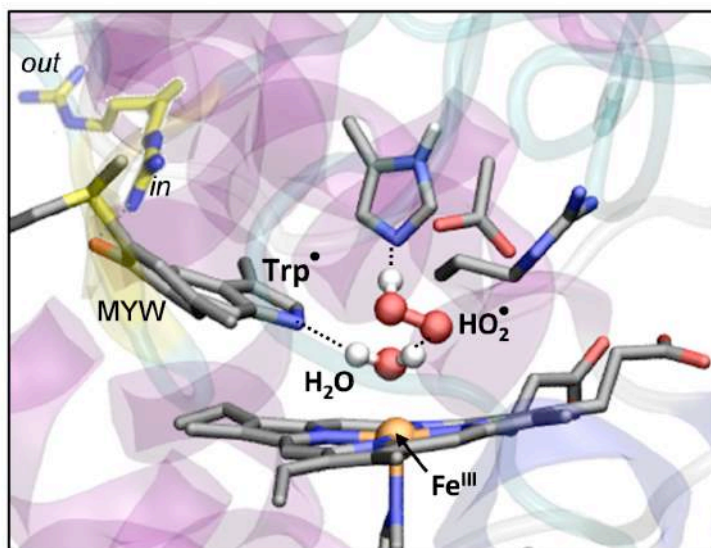


# Institut de Química Teòrica i Computacional de la Universitat de Barcelona (IQTCUB)





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 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 per a resoldre problemes relacionats amb la seva recerca. Aquesta, 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 de la *Red Española de Supercomputación (RES)* i del CSUC (abans 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.

Un any més 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 l'agraïment de tots els investigadors i professors de l'IQTCUB. Mantenir la infraestructura de càlcul on es du a terme una recerca competitiva i de qualitat no hagués estat possible sense aquest suport i el d'un equip de tècnics, sovint invisibles, que fan que tot funcioni adequadament. La memòria de recerca que segueix mostra la vitalitat de l'IQTCUB, la considerable productivitat científica i la qualitat dels treballs publicats 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 2014 representa també un nou cicle ja comença el meu segon i últim 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 de 2013 i que podeu consultar a la nostra renovada 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 de l'IQTCUB	4
I.3 Membres de l'IQTCUB	5
I.4 Equip tècnic	8
I.5 Equipaments	8
II. ACTIVITATS DE L'IQTCUB.....	18
II.1 Activitats de tipus general	18
II.2 Seminaris i conferències de l'IQTCUB	21
II.3 Investigadors convidats per l'IQTCUB	23
III. ACTIVITAT CIENTÍFICA DELS MEMBRES DE L'IQTCUB.....	24
III.1 Resultats més rellevants	24
III.2 Llista de publicacions	40
Articles publicats	
Capítols de llibres i proceedings	
III.3 Altres activitats	55
Tesis doctorals	
Màsters oficials	
Participació a congressos	
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

<b>Prof. Francesc Illas Riera</b>	<i>Director</i>
<b>Prof. Ramón Sayós Ortega</b>	<i>Tresorer i Secretari</i>
<b>Prof. Carme Rovira Virgili</b>	<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 complexes, 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 76 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.

<b>Cognoms</b>	<b>Nom</b>	<b>Departament/Unitat</b>
<b>Catedràtics</b>		
Aguilar Navarro	Antonio	Química Física
Alemaný i Cahner	Pere	Química Física
Alvarez Reverter	Santiago	Química Inorgànica
Bofill Villà	Josep Maria	Química Orgànica
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
<b>Professors Titulars</b>		
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
Gamallo Belmonte	Pablo	Química Física
Madurga Díez	Sergio	Química Física
Reigada Sanz	Ramón	Química Física

**Professors Associats**

Gómez Coca	Silvia	Química Inorgànica
Prats García	Hèctor	Química Física
Tercero Mohedano	Javier	Química Inorgànica

**Professors d'Investigació ICREA**

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

**Investigadors Postdoctorals***Juan de la Cierva*

Jover Modrego	Jesús	Química Inorgànica
---------------	-------	--------------------

*Beatriu de Pinós-Marie Curie*

Cirera Fernández	Jordi	Química Inorgànica
------------------	-------	--------------------

*Beatriu de Pinós*

Albareda Piquer	Guillem	IQTCUB
Jornet Somoza	Joaquim	Química Física

*Ramón y Cajal*

Ribas Ariño	Jordi	Química Física
Viñes Solana	Francesc	Química Física

*Altres*

Álvarez Falcón	Leny	Química Física
Chul Ko	Kyoung	Química Física
Kovács	Gábor	Química Física
Pastor del Campo	Isabel	Química Física



**Investigadors Predoctorals***Beca FPI*

Aguilar Fargas	Javier	Química Física
Alcon Rovira	Isaac	Química Física
Alonso Gil	Santiago	Química Orgànica
Climent Biescas	Clàudia	Química Física
Falceto Palacín	Andrés	Química Inorgànica
Jurado Sáez	Manuel	Química Física
Posada Pérez	Sergio	Química Física
Vela Llausi	Sergi	Química Física
Vilà Casanova	Arnau	Química Física

*Beca FPU*

Capdevila Cortada	Marçal	Química Física
Kozlov	Sergey M.	Química Física
Mondelo Martell	Manel	Química Física
Rojas Cervellera	Victor	Química Orgànica

*Beca UB*

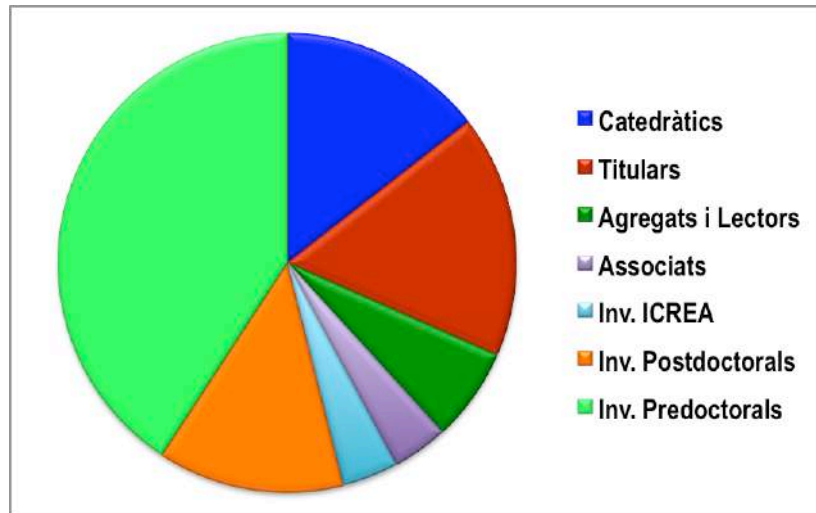
Fumanal Quintana	Maria	Química Física
Lamiel Garcia	J. Oriol	Química Física
Raich Armendáriz	Lluís	Química Orgànica

*Beca FI*

López Marne	Estefanía	Química Física
-------------	-----------	----------------

*Altres*

Alonso Benito	Gerard	Química Física
Amoza Dávila	Martín	Química Inorgànica
Balcells Nadal	Cristina	Química Física
Blancafort Jorquera	Miquel	Química Física
Demiroglu	Ilker	Química Física
Figueroba Sánchez	Alberto	Química Física
Iglesias Fernández	Javier	Química Orgànica
Martín Rodríguez	Alejandro	Química Inorgànica
Maxwell Villacorta	Lindley	Química Inorgànica
Morales Martínez	Roser	Química Inorgànica
Notario Estévez	Almudena	Química Física
Pueyo Bellafont	Noelia	Química Física
Reta Mañeru	Daniel	Química Física
Sopena Moros	Arturo	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:

<b>Jordi Inglés Camats</b>	<i>Responsable de sistemes</i>
<b>Raul Porcel Martínez</b>	<i>Tècnic informàtic</i>
<b>Teresa Arenal Porcel</b>	<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 dues 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 i dos de 9000 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 360.000 €)

*Tipus de màquina* Clúster heterogeni  
*Sistema Operatiu* SLES11.  
*Serveis* Clúster de càlcul.  
*Estructura* 28 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

**5 nodes INTEL Supermicro SuperServer 8017R-TF+**

CPU: 4 2.3GHZ Xeon OctoCore

RAM: 512GB

HD: 3 discos de 1TB

Xarxa: 2 targetes 100/1000 (xarxa interna)

Xarxa: 2 targetes 10GB (xarxa calcul)

Xarxa d'administració IPMI

**Clúster GPU** (valor aproximat 30.000 €)

*Tipus de màquina* Clúster heterogeni

*Sistema Operatiu* SLES11.

*Serveis* Clúster de càlcul amb GPU

*Estructura* 23 nodes en clúster

*Comentaris* Tots els processadors son de 64 bits

*Especificacions:*

**Node**

CPU: 1 Intel Core i7 950 3,06GHZ

RAM: 16GB

HD: 1 disc de 1TB (Sistema operatiu)

Xarxa: 1 targeta 100/1000 xarxa interna

GPU: 1 NVIDIA GTX580, 1 NVIDIA GTX480

**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

GPU: 8 NVIDIA GTX580

**Node**

CPU: 1 AMD FX-4100 QuadCore 3,30GHZ

RAM: 16GB

HD: 1 disc dur de 1TB

Xarxa: 1 targeta 100/1000 (xarxa interna)

GPU: 1 NVIDIA GTX770

**Node INTEL ASUS ESC4000 G2**

CPU: 2 Xeon SixCore 2GHZ

RAM: 32GB

HD: 1 disc dur de 2TB

Xarxa: 2 targetes 100/1000 (xarxa interna)

Xarxa d'administració IPMI

GPU: 4 NVIDIA GTX TITAN

**Node INTEL ASUS ESC4000 G2**

CPU: 2 Xeon SixCore 2.4GHZ

RAM: 32GB

HD: 1 disc dur de 1TB

Xarxa: 2 targetes 100/1000 (xarxa interna)

Xarxa d'administració IPMI

GPU: 4 NVIDIA GTX TITAN BLACK

## SERVIDORS

---

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

*Tipus de màquina* Clúster DELL

*Sistema Operatiu* SLES 11

*Serveis* Clúster de discos formant 8TB de disc per exportar mitjançant GlusterFS les aplicacions i el directori de treball en xarxa a tots els clústers.

*Estructura* 2 nodes en clúster

*Comentaris* Servei crític amb un sai dedicat i fonts redundants.

*Especificacions:*

**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'administració 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'administració ILO

### **Servidors d'entrada portals** (valor aproximat 2.300 €)

*Tipus de màquina* 2 màquines redundants HP ProLiant DL120 G5  
*Sistema Operatiu* Debian stable  
*Serveis* SGE Execution Host, Heartbeat, ssh server  
*Estructura* 2 nodes redundants  
*Comentaris* Portals d'entrada dels usuaris per enviar càlculs i accedir a les dades.  
*Especificacions:*

#### **Node HP ProLiant DL120 G5**

CPU: 1 Xeon Dual Core 2.33GHZ.  
RAM: 8GB.  
HD: 1 disc de 160GB (Sistema operatiu).  
Xarxa: 2 targetes 100/1000 xarxa interna  
Xarxa d'administració ILO.

### **Servidors de virtualització** (valor aproximat 18.300 €)

*Tipus de màquina* 4 màquines redundants  
*Sistema Operatiu* Debian stable  
*Serveis* Xenha i tots els serveis virtuals ofertats al IQTCUB  
*Estructura* 4 nodes redundants  
*Comentaris* 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.
<i>Especificacions</i>	<b>Màster HP ProLiant DL385</b> 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

---

- Màquina Backup DELL R515 (màquina de backup amb 4TB de disc i un SAI de suport).
- Màquina cintes HP MSL4048 (màquina de cintes amb 48 cintes amb capacitat aproximada de 1TB/cinta).
- Màquina d'administració (pc amb 3 targetes de xarxa per suport a incidències crítiques).
- Màquina proxy (servidor que dona sortida a la xarxa pública des de la xarxa del 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

---

Processadors.....3230 CPU's

Memòria .....21688 GB RAM

Discs de Càlcul ..... 174 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

2.100.000 €\*

\*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

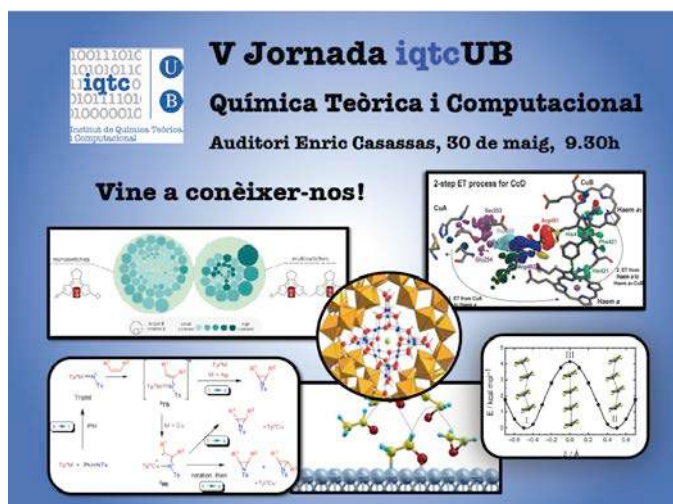
## II. ACTIVITATS DE L'IQTCUB

### 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 2014.

a. *5<sup>a</sup> Jornada de l'IQTCUB*. El dia 30 de Maig del 2014 tingué lloc la cinquena 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 Prof. Denis Jacquemin de la *Université de Nantes*, el Prof. Feliu Maseras de l'ICIQ, el Prof. Víctor Guallar del *BSC-IRB*, el Dr. Xavier López de la *Universitat Rovira i Virgili*, i el Dr. Francesc Viñes i Dr. Sergi Vela de la *Universitat de Barcelona*. Les despeses totals de la Jornada es corresponen al cost de l'estada del Prof. Jacquemin, juntament amb el servei de càtering per als assistents.

