant invitat, School of Chemical and Biomedical Engineering. Juliol-Agost 2013
- J. J. Novoa **Clark University, Worcester (MA, Estats Units)**
Professor visitant invitat, School of Chemistry. Setembre-October 2013
- M. Mondelo **Universität Bielefeld (Alemanya)**
Estada de recerca predoctoral. Octubre 2013

- M. Albertí **Università di Perugia, Perugia (Itàlia)**
Professor visitant en any sabàtic, Dipartimento di Chimica. Setembre-Desembre 2013.
- E. López **Università di Trento, Trento (Itàlia)**
Estada de recerca predoctoral, Dipartimento di Fisica. Octubre-Desembre 2013.

PARTICIPACIÓ EN PROJECTES D'INVESTIGACIÓ _____

Grup d'Estructura Electrònica.

Santiago Alvarez Reverter, Universitat de Barcelona

2009SGR1459, 2012-2014

Agència de Gestió d'Ajuts Universitaris i de Recerca

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

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

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

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

Grup de recerca consolidat d'estructura de proteïnes

Miquel Coll Capella, Consell Superior d'Investigacions Científiques (CSIC)

2009SGR-1309, 2010-2013

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

Grup de Bioquímica Integrativa.

Jaime Rubio Martínez . Marta Cascante Serratosa. Universidad de Barcelona.

2009SGR1308, 2009-2013

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

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

Francesc Illas Riera, Universitat de Barcelona

2013

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

Estructura electrónica y propiedades de moléculas y sólidos inorgánicos.

Eliseo Ruiz Sabin i Pere Alemany Cahner, Universitat de Barcelona

CTQ2011-23862-C02, 2009-2014

Dirección General de Investigación

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 (DGI)

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 (DGI)

Dinámica de procesos químicos mediante haces moleculares y métodos teóricos.

Antonio Aguilar Navarro, Universitat de Barcelona

CTQ2010-16709

Ministerio de Ciencia en Innovación

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

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

Francesc Mas Pujadas, Universitat de Barcelona

CTM2012-39183, 2013-2017

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)

Quantum-chemical study and computational design of advanced materials

Francesc Illas Riera, Universitat de Barcelona

CTQ2012-30751, 2013-2015

Ministerio de Economía y Competitividad (MINECO)

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)

Simulation of reactive processes in heme enzymes, glycoside hydrolases/transferases and peptide-bound nanoparticles by means of ab initio molecular dynamics-based methods

Carme Rovira Virgili, Universitat de Barcelona

CTQ2011-25871, 2012-2014

Ministerio de Economía y Competitividad (MINECO)

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

Fermín Huarte Larrañaga, Universitat de Barcelona

CTQ2009-12215, 2009-2013 (prorrogat)

Ministerio de Economía y Competitividad (MINECO)

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

Jaime Rubio Martínez . Universidad de Barcelona.

CTQ2011-29285-C02-02 , 2012-2014

Ministerio de Ciencia e Innovación. Proyectos de Investigación fundamental no orientada.

Modelización de materiales formados por mezclas de óxidos con relevancia tecnológica y medioambiental

Stefan Bromley, Universitat de Barcelona

MAT2012-30924, 2013-2015

Ministerio de Economía y Competitividad (MINECO)

Estructura, Redes y Motivos Celulares.

Ramon Reigada Sanz, Universitat de Barcelona

BFU2010-21847-C02-0 (subprograma BMC), 2011-2013

Ministerio de Ciencia e Innovación (MICINN)

Assessorament en projectes de fotocàtàlisi

Francesc Illas Riera

INAEL, 2011-2013

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

Knowledge led structure prediction for nanostructures

Scott Woodley, University College London

EP/K038958/1, 2013-2018

Engineering and Physical Science Research Council (EPSRC), Regne Unit

Planetary entry integrated models (Phys4Entry).

Ramón Sayós Ortega, Universitat de Barcelona

Referencia, FP7-SPACE-2009-1, 242311

7è Programa Marc de la Unió Europea (UE)

Design of thin-film nanocatalysts for on-chip fuel cell technology

Konstantin Neyman, Universitat de Barcelona

FP7-NMP.2012.1.1-1, Ref. No.310191, 2012-2016

European FP7 'Cooperation' - Research theme: 'Nanosciences, nanotechnologies, materials and new production technologies'

Metabolic Flux Analysis and Cancer (METAFLUX)

Jaime Rubio Martínez . Marta Cascante Serratosa. Universitat de Barcelona.

PITN-GA-2010-264780, 2010-2014

FP7-PEOPLE. Comissió Europea.

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)

Theoretical study of tunable photomagnetic compounds

Ria Broer, Universitat de Groningen, Carme Sousa, Universitat de Barcelona

08PR2650, 2009-2013

Nederlandse organisatie voor toegepast natuurwetenschappelijk onderzoek TNO (Països Baixos)

Explicit Control Over Spin-states in Technology and Biochemistry (ECOSTBio)

Marcel Swart, Universitat de Girona, Carme Sousa, Universitat de Barcelona

CM1305, 2013-2017

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 (Spanish representative in the Management Committee)

CM0904, 2010-2014

European Framework for Cooperation in Science and Technology (COST)

Nanoalloys as advanced materials: from structure to properties and applications

Konstantin Neyman, Universitat de Barcelona (Spanish representative in the Management Committee; lider of the Workgroup "Catalysis")

MP0903, 2010-2014

European Framework for Cooperation in Science and Technology (COST)

Nanostructured materials for solid-state hydrogen storage

Konstantin Neyman, Universitat de Barcelona (member)

MP1103, 2011-2015

European Framework for Cooperation in Science and Technology (COST)

Reducible oxide chemistry, structure and functions

Konstantin Neyman, Universitat de Barcelona (deputy Spanish representative in the Management Committee)

CM1104, 2012-2016

European Framework for Cooperation in Science and Technology (COST)

100111010
101010110
11 **iqtc** 0
010111101
010000010



Institut de Química Teòrica
i Computacional