Despesa pressupostada: 1300 €



b. *Promoció i incentivació a la recerca*. Enguany l'IQTCUB ha concedit un total de quatre *Ajuts d'iniciació 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 realització d'un màster oficial de la UB i la col·laboració en les tasques de recerca dels grups de l'IQTCUB. Aquestes beques han estat concedides al senyor Alejandro Martín

Rodríguez, i a les senyores Alba Nin Hill i Mireia Via Nadal. Despesa associada: 6140 €



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 quarta edició amb un gran èxit de participació, rebent més de 30 sol·licituds d'inscripció. En l'edició d'enguany, celebrada del 25 de Juny a l'1 de Juliol, hi participaren 27 alumnes.



d. *Curs Avançat de Química Computacional.* Donat l'èxit de les edicions anteriors d'aquest curs i la gran satisfacció mostrada pels alumnes participants, aquest any l'Institut ha endegat un nou curs avançat amb l'objectiu d'ampliar els coneixements d'informàtica aplicada a la química computacional adquirits prèviament. El curs s'ha celebrat del 2 al 8 de Juliol i ha estat adreçat principalment als alumnes que ja haguessin assistit prèviament al curs d'introducció a la Química Computacional o a estudiants que haguessin assistit a

un curs de Química Quàntica. L'assistència d'aquest curs va ser de 16 estudiants.

L'IQTCUB ha destinat un total de 670 € a despeses de catèring per a la realització dels dos cursos de Química Computacional.



Fotografia feta durant el *Curs d'Introducció a la Química Computacional* realitzat a la Facultat de Química de la Universitat de Barcelona.



Fotografia feta durant el *Curs Avançat de Química Computacional* realitzat a la Facultat de Química de la Universitat de Barcelona.



## II.2 SEMINARIS I CONFERÈNCIES DE L'IQTCUB

L'IQTCUB ha organitzat un total de tretze seminaris i/o conferències durant 2014.

1. **Prof. Roy Johnston** (Universitat de Birmingham) Regne Unit  
*Combining Theory and Experiment to Determine the Structures of Gas Phase Metal Clusters*  
25 de Febrer, 2014
2. **Dr. Marcos Fernández-García** (Consejo Superior de Investigaciones Científicas) Espanya  
*Multitechnique approach to Heterogeneous Catalysis: from preparation to reaction*  
27 de Febrer, 2014
3. **Dr. Joaquim Jornet-Somoza** (Universitat de Montpellier) França  
*The role of pyramidalisations, torsion and stretching in the  $V \leftarrow N$  and  $R(3s) \leftarrow N$  photodynamics of ethylene*  
28 de Febrer, 2014
4. **Prof. Jaakko Akola** (Universitat de Tampere) Finlàndia  
*Au nanoclusters as superatoms: DFT and MD simulations*  
7 de Març, 2014
5. **Dr. Martijn Zwijnenburg** (University College London) Regne Unit  
*A Computational Perspective on the Photochemistry of Materials*  
31 de Març, 2014
6. **Prof. Juan E. Peralta** (Universitat de Michigan) Estats Units  
*Magnetic Exchange Couplings in Transition Metal Complexes from First-Principles Calculations*  
2 de Juny, 2014
7. **Federico Brivio** (Universitat de Bath) Regne Unit

*DFT calculations for Perovskites Solar Cells*

13 de Juny, 2014

8. **Dr. Nisanth N. Nair** (Indian Institute of Technology Kanpur) India  
*QM/MM Modelling of Catalytic Reactions: Developments and Applications*  
3 de Juliol, 2014
  
9. **Prof. Dr. Hans-Peter Steinrück** (Friedrich-Alexander University Erlangen-Nuremberg)  
Alemanya  
*Surface Chemistry of Hydrocarbons - from Small Molecules to Graphene and Liquid Organic Hydrogen Carriers*  
17 de Juliol, 2014
  
10. **Prof. Carmen Domene** (Kings College London) Regne Unit  
*Studies of ion conduction through cell membranes using free energy methods*  
18 de Setembre, 2014
  
11. **Dr. David Balcells** (Universitat d'Oslo) Noruega  
*DFT Studies on the Dark Side of Catalysis: Active Species Generation and Catalyst Degradation*  
3 de Desembre, 2014
  
12. **Dr. Jon M. Maxtain** (Universitat del País Basc) Espanya  
*Novel Solid Phases by Self-Assembling of Nanoclusters*  
12 de Desembre, 2014
  
13. **Dr. Sergi Ruiz-Barragan** (Institute for Molecular Science) Japó  
*Photophysics of fulvene under the non-resonant Stark effect. Shaping the conical intersection seam*  
16 de Desembre, 2014



## II.3 INVESTIGADORS CONVIDATS PER L'IQTCUB

Durant el 2014, l'IQTCUB ha acollit un total de sis visites temporals d'investigadors externs.

1. **Miroslava Nedyalkova** (visitant convidat)  
Universitat de Sofia, Bulgària  
Febrer, 2014
2. **Ichraf Oueslati** (visitant convidat)  
Université Pierre et Marie Curie, Paris, França  
Març-Juliol, 2014
3. **Alexander S Mikhailov** (visitant convidat)  
Institut Fritz Haber, Alemanya  
Juny, 2014
4. **Laura Pitulice** (visitant convidat)  
West University of Timisoara, Romania  
Setembre, 2014
5. **Mikhail Polynski** (visitant convidat)  
Institute of Organic Chemistry, Russian Academy of Sciences, Moscú, Rússia  
Setembre-Octubre, 2014
6. **David Balcells** (visitant convidat)  
Universitat d'Oslo, Finlàndia  
Novembre-Desembre, 2014

## III. ACTIVITAT CIENTÍFICA DELS MEMBRES DE L'IQTCUB

### III.1 RESULTATS MÉS RELLEVANTS

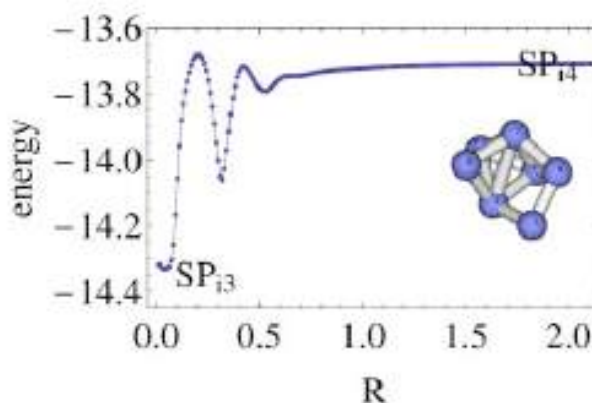
En aquesta secció es descriuen alguns dels resultats més rellevants obtinguts per cada línia de recerca de l'IQTCUB.

#### LÍNIA 1. DESENVOLUPAMENT DE MÈTODES, ALGORITMES I EINES COMPUTACIONALS

**Locating saddle points of any index on potential energy surfaces by the generalized gentlest ascent dynamics**

W. Quapp, J. M. Bofill

**Theor. Chem. Acc.**, 133 (2014) 1510.



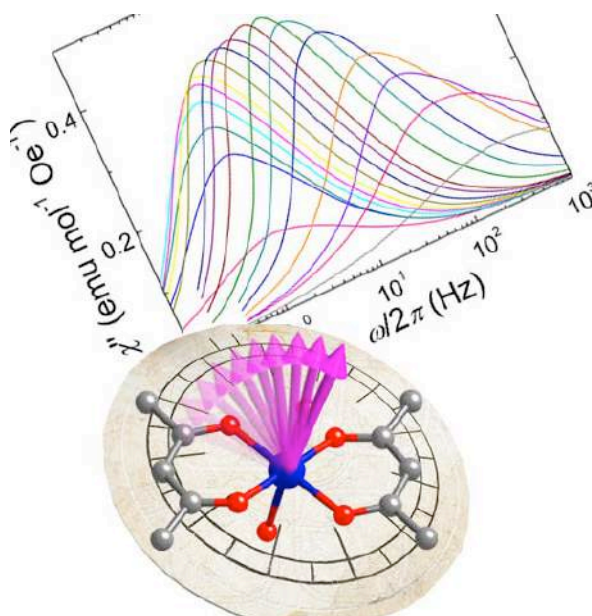
Perfil energètic d'una trajectòria GAD d'índex 4 que comença en un punt estacionari d'índex 3 i acaba en un punt estacionari d'índex 4 de la superfície de potencial LJ<sub>7</sub>. R és una 'coordenada de reacció' abstracta.

S'ha derivat el sistema d'equacions diferencials ordinàries per al mètode de la dinàmica d'ascens suau ( GAD ) que havia sigut proposat anteriorment [ W. E i X. Zhou , Nonlinearity 24, 1831 ( 2011 ) ]. Per a això utilitzem diversos operadors de projecció a una direcció inicialment donada. A través d'exemples moleculars senzills expliquem les dues possibilitats que té una corba GAD: la que pot trobar directament l'estat de transició a través d'un ascens suau, o la que pot anar pel camí que passa per un punt d'inflexió i a partir d'aquest punt al llarg de la cresta, costa avall troba l'estat de transició. Finalment es generalitza el model per poder localitzar estats de transició d'índex més gran d'u.

## LÍNIA 2. CIÈNCIA DELS MATERIALS COMPUTACIONAL

**Origin of slow magnetic relaxation in Kramers ions with non-uniaxial anisotropy**

S. Gómez-Coca, A. Urtizbarea, E. Cremades, P. J. Alonso, A. Camón, E. Ruiz, F. Luis

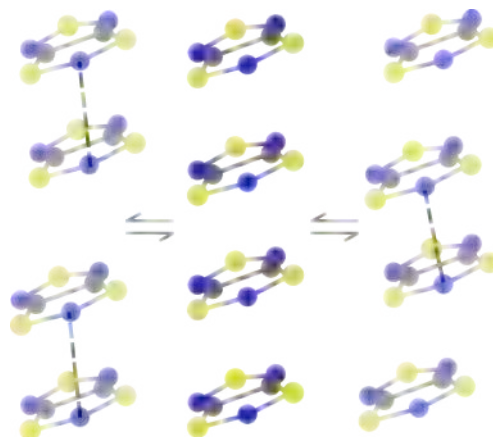
**Nature Commun.**, 5 (2014) 4300.

Càlculs quantitius de primers-principis per a l'ió de Kramers  $\text{Co}^{\text{II}}$  al complex  $[\text{Co}(\text{acac})_2(\text{H}_2\text{O})_2]$  mostren que la relaxació magnètica lenta en aquest i altres sistemes semblants és una conseqüència general de la simetria d'inversió del temps que impedeix processos directes espín-fonó. Aquesta conclusió és independent del signe del paràmetre de desdoblament a camp nul associat a les dues formes d'anisotropia magnètica, amb un eix de magnetització fàcil o un pla de magnetització fàcil. La interacció hiperfina entre els espins electrònic i nuclear obre camins per a la relaxació magnètica que d'altra manera seria prohibit per la simetria d'inversió del temps, i descobreix una estratègia prometedora per al disseny i l'assoliment de memòries magnètiques de mida atòmica.

### The key role of vibrational entropy in the phase transitions of dithiazolyl-based bistable magnetic materials

S. Vela, F. Mota, M. Deumal, R. Suizu, Y. Shuku, A. Mizuno, K. Awaga, M. Shiga, J. J. Novoa, J. Ribas-Arino

**Nature Commun.**, 5 (2014) 4411.

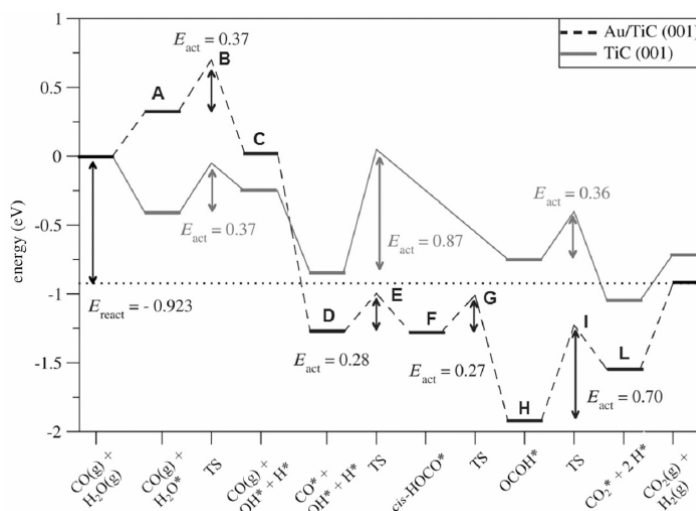


*Pair-exchange dynamics* en el material de TTTA

El radical 1,3,5-trithia-2,4,6-triazapentalenyl neutral (TTTA) és un prototipus de material biestable molecular. Els cristalls de TTTA presenten una transició de fase de primer ordre entre les seves fases diamagnètica a baixa temperatura i paramagnètica a alta temperatura, amb un gran cicle d'histeresi que abasta la temperatura ambient. En base a simulacions ab initio de dinàmica molecular i a noves mesures de raigs X, s'ha descobert que el motiu d'apilament regular en columnes del polimorf d'alta temperatura és el resultat d'una ràpida dinàmica de bescanvi de parells de radicals dins d'una mateixa columna (*fast intra-stack pair-exchange dynamics*). Així doncs, un radical de TTTA donat pot formar dos possibles dímers eclipsats depenent del veí de TTTA adjacent (superior o inferior) amb el qual s'acopla magnèticament, i el qual bescanvia contínuament. Aquesta dinàmica, observada en la fase paramagnètica dins de tot el cicle d'histeresi, és única i és l'origen d'un guany entròpic vibratori significatiu en la transició de baixa temperatura a alta temperatura. Per tant, és d'esperar que exerceix un paper clau en la direcció de la transició de fase. Aquesta troballa proporciona un nou concepte clau per al disseny racional de materials magnètics biestables moleculars, que necessita ser estudiat amb més profunditat.

### Charge Polarization at a Au-TiC Interface and the Generation of Highly Active and Selective Catalysts for the Low-Temperature Water-Gas Shift Reaction

J.A. Rodriguez, P.J. Ramirez, G.G. Asara, F. Viñes, J. Evans, P. Liu, J.M. Ricart, F. Illas  
**Angew. Chem. Int. Ed.**, 53 (2014) 11270.



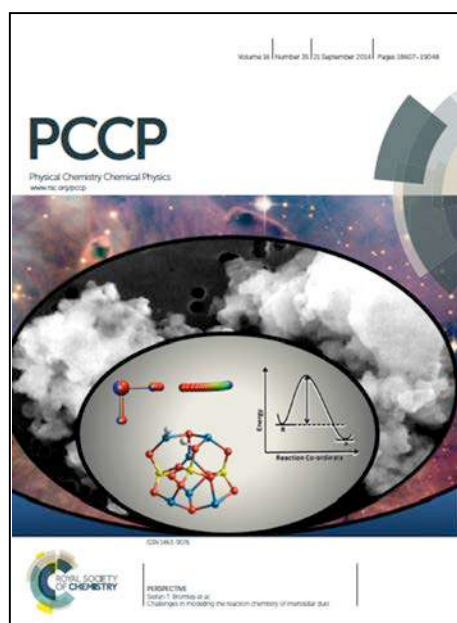
Energies derivades de càlculs DFT per la reacció de WGS sobre la superfície neta de TiC(001) i Au<sub>4</sub>/TiC(001). TS = Estat de transició.

Els àtoms de or en contacte amb el TiC(001) sofreixen una polarització de la seva càrrega. Les fortes interaccions metall-suport fan que el Au/TiC(001) sigui un catalitzador excel·lent per la transformació de aigua en gas (*water-gas shift*, WGS) a baixes temperatures, amb unes freqüències de reacció diversos ordres de magnitud més grans que els observats per catalitzadors convencionals metall/òxid, com ara el Cu/ZnO. Els càlculs DFT indiquen que la reacció WGS segueix un mecanisme associatiu amb del HOCO com a intermedi clau, tot mostrant com la sinèrgia del Au/TiC(001) i la polarització de càrrega es troba al bell mig de la activitat catalítica potenciada del Au/TiC(001) comparada amb el TiC(001).

**Challenges in modelling the reaction chemistry of interstellar dust**

S. T. Bromley, T. P. M. Goumans, E. Herbst, A. P. Jones and B. Slater

**Phys. Chem. Chem. Phys. (Perspective)**, 74 (2014) 58.

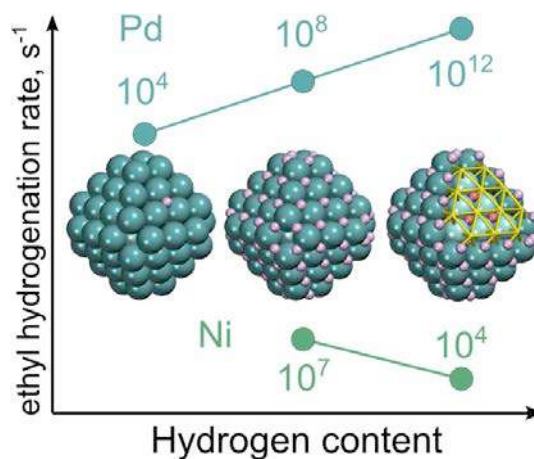


Els reptes en el modelatge de la química de la reacció de pols interestel·lar són revisats de forma concisa.

**How absorbed hydrogen affects catalytic activity of transition metals**

H.A. Aleksandrov, S.M. Kozlov, S. Schauermaun, G.N. Vayssilov, K.M. Neyman

**Angew. Chem. Int. Ed.**, 53 (2014) 13371.

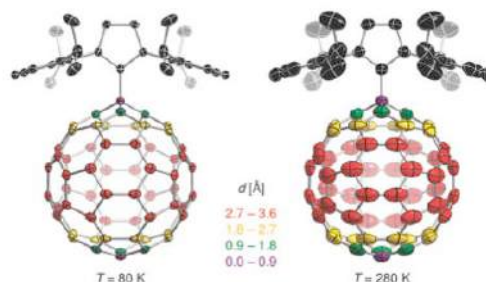


Entenent la hidrogenació en metalls de transició: L'hidrogen subsuperficial,  $H_{\text{sub}}$ , influencia significativament la estabilitat i la reactivitat de l'hidrogen adsorbit en metalls de transició de dues formes diferents. Molt sorprenentment, els càlculs del funcional de la densitat en una reacció representativa, la hidrogenació de l'etil, mostren que aquesta s'accelera en Pd i en Pt, però es frena en Ni i en Rh en presència de  $H_{\text{sub}}$ .

### A Fullerene-Carbene Adduct as a Crystalline Molecular Rotor: Remarkable Behavior of a Spherically-Shaped Rotator

E. Lorbach, E. Maverick, A. Carreras, P. Alemany, G. Wu, M.A. Garcia-Garibay, G.C. Bazan

*Phys. Chem. Chem. Phys.*, 16 (2014) 12980.



Els el·lipsoides de desplaçament tèrmic a 80 i 280 K mostren clarament la presència d'una rotació ràpida del fragment  $C_{60}$  al voltant de l'eix C-C que l'uneix al carbè a altes temperatures. El codi de colors indica la distància dels diferents àtoms del ful·lerè a l'eix de rotació.

Recentment s'ha sintetitzat un nou derivat del ful·lerè fent reaccionar un carbè N-heterocíclic amb el  $C_{60}$ . Les principals característiques de l'adducte zwitterionc són les d'un rotor molecular amb l'esfera del ful·lerè girant al voltant de l'eix determinat per l'enllaç C-C que l'uneix a l'heterocicle d'imidazole. Els experiments de difracció de raig-X a temperatura variable ( $80 \text{ K} < T < 480 \text{ K}$ ) realitzats per estudiar la dinàmica de rotació del grup ful·lerè mostren uns paràmetres de desplaçament atòmic compatibles amb una dinàmica ràpida del ful·lerè altament simètric a l'estat sòlid mentre que el fragment heterocíclic resta pràcticament immòbil. Per a la interpretació d'aquests resultats s'han realitzat càlculs DFT i semiempírics del potencial de rotació del ful·lerè, tant per al compost aïllat com envoltat pel seu entorn més proper al cristall. Aquests càlculs indiquen que l'entorn cristal·lí fa aparèixer un pou de mínima energia en el perfil del potencial de rotació, connectat a set mínims addicionals que es troben a energies lleugerament superiors. Les barreres per saltar d'un mínim a l'altre són totes elles dins el rang de les  $1.5 - 2.5 \text{ kcal mol}^{-1}$ .

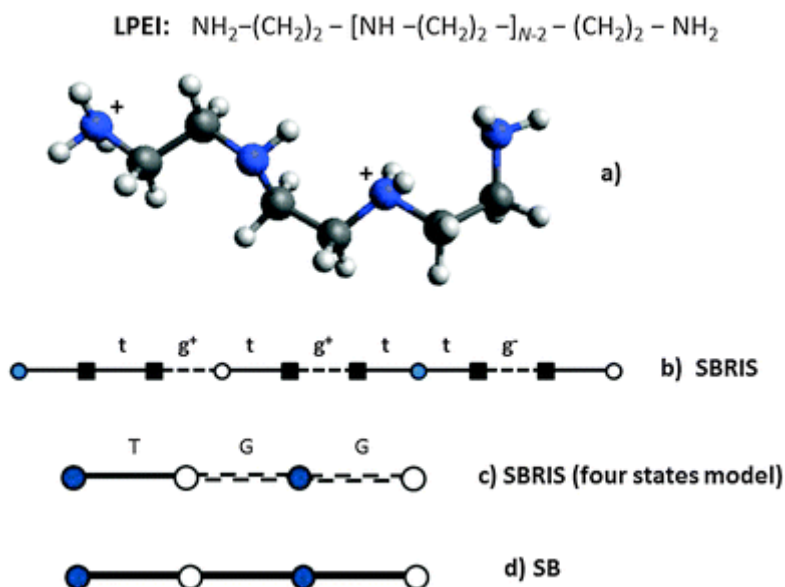


LÍNIA 3. BIOQUÍMICA COMPUTACIONAL I *SOFT MATTER*

**Coupling of conformational and ionization equilibria in linear poly(ethylenimine): a study based on site binding/rotational isomeric state (SBRIS) model**

J.L. Garcés, S. Madurga, M. Borkovec

Phys. Chem. Chem. Phys., 16 (2014) 4626.



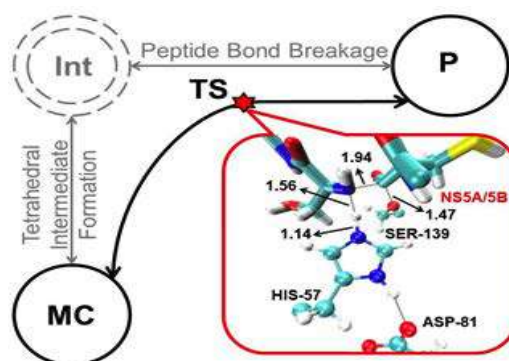
Possible ionization i estat conformational del oligòmer lineal polietilenimina (LPEI) amb quatre grups amina. La conformació i la distribució de càrrega del polielectròlit es tracta a diferents nivells.

Les propietats conformacionals de la molècula de polietilenimina s'han estudiat combinant el model d'equilibri químic SB amb el model conformacional RIS, desenvolupat per Flory. La metodologia resultant (el model SBRIS) s'utilitza per racionalitzar les corbes de valoració experimentals de la polietilenimina. S'han obtingut els paràmetres d'enllaç químic i conformacionals a partir de l'ajust a les macroconstants experimentals. Els valors obtinguts són consistents amb la informació conformacional i sobre reactivitat disponible. Per tal de tenir en compte l'efecte del volum exclòs i de les interaccions electrostàtiques a llarg abast, s'han realitzat simulacions Monte Carlo del mateix sistema. Els resultats indiquen que a altes forces iòniques, les interaccions de llarg abast tenen un impacte molt limitat en les corbes de valoració. En canvi, la seva influència és significativa per tal d'obtenir una descripció acurada del radi de gir.

**Theoretical study of the free energy surface and kinetics of the hepatitis C virus NS3/NS4A serine protease reaction with the NS5A/5B substrate. Does the generally accepted tetrahedral intermediate really exist?**

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

ACS Catal. in press (dx.doi.org/10.1021/cs5011162).



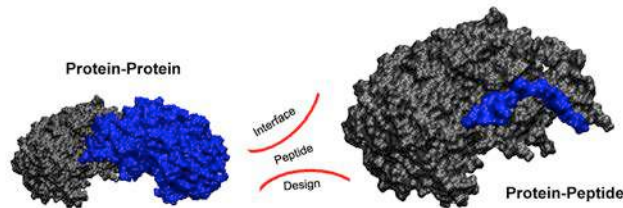
Mecanisme d'acilació concertat obtingut per la reacció de la serín-proteasa NS3/NS4A i el substrat NS5A/5B, comparat amb el mecanisme de dues etapes generalment acceptat. També es mostra una representació molecular del estat de transició caracteritzat.

Els mètodes teòrics SCC-DFTB/MM i EA-VTST/MT es van utilitzar per analitzar el mecanisme i calcular la constant de velocitat de la reacció d'acilació entre la proteasa NS3/NS4A i el substrat NS5A/5B (molt important en el cicle vital del VHC). S'ha obtingut un mecanisme concertat amb un únic estat de transició (TS), en contrast amb el mecanisme de dues etapes generalment acceptat per les serín-proteases. Això està relacionat amb el fet que l'enzim és molt eficaç pel substrat NS5A/5B. El TS pot ser una bona estructura inicial en la recerca d'inhibidors de la proteasa basats en 'TS analogs'. D'altra banda, les barreres d'energia lliure fenomenològiques calculada i experimental només difereixen en 2.3 kcal mol<sup>-1</sup> (tot i que això condueix a una diferència significativa entre ambdós tipus de constants de velocitat), i els valors de l'efecte isotòpic cinètic (H/D), efecte túnel i re-creuament estan d'acord amb el que s'espera per la reacció estudiada.

### Design of an interface peptide as new inhibitor of humanglucose-6-phosphate dehydrogenase

C. Obiol-Pardo, G. Alcarraz-Vizánb, S. Díaz-Moralli, M. Cascante, J. Rubio-Martinez

*Journal of Molecular Graphics and Modelling*, 49 (2014) 110



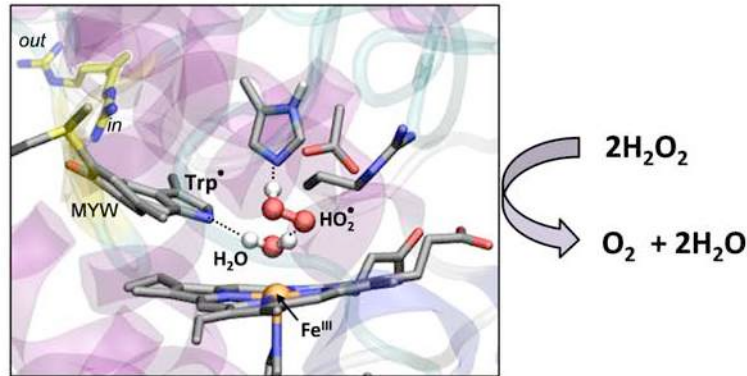
Disseny de pèptids d'interfase

La glucosa -6 - fosfat ( G6PDH ) deshidrogenasa és un enzim essencial que intervé en la primera reacció de la branca oxidativa de la ruta de la pentosa fosfat ( PPP ) . Recentment , G6PDH es va suggerir com una nova diana per a la teràpia del càncer ja que un dels productes finals de la PPP , la ribosa -5 - fosfat , és necessària per a la síntesi d'àcids nucleics i la progressió del tumor . Després d'analitzar la interfície proteïna - proteïna de l'estructura cristal·lina de la G6PDH humana per mitjà de simulacions de dinàmica molecular , hem dissenyat 6 pèptids d'interfície basats en la seqüència natural de la proteïna . Els tres pèptids més prometedors , com es va predir mitjançant càlculs d'energia lliure , es van sintetitzar i un d'ells es va confirmar com un nou inhibidor de G6PDH humana en assaigs experimentals . Junts , el pèptid actiu que es troba i la seva manera de fixació suggerida proposa una nova estratègia per a la inhibició d'aquest enzim i hauria d'ajudar al disseny addicional de nous inhibidors de la G6PDH , potents i no peptídics.

**An ionizable tryptophane residue imparts catalase activity to a peroxidase core**

P. C. Loewen, X. Carpena, P. Vidossich, I. Fita, C. Rovira

**J. Am. Chem. Soc.**, 136 (2014) 7249. JACS Spotlight.



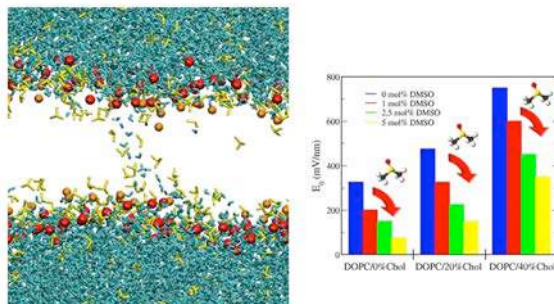
Intermedi de la reacció enzimàtica determinat per simulacions de mecànica quàntica/mecànica molecular (QM/MM)

Si parlem d'enzims i peròxid d'hidrogen (H<sub>2</sub>O<sub>2</sub>), ens trobem amb les catalases i les peroxidases. Les primeres degraden el peròxid d'hidrogen; les segones l'utilitzen per a oxidar altres molècules. Els hemo enzims anomenats catalasa-peroxidasa (KatG) fan ambdues funcions, tot i tenir un centre actiu molt semblant al de les peroxidases (les quals tenen una activitat catalasa menyspreable). Per aquesta raó, mai ha estat clar com les KatG funcionen a nivell molecular. El seu centre actiu es caracteritza per la presència d'un "aducte covalent" únic, format per tres residus de metionina, triptofà i tirosina (MYW) prop del grup hemo, així com un residu crític d'arginina que alterna entre les orientacions "dins" i "fora". Mitjançant simulacions QM/MM i cristal·lografia de raigs X, hem demostrat que el triptofà de l'aducte es desprotona durant el cicle catalític. A més, proposem un mecanisme on l'aducte MYW i l'arginina mòbil actuen com un "switch" electrònic que governa la conversió de peròxid d'hidrogen a aigua i oxígen molecular.

### Effects of Dimethyl Sulfoxide on Lipid Membrane Electroporation

M.L. Fernández, R. Reigada

*J. Phys. Chem. B*, 118 (2014) 9306.



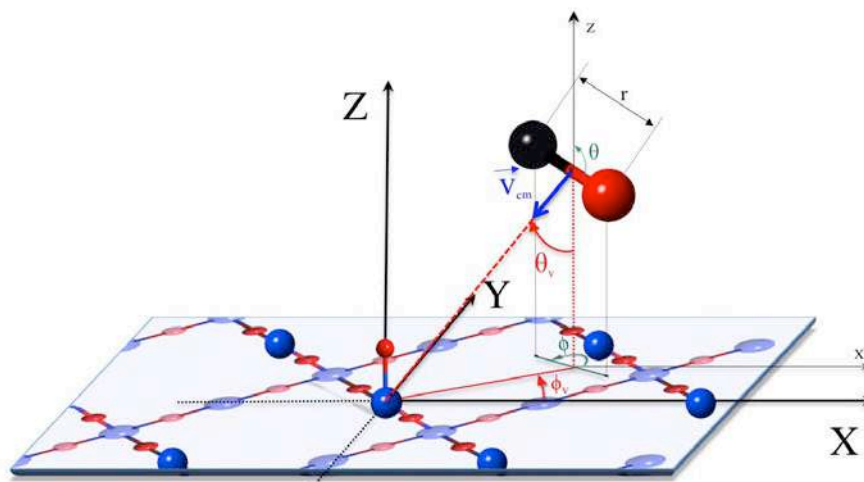
El DMSO (groc) facilita la formació d'electroporus a la membrana i el pas d'aigua (cian). Aquest efecte dona lloc a una reducció del potencial mínim d'electroporació.

La formació de porus en membranes lipídiques pot estar motivada per l'aplicació d'un camp elèctric extern o bé per l'addició de determinats compostos com el dimetil sulfòxid (DMSO). La dinàmica molecular (DM) ha sigut una tècnica numèrica molt utilitzada per investigar molts aspectes de la formació de porus en membranes en ambdues situacions. Mitjançant simulacions de DM, hem analitzat la formació d'electroporus en membranes lipídiques que contenen colesterol i eren afectades per diferents quantitats de DMSO. Demostrem com la combinació dels mecanismes físics i químics donen lloc a condicions més favorables per la formació de porus, i en particular, com l'addició de DMSO en el medi redueix significativament el potencial elèctric mínim requerit per electroporar una membrana lipídica. La forta modificació de les propietats transversals de la membrana, així com l'estabilització energètica dels porus en la seva etapa hidrofòbica deguda al DMSO ens donen les claus fisicoquímiques d'aquest efecte.

## LÍNIA 4. REACTIVITAT I DINÀMICA DE REACCIONS

**ReaxFF molecular dynamics simulations of CO collisions on an O-preadsorbed silica surface**

P. Gamallo, H.Prats, R.Sayós

**J. Mol. Model.** 20 (2014) 2160.Molècula CO interaccionant amb O preadsorbit sobre una superfície de  $\beta$ -cristobalita (001)

S'ha realitzat un estudi dinàmic mitjançant trajectòries clàssiques per a les col·lisions de monòxid de carboni sobre oxigen preadsorbit en una superfície de  $\beta$ -cristobalita (001). Va ser utilitzat un camp de forces reactiu (ReaxFF) per modelar la superfície d'energia potencial. Les col·lisions es van dur a terme fixant diverses condicions inicials: estats rovibracional CO ( $v = 0-5$  i  $j = 0, 20, 35$ ), energies de col·lisió ( $0,05 \leq E_{col} \leq 2,5$  eV), angles d'incidència ( $\theta_v = 0^\circ, 45^\circ$ ) i temperatures de la superfície ( $T_{surf} = 300$  K, 900 K). Els principals processos elementals van ser la reflexió molecular i l'adsorció molecular no dissociativa. També es van formar molècules de  $CO_2$  però en menor extensió, a través d'una reacció Eley-Rideal encara que algunes d'elles van quedar retingudes per la superfície. Les molècules de CO dispersades tendeixen a ser més fredes translacionalment i més calentes internament (rotacionalment i vibracionalment) que les inicials. Aquest estudi dona suport a que la reacció  $CO + O_{ad}$  hauria de ser menys important que la reacció  $O + O_{ad}$  sobre sílice per a condicions inicials similars dels reactius, d'acord amb les dades experimentals.

## Unexpected Reactivity of Amidogen Radical in the Gas Phase Degradation of Nitric Acid

J.M. Anglada, S. Olivella, A. Solé

*J. Am. Chem. Soc.*, 136 (2014) 6834.



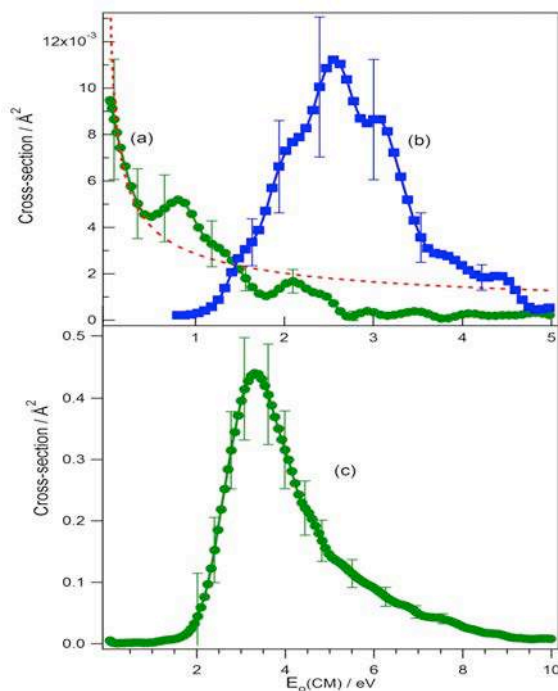
Cicle catalític que implica la oxidació del  $\text{NH}_3$  per part del radical OH i la reacció entre el radical amidogen i l'àcid nítric

S'ha investigat la reacció en fase gasosa entre l'àcid nítric i el radical aminil emprant mètodes de càlcul de l'estructura electrònica de tipus mecànic-quàntic d'alt nivell i càlculs cinètics segons la teoria variacional de l'estat de transició. Els nostres resultats mostren que la reacció té lloc mitjançant un mecanisme de transferència de protó acoblada a la transferència d'un electró amb una constant de velocitat de  $1.81 \times 10^{-13} \text{ cm}^3 \cdot \text{molècula}^{-1} \cdot \text{s}^{-1}$  a 298 K. Aquest valor és similar al de les constants de velocitat de les reaccions del radical hidroxil, ja sigui amb amoníac o amb àcid nítric. Una anàlisi d'aquestes dades en el context de la química de l'atmosfera suggereix que el radical aminil, format en la oxidació de l'amoníac pel radical hidroxil, reacciona amb l'àcid nítric regenerant amoníac. Sobre la base d'aquests resultats, proposem un possible nou cicle catalític que acobla l'oxidació de l'amoníac pel radical hidroxil i la reacció d'àcid nítric amb el radical aminil en l'atmosfera de la Terra.

**Experimental guided ion beam and *ab initio* studies of the reactive processes in gas phase *i*-C<sub>3</sub>H<sub>7</sub>Br and *i*-C<sub>3</sub>H<sub>7</sub>OH collisions with potassium ions**

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

*J. Chem. Phys.*, 141 (2014) 164310.



Dependències de les seccions eficaces amb l'energia CM a les col·lisions  $\text{K}^+ + i\text{-C}_3\text{H}_7\text{Br}$ : (a) formació de l'adducte  $[\text{K-}i\text{-C}_3\text{H}_7\text{Br}]^+$  (●); (b) reacció de deshidrohalogenació (■); (c) reacció de descomposició de l'adducte. Línia discontinua: Model LGS (energies en el sistema CM)

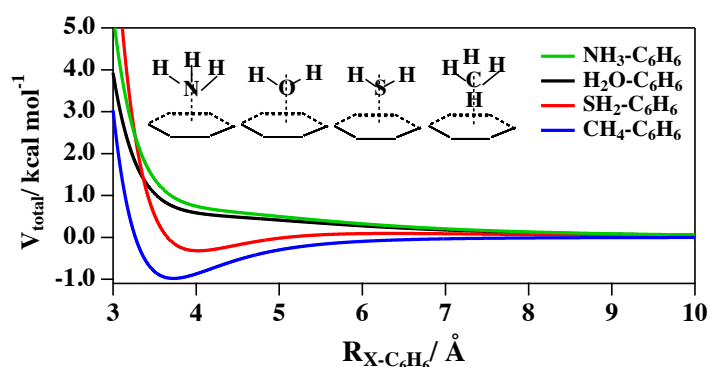
Les col·lisions entre ions potassi i *i*-C<sub>3</sub>H<sub>7</sub>Br i *i*-C<sub>3</sub>H<sub>7</sub>OH, en els respectius estats electrònics fonamentals, s'estudien experimentalment a l'interval 0.10-10.00 eV d'energies de col·lisió en el centre de masses (CM) emprant un aparell de feixos de ions guiats per un camp de radio freqüència. Per al sistema  $\text{K}^+ + i\text{-C}_3\text{H}_7\text{Br}$  s'ha observat la formació de  $\text{KBr}^+$  però la formació del compost anàleg  $\text{KH}_2\text{O}^+$  en el cas del *i*-C<sub>3</sub>H<sub>7</sub>OH ha estat difícil de detectar. A més, s'ha observat la formació dels adductes  $[\text{K-}i\text{-C}_3\text{H}_7\text{Br}]^+$  i  $[\text{K-}i\text{-C}_3\text{H}_7\text{OH}]^+$  així com la seva descomposició en  $\text{C}_3\text{H}_7^+$  i  $\text{KBr}$  o  $\text{KOH}$ , respectivament. Les seccions eficaces de reacció s'han mesurat en unitats absolutes i s'ha obtingut la constant de velocitat tèrmica a 303 K per a la formació de  $\text{KBr}^+$ . Els càlculs *ab initio* a nivell MP2 han proporcionat informació important sobre les característiques de les superfícies de potencial en les quals les reaccions tenen lloc de forma adiabàtica, tot permetent una interpretació qualitativa de les dades experimentals.



### Benzene-Hydrogen Bond ( $C_6H_6-HX$ ) Interactions: The Influence of the X Nature on their Strength and Anisotropy

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

*J. Phys. Chem. A*, 118 (2014) 1651



Potencials d'interacció intermolecular per a  $H_2O-C_6H_6$ ,  $SH_2-C_6H_6$ ,  $NH_3-C_6H_6$ , i  $CH_4-C_6H_6$  segons l'apropament indicat a la figura.

L'energia potencial intermolecular dels dímers  $C_6H_6-SH_2$  i  $C_6H_6-NH_3$  s'ha formulat combinant contribucions electrostàtiques i no electrostàtiques. Els paràmetres rellevants del potencial, calculats a partir de components de les polaritzabilitats molecular, permeten descriure de manera consistent, tant les forces de dispersió atractives com la repulsió. Les prediccions que fa el model de potencial de les característiques de les configuracions més estables s'han comparat amb els resultats de càlculs ab initio. A més, la magnitud de la interacció  $C_6H_6-HX$  s'ha analitzat i els resultats obtinguts s'han comparat amb els corresponents als sistemes  $C_6H_6-H_2O$  i  $C_6H_6-CH_4$ , estudiats anteriorment aplicant la mateixa metodologia. S'ha obtingut informació sobre l'orientació relativa, conseqüència de l'anisotropia de la interacció intermolecular a diferents distàncies intermoleculars. Aquesta informació és crucial per avaluar els efectes d'estereodinàmica en col·lisions bimoleculars.

## III.2 LLISTA DE PUBLICACIONS

## ARTICLES PUBLICATS

1. *Optical control of enzyme enantioselectivity in solid phase.*  
A. Bautista-Barrufet, F. López-Gallego, V. Rojas-Cervellera, C. Rovira, M. A. Pericàs, J. M. Guisán, P. Gorostiza.  
**ACS Catal.** 4 (2014), 1004.
2. *Theoretical study of the free energy surface and kinetics of the hepatitis C virus NS3/NS4A serine protease reaction with the NS5A/5B substrate. Does the generally accepted tetrahedral intermediate really exist?.*  
J. A. Martínez-González, M. González, L. Masgrau, R. Martínez  
**ACS Catal.** in press (dx.doi.org/10.1021/cs5011162).
3. *Hydrogen/Deuterium Exchange-Protected Oligomers Populated during A<sup>2</sup> Fibril Formation Correlate with Neuronal Cell Death.*  
B. Serra-Vidal, L. Pujadas, D. Rossi, D. Soriano, S. Madurga, N. Carulla  
**ACS Chemical Biology** 9 (2014), 2678.
4. *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.** 53 (2014), 1087.
5. *Fluorocarbons modulate the coordination sphere of f-element complexes.*  
S. Álvarez, B. Menjón  
**Angew. Chem. Int. Ed.** 53 (2014), 2810.
6. *Combined structural snapshots and metadynamics reveal a substrate-guided front-face reaction for polypeptide GalNAc-transferase T2.*  
E. Lira-Navarrete, J. Iglesias-Fernández, W. F. Zandberg, I. Compañón, Y. Kong, F. Corzana, B. M. Pinto, H. Clausen, J. M. Peregrina, D. Voadlo, C. Rovira, R. Hurtado-Guerrero  
**Angew. Chem. Int. Ed.** 53 (2014), 8206.
7. *Maximum Noble-Metal Efficiency in Catalytic Materials: Atomically Dispersed Surface Platinum.*  
A. Bruix, Y. Lykhach, I. Matolínová, A. Neitzel, T. Skála, N. Tsud, M. Vorokhta, V. Stetsovych, K. Ševčíková, J. Mysliveček, R. Fiala, M. Václavů, K.C. Prince, S. Bruyère, V. Potin, F. Illas, V. Matolín, J. Libuda, K.M. Neyman  
**Angew. Chem. Int. Ed.** 53 (2014), 10525.
8. *Charge Polarization at a Au-TiC Interface and the Generation of Highly Active and Selective Catalysts for the Low-Temperature Water-Gas Shift Reaction.*  
J.A. Rodríguez, P.J. Ramirez, G.G. Asara, F. Viñes, J. Evans, P. Liu, J.M. Ricart, F. Illas  
**Angew. Chem. Int. Ed.** 53 (2014), 11270.

9. *How absorbed hydrogen affects catalytic activity of transition metals.*  
H.A. Aleksandrov, S.M. Kozlov, S. Schauer mann, G.N. Vayssilov, K.M. Neyman  
**Angew. Chem. Int. Ed.** 53 (2014), 13371.
10. *Dust in brown dwarfs and extra-solar planets. IV. Assessing TiO<sub>2</sub> and SiO nucleation for cloud formation modelling.*  
G. Lee, C. Helling, H. Giles, S. T. Bromley  
**Astronomy and Astrophysics**, Accepted, in press.
11. *Electroporation of heterogeneous lipid membranes.*  
R. Reigada  
**Biochim. et Biophys. Acta** 1838 (2014), 814.
12. *Effect of crowding by Dextran in enzymatic reactions.*  
I. Pastor, C. Balcells, L. Pitulice, E. Vilaseca, S. Madurga, A. Isvoran, M. Cascante, F. Mas  
**Biophys. Chem.** 185 (2014), 8.
13. *Atomic Level Rendering of DNA-Drug Encounter.*  
M. F. Lucas, I. Cabeza de Vaca, R. Takahashi, J. Rubio-Martinez, V. Guallar  
**Biophys. J.** 105 (2014), 421.
14. *Identifying atomic sites in N-doped pristine and defective graphene from ab initio core level binding energies.*  
N.P. Bellafont, D.R. Mañeru, F. Illas  
**Carbon** 76 (2014), 155.
15. *On the importance of thermal effects and crystalline disorder in the magnetism of benzotriazinyl-derived organic radicals.*  
M. Fumanal, S. Vela, J. Ribas-Arino, J.J. Novoa  
**Chem. Asian. J.** 9 (2014), 3612.
16. *Enantioselective preparation of δ-valerolactones using horse liver alcohol dehydrogenase.*  
A. Díaz-Rodríguez, J. Iglesias-Fernández, C. Rovira, V. Gotor-Fernández  
**ChemCatChem** 6 (2014), 977.
17. *All-round robustness of the Mn<sub>19</sub> coordination cluster system: Experimental validation of a theoretical prediction.*  
A. M. Ako, Y. Lan, O. Hampe, E. Cremades, E. Ruiz, C. E. Anson, A. K. Powell  
**Chem. Commun.** 50 (2014), 5847.
18. *A racemic and enantiopure unsymmetric diiron(III) complex with a chiral o-carborane-based pyridylalcohol ligand: Combined chiroptical, magnetic, and nonlinear optical properties.*  
F. Di Salvo, M. Y. Tsang, F. Teixidor, C. Vinas, J. G. Planas, J. Crassous, N. Vanthuyne, N. Aliaga-Alcalde, E. Ruiz, G. Coquerel, S. Clevers, V. Dupray, D. Choquesillo-Lazarte, M. E. Light, M. B. Hursthouse  
**Chem. Eur. J.** 20 (2014), 1081.

19. *Experimental and theoretical studies on arene-bridged metal-metal-bonded dimolybdenum complexes.*  
M. Carrasco, N. Curado, E. Álvarez, C. Maya, R. Peloso, M. L. Poveda, A. Rodríguez, E. Ruiz, S. Álvarez, E. Carmona  
**Chem. Eur. J.** 20 (2014), 6092.
20. *Elucidating the 2D magnetic topology of the "metal-radical" TTTA·Cu(hfac)<sub>2</sub> system.*  
S. Vela, A. Sopena, J. Ribas-Arino, J.J. Novoa, M. Deumal  
**Chem. Eur. J.** 20 (2014), 7083.
21. *The Origin of the Room-Temperature Stability of [TTF]<sup>•+</sup>····[TTF]<sup>•+</sup> Long, Multicenter Bonds Found in Functionalized π-[R-TTF](2)(2+) Dimers Included in the Cucurbit[8]uril Cavity.*  
M. Capdevila-Cortada, J.S. Miller, J.J. Novoa  
**Chem. Eur. J.** 20 (2014), 7784.
22. *S=1/2 one dimensional random-exchange ferromagnetic zigzag ladder, which exhibits competing interactions in a critical regime.*  
S.N. Herrerger, M. Deumal, J. Ribas-Arino, J.J. Novoa, C.P. Landee, J.L. Wikaira, M.M. Turnbull  
**Chem. Eur. J.** 20 (2014), 8355.
23. *Two C<sub>3</sub>-symmetric Dy<sub>3</sub><sup>III</sup> complexes with triple di-μ-methoxy-μ-phenoxo bridges, magnetic ground state, and single-molecule magnetic behavior.*  
M. M. Haenninen, A. J. Mota, D. Aravena, E. Ruiz, R. Sillanpää, A. Camon, M. Evangelisti, E. Colacio  
**Chem. Eur. J.** 20 (2014), 8410.
24. *Molecular mechanism of a hotdog-fold Acyl-CoA thioesterase.*  
D. Cantu, A. Ardèvol, C. Rovira, P. Reilly  
**Chem. Eur. J.** 20 (2014), 9045.
25. *Multistep π Dimerization of Tetrakis(n-decyl) heptathienoacene Radical Cations: A Combined Experimental and Theoretical Study.*  
C.C. Ferron, M. Capdevila-Cortada, R. Balster, F. Hartl, W.J. Niu, M.Q. He, J.J. Novoa, J.T.L. Navarrete, V. Hernández, M.C.R. Delgado  
**Chem. Eur. J.** 20 (2014), 10351.
26. *Characterization of a robust Co(II) fluorescent nanomagnet deposited intacto on HOPG.*  
M.J. Heras Ojea, D.R. Mañeru, L. Rosado, J.A. Zuazo, G.R. Castro, S. Tewary, G. Rajamaran, G. Aromí, E. Jiménez, E.C. Sañudo  
**Chem. Eur. J.**, 20 (2014), 10439.
27. *Guest modulation of spin-crossover transition temperature in a porous iron(ii) metal organic framework: Experimental and periodic DFT studies.*  
D. Aravena, Z. A. Castillo, M. C. Muñoz, A. B. Gaspar, K. Yoneda, R. Ohtani, A. Mishima, S. Kitagawa, M. Ohba, J. A. Real, E. Ruiz  
**Chem. Eur. J.** 20 (2014), 12864.

28. *Rational electrostatic design of easy-axis magnetic anisotropy in a Zn(II)-Dy(III)-Zn(II) single-molecule magnet with a high energy barrier.*  
I. Oyarzábal, J. Ruiz, J. M. Seco, M. Evangelisti, A. Camon, E. Ruiz, D. Aravena, E. Colacio  
**Chem. Eur. J.** 20 (2014), 14262.
29. *Distortions of  $\pi$ -coordinated arenes with anionic character.*  
A. Falceto, D. Casanova, P. Alemany, S. Álvarez  
**Chem. Eur. J.** 20 (2014), 14674.
30. *HOMO Stabilisation in  $\pi$ -Extended Dibenzotetrathiafulvalene Derivatives for Their Application in Organic Field-Effect Transistors.*  
Y. Geng, R. Pfattner, A. Campos, W. Wang, O. Jeannin, J. Hauser, J. Puigdollers, S. T. Bromley, S. Decurtins, J. Veciana, C. Rovira, M. Mas-Torrent, and S.-X. Liu  
**Chem. Eur. J.** 20 (2014), 14754.
31. *Experimental and computational studies of the molybdenum-flanking arene interaction in quadruply bonded dimolybdenum complexes with terphenyl ligands.*  
M. Carrasco, I. Mendoza, E. Álvarez, A. Gorrane, C. Maya, R. Peloso, A. Rodríguez, A. Falceto, S. Álvarez, E. Carmona  
**Chem. Eur. J.** (2014), doi: 10.1002/chem.2014040573.
32. *Exploring excited-state tunability in luminescent tris-cyclometalated platinum(IV) complexes: Synthesis of heteroleptic derivatives and computational calculations.*  
F. Julia, G. Aullón, D. Bautista, P. González-Herrero  
**Chem. Eur. J.** (2014), doi: 10.1002/chem.201404583.
33. *Further theoretical insight into the reaction mechanism of the hepatitis C NS3/NS4A serine protease.*  
J. A. Martínez-González, A. Rodríguez, M. P. Puyuelo, M. González, R. Martínez.  
**Chem. Phys. Lett.** in press (dx.doi.org/10.1016/j.cplett.2014.11.041).
34. *Understanding the reactivity of metallic nanoparticles: beyond the extended surface model for catalysis.*  
F. Viñes, J.R.B. Gomes, F. Illas  
**Chem. Soc. Rev.** 43 (2014), 4922.
35. *A spectrophotometer-based diffusivity assay reveals that diffusion hindrance of small molecules in extracellular matrix gels used in 3D cultures is dominated by viscous effects.*  
R. Galgoczy, I. Pastor, A. Colom, R. Sunyer, A. Giménez, F. Mas, J. Alcaraz  
**Coll. Surf. B-Biointerfaces** 120 (2014), 200.
36. *Spin state behavior of iron(II)/dipyrazolylpyridine complexes. New insights from crystallographic and solution measurements.*  
L. J. K. Cook, R. Mohammed, G. Sherborne, T. D. Roberts, S. Álvarez, M. Halcrow  
**Coord. Chem. Rev.** (2014), ref. CCR-D-14-00100.
37. *The polymorphism of a triarylphosphine oxide: a case of missing isomers.*  
C. Puigjaner, S. Vela, M. Font-Bardia, J.J. Novoa  
**CrystEngComm** 16 (2014) 8214.

38. *The nature of the C-Cl...Cl-C intermolecular interactions found in molecular crystals: a general theoretical-database study covering the 2.75-4.0 angstrom range.*  
M. Capdevila-Cortada, J. Castello, J.J. Novoa  
**CrystEngComm** 16 (2014), 8232.
39. *C-H...BF<sub>2</sub>O<sub>2</sub> interactions in crystals: a case for boron hydrogen bonding?*  
P. Alemany, A. D'Aléo, M. Giorgi, E. Canadell, F. Fages  
**Cryst. Growth Des.** 14 (2014), 3700.
40. *Highly fluorescent complexes with 3-isocyanoperylene and n-(2,5-di-tert-butylphenyl)-9-isociano-perylene-3,4-dicarboximide.*  
S. Lentijo, J. E. Exposito, G. Aullón, J. A. Miguel, P. Espinet  
**Dalton Trans.** 43 (2014), 10885.
41. *The effect of thermal motion on the electron localization in metal-to-ligand charge transfer excitations in [Fe(bpy)<sub>3</sub>]<sup>2+</sup>.*  
A. Domingo, C. Sousa, C. de Graaf  
**Dalton Trans.** 43 (2014), 17838.
42. *Copper(II) complexes of bis(aryl-imino)acenaphthene ligands: Synthesis, structure, DFT studies and evaluation in reverse ATRP of styrene.*  
C. Fliedel, V. Rosa, C. I. M. Santos, P. J. González, R. M. Almeida, C. S. B. Gomes, P. T. Gomes, M. A. N. D. A. Lemos, G. Aullón, R. Welter, T. Avilés  
**Dalton Trans.** 43 (2014), 13041.
43. *New 'Aggregation Induced Emission (AIE)' Active Cyclometalated Iridium(III) Based Fluorescent Sensors: High Sensitivity for Mercury(II) Ions*  
P. Alam, G. Kaur, C. Climent, S. Pasha, D. Casanova, P. Alemany, A. R. Choudhury, I. R. Laskar  
**Dalton Trans.** 43 (2014), 16431.
44. *Microwave-Assisted Synthesis of Substituted Pyrrolo[2,3-d]pyrimidines*  
V. Prieur, J. Rubio-Martínez, M. Font-Bardia, G. Guillaumet, M. Dolors Pujol  
**Eur. J. Org. Chem.** 7 (2014), 1514.
45. *Applied Bohmian mechanics.*  
A. Benseny, G. Albareda, Á. S. Sanz, J. Mompart, X. Oriols.  
**Eur. Phys. J. D** 68 (2014), 286.
46. *Potassium ions surrounded by aromatic rings: molecular dynamics of the first solvation shell.*  
M. Alberti, A. Aguilar and J. M. C. Marques  
**Eur. Phys. J. D** 68 (2014), 364.
47. *Spin-crossover behavior in two new supramolecular isomers.*  
Z. Yan, Z.-P. Ni, F.-S. Guo, J.-Y. Li, Y.-C. Chen, J.-L. Liu, W.-Q. Lin, D. Aravena, E. Ruiz, M.-L. Tong  
**Inorg. Chem.** 53 (2014), 201.

48. *Computational insights on the geometrical arrangements of Cu(II) with a mixed-donor N<sub>3</sub>S<sub>3</sub> macrobicyclic ligand.*  
A. G. Algarra, G. Aullón, P. V. Bernhardt, M. Martínez  
**Inorg. Chem.** 53 (2014), 512.
49. *Huge magnetic anisotropy in a trigonal-pyramidal nickel(II) complex.*  
S. Gómez-Coca, E. Cremades, N. Aliaga-Alcalde, E. Ruiz  
**Inorg. Chem.** 53 (2014), 676.
50. *Linear or cyclic clusters of Cu(II) with a hierarchical relationship.*  
G.A. Craig, M. Schütze, D. Aguilà, O. Roubeau, J. Ribas-Arino, S. Vela, S.J. Teat, G. Aromí  
**Inorg. Chem.** 53 (2014), 3290.
51. *On the van der Waals radii of noble gases.*  
J. Vogt, S. Álvarez  
**Inorg. Chem.** 53 (2014), 9260.
52. *Ferro- to antiferromagnetic crossover angle in diphenoxido- and carboxylato-bridged trinuclear Ni(II)2-Mn(II) complexes: Experimental observations and theoretical rationalization.*  
P. Seth, A. Figuerola, J. Jover, E. Ruiz, A. Ghosh  
**Inorg. Chem.** 53 (2014), 9296.
53. *Structural and magnetic diversity based on different imidazolate linkers in Cu(II)-azido coordination compounds.*  
A. Chakraborty, S. R. Lingampalli, A. Kumari, J. Ribas, J. Ribas-Arino, T.K. Maji  
**Inorg. Chem.** 53 (2014), 11991.
54. *Stereochemistry of complexes with double and triple metal-ligand bonds: A continuous shape measures analysis.*  
S. Álvarez, B. Menjón, A. Falceto, D. Casanova, P. Alemany  
**Inorg. Chem.** 53 (2014), 12151.
55. *Nature of Holes, Oxidation States, and Hypervalency in Covellite (CuS).*  
S. Conejeros, I.d.P.R. Moreira, P. Alemany, E. Canadell.  
**Inorg. Chem.** 53 (2014), 12402.
56. *Ion mobility and Top-down MS complementary approaches for the structural analysis of protein models bound to anticancer metallodrugs.*  
E. Escribano, S. Madurga, M. Vilaseca, V. Moreno  
**Inorganica Chimica Acta** 423 (2014), 60.
57. *Adsorption of H<sub>2</sub>S on carbonaceous materials of different dimensionality.*  
E. Ashori, F. Nazari, F. Illas  
**Int. J. Hydrogen Ener.** 39 (2014), 6610.

58. *Effect of metal complexation on the conductance of single-molecular wires measured at room temperature.*  
 J. Ponce, C. R. Arroyo, S. Tatay, R. Frisenda, P. Gavina, D. Aravena, E. Ruiz, H. S. J. van der Zant, E. Coronado  
**J. Am. Chem. Soc.** 136 (2014), 8314.
59. *Unexpected Reactivity of Amidogen Radical in the Gas Phase Degradation of Nitric Acid.*  
 J.M. Anglada, S. Olivella, A. Solé  
**J. Am. Chem. Soc.** 136 (2014), 6834.
60. *An ionizable tryptophane residue imparts catalase activity to a peroxidase core.*  
 P. C. Loewen, X. Carpena, P. Vidossich, I. Fita, C. Rovira  
**J. Am. Chem. Soc.** 136 (2014), 7249. JACS Spotlight.
61. *Generalized Bronsted-Evans-Polanyi relationships and descriptors for O-H bond cleavage of organic molecules on transition metal surfaces.*  
 J.L.C. Fajín, M.N.D.S. Cordeiro, F. Illas, J.R.B. Gomes  
**J. Catal.** 313 (2014), 24.
62. *Molecular Topology Applied to the Discovery of 1-Benzyl-2-(3-fluorophenyl)-4-hydroxy-3-(3-phenylpropanoyl)-2H-pyrrole-5-one as a Non-Ligand-Binding-Pocket Antiandrogen.*  
 L. Caboni, M. Gálvez-Llompart, J. Gálvez, F. Blanco, J. Rubio-Martinez, D. Fayne, D. G. Lloyd  
**J. Chem. Inf. Model.** 54 (2014), 2953.
63. *Experimental guided ion beam and ab initio studies of the reactive processes in gas phase  $i\text{-C}_3\text{H}_7\text{Br}$  and  $i\text{-C}_3\text{H}_7\text{OH}$  collisions with potassium ions.*  
 E. López, J. M. Lucas, J. de Andrés, M. Albertí, J. M. Bofill, D. Bassi, A. Aguilar.  
**J. Chem. Phys.** 141 (2014), 164310.
64. *Diradicals acting through diamagnetic phenylene vinylene bridges: Raman spectroscopy as a probe to characterize spin delocalization.*  
 S.R. González, B. Nieto-Ortega, R.C.G. Cano, V. Lloveras, J.J. Novoa, F.Mota, J. Vidal-Gancedo, C. Rovira, J. Veciana, E. Del Corro, M. Taravillo, V.G. Baonza, J.T.L. Navarrete, J. Casado  
**J. Chem. Phys.** 140 (2014), 164903.
65. *Computational approach to the study of thermal spin crossover phenomena.*  
 A. Rudavskiy, C. Sousa, C. de Graaf, R.W.A. Havenith, R. Broer  
**J. Chem. Phys.** 140 (2014), 184318.
66. *Quantum dynamical study of the  $\text{O}(^1\text{D}) + \text{CH}_4 \rightarrow \text{CH}_3 + \text{OH}$  atmospheric reaction.*  
 R. Ben Bouchrit, M. Jorfi, D. Ben Abdallah, N. Jaidane, M. González, B. Bussery-Honvault, P. Honvault.  
**J. Chem. Phys.** 140 (2014), 244315.
67. *The Triplet-Singlet Gap in the  $m$ -Xylylene Radical: A Not So Simple One.*  
 D. Reta-Mañeru, K.P. Pal, I.d.P.R. Moreira, S.N. Datta, F. Illas  
**J. Chem. Theory Comput.** 10 (2014), 335.



68. *Assessing the performance of CASPT2 and DFT methods for the description of long, multicenter bonding in dimers between radical ions.*  
M. Capdevila-Cortada, J. Ribas-Arino, J.J. Novoa  
**J. Chem. Theory Comput.** 10 (2014), 650.
69. *Bulk Properties of Transition Metals: A Challenge for the Design of Universal Density Functionals.*  
P. Janthon, S.J. Luo, S.M. Kozlov, F. Viñes, J. Limtrakul, D.G. Truhlar, F. Illas  
**J. Chem. Theory Comput.** 10 (2014), 3832.
70. *Oxygen vacancies in self-assemblies of ceria nanoparticles.*  
M.A. Sk, S.M. Kozlov, K.H. Lim, A. Migani, K.M. Neyman  
**J. Mater. Chem. A** 2 (2014), 18329.
71. *Facile tuning of the aggregation-induced emission wavelength in a common framework of a cyclometalated iridium(III) complex: micellar encapsulated probe in cellular imaging*  
P. Alam, P. Das, C. Climent, M. Karanam, D. Casanova, A. R. Choudhury, P. Alemany, N. R. Jana, I. R. Laskar  
**J. Mater. Chem. C** 2 (2014), 5615.
72. *Level Sets as Progressing Waves: an Example for Wake-Free Waves in Every Dimension.*  
W. Quapp, J. M. Bofill  
**J. Math. Chem.** 52 (2014), 654.
73. *Some remarks on the extended Gentlest Ascent Dynamics Model*  
J. M. Bofill, W. Quapp, E. Bernuz  
**J. Math. Chem.** Accepted, DOI: 10.1007/s10910-014-0409-y
74. *Design of an interface peptide as new inhibitor of human glucose-6-phosphate dehydrogenase*  
C. Obiol-Pardo, G. Alcarraz-Vizán, S. Díaz-Moralli, M. Cascante, J. Rubio-Martinez  
**Journal of Molecular Graphics and Modelling** 49 (2014), 110.
75. *Molecular dynamics analysis of the interaction between the human Bcl6 BTB domain and its SMRT, NcoR and BCOR corepressors: The quest for a consensus dynamic pharmacophore.*  
J.M. Granadino-Roldán, C. Obiol-Pardo, M. Pinto, A. Garzón, J. Rubio-Martínez  
**Journal of Molecular Graphics and Modelling** 50 (2014), 142.
76. *Comparative density functional theory based study of the reactivity of Cu, Ag, and Au nanoparticles and of (111) surfaces toward CO oxidation and NO<sub>2</sub> reduction.*  
B. Pascucci, G.S. Otero, P.G. Belevi, F. Illas, M.M. Branda  
**J. Mol. Model.** 20 (2014), 24.
77. *ReaxFF molecular dynamics simulations of CO collisions on an O-preadsorbed silica surface.*  
P. Gamallo, H.Prats, R.Sayós  
**J. Mol. Model.** 20 (2014), 2160.

78. *An innovative synergistic grid approach to the computational study of protein aggregation mechanisms.*  
N. Faginas-Lago, M. Albertí, A. Costantini, A. Laganà, A. Lombardi, L. Pacifici.  
**J. Mol. Model.** 20 (2014), 2226.
79. *Nanoparticles of Ni(II) and Co(II) Metallo-Organic Molecular Materials.*  
M.J. Heras Ojea, A. Pons-Balagué, D. Reta-Mañeru, E.C. Sañudo  
**J. Nanopart. Res.** 16 (2014), 2209.
80. *Structure and Properties of Nitrogen-Rich 1,4-Dicyanotetrazine, C<sub>4</sub>N<sub>6</sub>: A Comparative Study with Related Tetracyano Electron Acceptors.*  
H.L. Vo, J.L. Arthur, M. Capdevila-Cortada, S.H. Lapidus, P.W. Stephens, J.J. Novoa, A.M. Arif, R.K. Nagi, M.H. Bartl, J.S. Miller  
**J. Org. Chem.** 79 (2014), 8189.
81. *Benzene-Hydrogen Bond (C<sub>6</sub>H<sub>6</sub>-HX) Interactions: the Influence of the X Nature on Their Strength and Anisotropy.*  
M. Alberti, A. Aguilar, F. Huarte-Larrañaga, J. Lucas, and F. Pirani  
**J. Phys. Chem. A** 118 (2014), 1651.
82. *Optical Properties of 4-Bromobenzaldehyde Derivatives in Chloroform Solution*  
C. Climent, P. Alemany, D. Lee, J. Kim, D. Casanova  
**J. Phys. Chem. A** 118 (2014), 6914.
83. *Theoretical Study of Hydrogen Permeation through Mixed NiO-MgO Films Supported on Mo(100): Role of the Oxide-Metal Interface.*  
D. Torres, F. Illas, P. Liu  
**J. Phys. Chem. A** 118 (2014), 5756.
84. *Quantum dynamics of the reaction  $H(^2S) + HeH^+(X^1\Sigma^+) \rightarrow H_2^+(X^2\Sigma_g^+) + He(^1S)$  from cold to hyperthermal energies: time-dependent wavepacket study and comparison with time-independent calculations.*  
P. Gamallo, S. Akpınar, P. Defazio, C. Petrongolo  
**J. Phys. Chem. A** 118 (2014), 6451.
85. *Binding of the antitubercular pro-drug isoniazid in the heme access channel of catalase-peroxidase (KatG). A combined structural and metadynamics investigation.*  
P. Vidossich, P. C. Loewen, X. Carpena, G. Fiorin, I. Fita, C. Rovira  
**J. Phys. Chem. B** 118 (2014), 2924.
86. *Macromolecular crowding effect upon in vitro enzyme kinetics: Mixed activation-diffusion control of the oxidation of NADH by pyruvate catalyzed by lactate dehydrogenase.*  
C. Balcells, I. Pastor, E. Vilaseca, S. Madurga, M. Cascante, F. Mas  
**J. Phys. Chem. B** 118 (2014), 4062.
87. *Effects of Dimethyl Sulfoxide on Lipid Membrane Electroporation.*  
M.L. Fernández, R. Reigada  
**J. Phys. Chem. B** 118 (2014), 9306.

88. *Hydroxyl Identification on ZnO by Infrared Spectroscopies: Theory and Experiments.*  
F. Viñes, A. Iglesias-Juez, F. Illas, M. Fernandez-Garcia.  
**J. Phys. Chem. C** 118 (2014), 1492.
89. *Ionic Liquid Chiral Resolution: Methyl 2-Ammonium Chloride Propanoate on Al(854)<sup>S</sup> Surface.*  
N. Jalili, N. Ansari, F. Viñes, F. Illas, F. Nazari  
**J. Phys. Chem. C** 118 (2014), 1568.
90. *DFT Study on Ce-Doped Anatase TiO<sub>2</sub>: Nature of Ce<sup>3+</sup> and Ti<sup>3+</sup> Centers Triggered by Oxygen Vacancy Formation.*  
A.R. Albuquerque, A. Bruix, I.M.G. dos Santos, J.R. Sambrano, F. Illas  
**J. Phys. Chem. C** 118 (2014), 9677.
91. *Relative Stability of F-Covered TiO<sub>2</sub> Anatase (101) and (001) Surfaces from Periodic DFT Calculations and ab Initio Atomistic Thermodynamics.*  
O. Lamiel-Garcia, S. Tosoni, F. Illas  
**J. Phys. Chem. C** 118 (2014), 13667.
92. *Adsorbed and subsurface absorbed hydrogen atoms on bare and MgO(100)-supported Pd and Pt nanoparticles.*  
S.M. Kozlov, H.A. Aleksandrov, K.M. Neyman  
**J. Phys. Chem. C** 118 (2014), 15242.
93. *New Insights into the Structure of the C-Terminated beta-Mo<sub>2</sub>C (001) Surface from First-Principles Calculations.*  
G.G. Asara, A. Roldán, J.M. Ricart, J.A. Rodriguez, F. Illas, N.H. de Leeuw  
**J. Phys. Chem. C** 118 (2014), 19224.
94. *Chloroform alters interleaflet coupling in lipid bilayers: an entropic mechanism.*  
R. Reigada, F. Sagués  
**J. Royal Soc Interface** Accepted, in press
95. *The Molecular Stirrer Catalytic Effect in Methane Ice Formation.*  
N. Faginas Lago, M. Albertí, A. Laganà, A. Lombardi, L. Pacifici, A. Constantini  
**Lecture Notes on Computer Science** 8579 (2014), 585.
96. *Fermi surface and effect of high magnetic fields on the metal–semimetal Peierls-like transition of (TSeT)<sub>2</sub>Cl*  
V. Laukhin, A. Audouard, D. Vignolles, L. Drigo, P. Alemany, E. Canadell  
**Low Temp. Phys.** 40 (2014), 307.
97. *Monte Carlo simulations of enzymatic reactions in crowded media. Effect of the enzyme-obstacle relative size.*  
L. Pitulice, E. Vilaseca, I. Pastor, S. Madurga, J.L. Garcés, A. Isvoran, F. Mas  
**Math. Bios.** 251 (2014), 72.

98. *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.** 112 (2014), 809.
99. *A DFT study of oxygen dissociation on platinum based nanoparticles.*  
P.C. Jennings, H.A. Aleksandrov, B.G. Pollet, K.M. Neyman, R.L. Johnston  
**Nanoscale** 6 (2014), 1153.
100. *Bandgap engineering through nanoporosity.*  
I. Demiroglu, S. Tosoni, F. Illas, S.T. Bromley  
**Nanoscale** 6 (2014), 1181.
101. *Vacancy patterning and patterning vacancies: controlled self-assembly of fullerenes on metal surfaces.*  
A. Kaiser, F. Viñes, F. Illas, M. Ritter, F. Hagelberg, M. Probst.  
**Nanoscale** 6 (2014), 10850.
102. *From monomer to monolayer: a global optimisation study of (ZnO)<sub>n</sub> nanoclusters on the Ag surface*  
I. Demiroglu, S. M. Woodley, A. A. Sokol, and S. T. Bromley  
**Nanoscale** 6 (2014), 14754.
103. *Intermolecular interactions, entropy, and melting of polyhedranes.*  
S. Shaik, S. Álvarez  
**Nature Chem.** (2014), tracking number NCHEM-14111882.
104. *Origin of slow magnetic relaxation in Kramers ions with non-uniaxial anisotropy.*  
S. Gómez-Coca, E. Cremades, E. Ruiz, A. Urtizbera, P. J. Alonso, A. Camon, F. Luis  
**Nature Commun.** 5 (2014), 4300.
105. *The key role of vibrational entropy in the phase transitions of dithiazolyl-based bistable magnetic materials.*  
S. Vela, F. Mota, M. Deumal, R. Suizu, Y. Shuku, A. Mizuno, K. Awaga, M. Shiga, J.J. Novoa, J. Ribas-Arino.  
**Nature Commun.** 5 (2014), 4411.
106. *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  
**Open Plasma Physics Journal** 7 (2014), 48.
107. *Molecular dipole, dye structure and electron lifetime relationship in efficient dye sensitized solar cells based on donor- $\pi$ -acceptor organic sensitizers.*  
C. Climent, L. Cabau, D. Casanova, P. Wang, E. Palomares  
**Org. Electron.** 15 (2014), 3162.

108. *Electronic and structural effects of low-hapticity coordination of arene rings to transition metals.*  
A. Falceto, E. Carmona, S. Álvarez  
**Organometallics** 33 (2014), 6660.
109. *Charge transport properties of spin crossover systems.*  
E. Ruiz  
**Phys. Chem. Chem. Phys.** 16 (2014), 14.
110. *Challenges in modelling the reaction chemistry of interstellar dust.*  
S. T. Bromley, T. P. M. Goumans, E. Herbst, A. P. Jones and B. Slater  
**Phys. Chem. Chem. Phys. (Perspective)** 74 (2014), 58.
111. *Coupling of conformational and ionization equilibria in linear poly(ethylenimine): a study based on site binding/rotational isomeric state (SBRIS) model.*  
J.L. Garcés, S. Madurga, M. Borkovec  
**Phys. Chem. Chem. Phys.** 16 (2014) 4626.
112. *Hydrogen storage on metal oxide model clusters using density-functional methods and reliable van der Waals corrections.*  
J. Gebhardt, F. Viñes, P. Bleiziffer, W. Hieringer, A. Görling.  
**Phys. Chem. Chem. Phys.** 16 (2014), 5382.
113. *Understanding the effect of vibrational excitation in reaction Dynamics: Ne + H<sub>2</sub><sup>+</sup> (v=0-17, j=1) → NeH<sup>+</sup> + H, Ne + H<sup>+</sup> + H proton transfer and dissociation cross sections.*  
P. Gamallo, R. Martínez, José D. Sierra, M. González.  
**Phys. Chem. Chem. Phys.** 16 (2014), 6641.
114. *O vacancies on steps on CeO<sub>2</sub>(111) surface.*  
S.M. Kozlov, K.M. Neyman  
**Phys. Chem. Chem. Phys.** 16 (2014), 7823.
115. *A study on adatom transport through (√3×√3)-R30 degrees-CH<sub>3</sub>S self-assembled monolayers on Au(111) using first principles calculations.*  
D. Paulius, D. Torres, F. Illas, W.E. Archibald  
**Phys. Chem. Chem. Phys.** 16 (2014), 10850.
116. *A Fullerene-Carbene Adduct as a Crystalline Molecular Rotor: Remarkable Behavior of a Spherically-Shaped Rotator*  
A. Lorbach, E. Maverick, A. Carreras, P. Alemany, G. Wu, M.A. Garcia-Garibay, G.C. Bazan  
**Phys. Chem. Chem. Phys.** 16 (2014), 12980.
117. *The bending machine: CO<sub>2</sub> activation and hydrogenation on δ-MoC(001) and β-Mo<sub>2</sub>C(001) surfaces.*  
S. Posada-Pérez, F. Viñes, P.J. Ramirez, A.B. Vidal, J.A. Rodriguez, F. Illas  
**Phys. Chem. Chem. Phys.** 16 (2014), 14912.

118. *Atmospheric formation of the NO<sub>3</sub> radical from gas-phase reaction of HNO<sub>3</sub> acid with the NH<sub>2</sub> radical: proton-coupled electron-transfer versus hydrogen atom transfer mechanisms.*  
J.M. Anglada, S. Olivella, A. Solé  
**Phys. Chem. Chem. Phys.** 16 (2014) 19437.
119. *Line defects and induced doping effects in graphene, hexagonal boron nitride and hybrid BNC.*  
N. Ansari, F. Nazari, F. Illas  
**Phys. Chem. Chem. Phys.** 16 (2014), 21473.
120. *Potential energy surfaces and quasiclassical trajectory study of the O + H<sub>2</sub><sup>+</sup> → OH<sup>+</sup> + H, OH + H<sup>+</sup> proton and hydrogen atom transfer reactions and isotopic variants (D<sub>2</sub><sup>+</sup>, HD<sup>+</sup>).*  
M. Paniagua, R. Martínez, P. Gamallo, M. González  
**Phys. Chem. Chem. Phys.** 16 (2014), 23594.
121. *DFT studies of oxygen dissociation on the 116-atom platinum truncated octahedron particle.*  
P.C. Jennings, H.A. Aleksandrov, K.M. Neyman, R.L. Johnston  
**Phys. Chem. Chem. Phys.** 16 (2014), 26539.
122. *Insights into the crystal-packing effects on the spin crossover of [Fe<sup>II</sup>(1-bpp)]<sup>2+</sup>-based materials.*  
S. Vela, J.J. Novoa, J. Ribas-Arino  
**Phys. Chem. Chem. Phys.** 16 (2014), 27012.
123. *Trends in the adsorption and reactivity of hydrogen on magnesium silicate nanoclusters.*  
I. Oueslati, B. Kerkenia and S. T. Bromley  
**Phys. Chem. Chem. Phys.** Accepted, in press.
124. *Electronic structure and anion ordering in (TMTSF)<sub>2</sub>ClO<sub>4</sub> and (TMTSF)<sub>2</sub>NO<sub>3</sub>: a first principles study*  
P. Alemany, J.P. Pouget, E. Canadell  
**Phys. Rev. B** 89 (2014), 155124.
125. *Charge density wave – metal coexistence in the quasi-one dimensional organic conductor TTF[Ni(dmit)<sub>2</sub>]<sub>2</sub>.*  
W. Kaddour, H. Raffy, M. Monteverde, P. Auban-Senzier, J.-P. Pouget, C.R. Pasquier, P. Alemany, E. Canadell, L. Valade  
**Phys. Rev. B** 89 (2014), 205132.
126. *Correlated Electron-Nuclear Dynamics with Conditional Wave Functions.*  
G. Albareda, H. Appel, I. Franco, A. Abedi, Á. Rubio.  
**Phys. Rev. Lett.** 113 (2014), 083003.
127. *A molecular dynamics simulation of hydrogen atoms collisions on an H-preadsorbed silica surface.*  
M. Rutigliano, P. Gamallo, R. Sayós, S. Orlandini, M. Cacciatore  
**Plasma Sources Science and Technology** 23 (2014), 045016.

128. *The effect of tensile stress on the conformational free energy landscape of disulfide bonds.*  
 P. Anjukandi, P. Dopieralski, J. Ribas-Arino, D. Marx  
**PLOS One** 9 (2014), e108812.
129. *Theoretical approach to the structure, energy and electronic spectroscopy of O@(<sup>4</sup>He)<sub>N</sub> doped nanodroplets.*  
 A. Vilà, M. González, R. Mayol, M. Paniagua.  
**RSC Adv.** 4 (2014), 44972.
130. *Multi-scale theoretical investigation of molecular hydrogen adsorption over graphene: coronene as a case.*  
 M.B. Yeamin, N. Faginas-Lago, M. Albertí, I.G. Cuesta, J. Sánchez-Marín, A. Sánchez  
**RSC Advances** 4 (2014), 54447.
131. *A DF-vdW study of the CH<sub>4</sub> adsorption on different Ni surfaces.*  
 S. González, F. Viñes, J.F. Garcia, Y. Erazo, F. Illas  
**Surf. Sci.** 625 (2014), 64.
132. *Theoretical and computational investigation of meta-phenylene as ferromagnetic coupler in nitronyl nitroxide diradicals.*  
 A.K. Pal, D. Reta-Mañeru, I.A. Latif, I.D.R. Moreira, F. Illas, S.N. Datta  
**Theor. Chem. Acc.** 133 (2014), 1472.
133. *Locating Saddle Points of any Index on Potential Energy Surfaces by the Generalized Gentlest Ascent Dynamics.*  
 W. Quapp, J. M. Bofill  
**Theor. Chem. Acc.** 133 (2014), 1510.
134. *Fundamentals of Methanol Synthesis on Metal Carbide Based Catalysts: Activation of CO<sub>2</sub> and H<sub>2</sub>.*  
 S. Posada-Pérez, F. Viñes, J.A. Rodriguez, F. Illas  
**Top. Catal.**, (2014) Accepted, in press.

CAPÍTOLS DE LLIBRES I PROCEEDINGS

---

1. *Theoretical and Computational Aspects of Magnetic Organic Molecules.*  
S.N. Datta, C.O. Trindle, F. Illas  
***Theoretical and Computational Aspects of Magnetic Organic Molecules*** (2014)  
(Imperial College Press, World Scientific Publishing, Londres)
2. *Chemical bonding in solids.*  
P. Alemany, E. Canadell  
***The Nature of the Chemical Bond Revisited***, G. Frenkin, S. Shaik, Eds. (2014) 445  
(Wiley-VCH, Weinheim)
3. *Car-Parrinello simulations of chemical reactions in proteins.*  
C. Rovira  
***Protein Modelling*** (2014) 51 (Springer, Switzerland)



### III.3 ALTRES ACTIVITATS

#### TESIS DOCTORALS 2014

---

1. *Computational modeling of heterogeneous catalysts based on platinum and cerium oxide*  
**Albert Bruix Fusté**  
Facultat de Química, Universitat de Barcelona  
Febrer 2014
2. *Effect Dimensionality and Polymorphism on the properties of ZnO*  
**Ilker Demiroglu**  
Facultat de Química, Universitat de Barcelona  
Febrer 2014
3. *Estudi experimental i teòric de la dinàmica de les reaccions ió-molècula*  
**Javier Aguilar Fargas**  
Facultat de Química, Universitat de Barcelona  
Març 2014
4. *Computational study of nanoparticles: the effect of metal ions, solvent and citric acid*  
**Miroslava Nedyalkova**  
Faculty of Chemistry and Pharmacy, Universitat de Sofia  
Març 2014
5. *Long, multicenter bonding present in radical···radical interactions: a computational study*  
**Marçal Capdevila Cortada**  
Facultat de Química, Universitat de Barcelona  
Juliol 2014
6. *Elucidating catalytic mechanisms in carbohydrate-active enzymes by means of ab initio molecular dynamics simulations*  
**Javier Iglesias Fernández**  
Facultat de Química, Universitat de Barcelona  
Setembre 2014
7. *Spin Crossover Mechanisms unraveled by Theory. Towards the design of new materials*  
**Andrii Rudavskiy**  
Facultat de Química, Universitat de Groningen  
Setembre 2014
8. *Computational modeling of molecular magnetic materials*  
**Sergi Vela Llausí**  
Facultat de Química, Universitat de Barcelona  
Setembre 2014

9. *Transition metal carbides as active phase and as support in catalysis: Insights from first principles theoretical modelling*  
**Gian Giacomo Asara**  
Facultat de Química, Universitat Rovira i Virgili  
Octubre 2014

## MÀSTERS 2014

---

1. *Enzyme Size as a Modulator of Macromolecular Crowding in Enzyme Kinetics: A Comparative Study*  
**Cristina Balcells Nadal**  
Facultat de Química, Universitat de Barcelona  
Juliol 2014

## PARTICIPACIÓ A CONGRESSOS 2014

---

### **VIII Encuentro Franco-Español de Química y Física del Estado Sólido**

Castellón, (Espanya)

*Cartography of the Van der Waals Territory*

S. Álvarez

### **Special invited lecture at the Dr. Barbara Mez-Starck Prizes for the Best Master Graduates ceremony**

Universität Ulm, Ulm (Alemanya)

*Pseudosymmetry, nested symmetries and latent symmetry in the molecular world*

S. Álvarez

### **Escuela de Verano sobre Historia de la Química**

Universidad de La Rioja, Logroño (Espanya)

*La identidad y los atributos del átomo, antes y después de Bohr*

S. Álvarez

### **16ª Reunión Bienal del Grupo Especializado de Química Inorgánica - QIES2014**

Almería (Espanya)

*Imanes unimoleculares con anisotropía de tipo plano fácil*

E. Ruiz

### **10<sup>th</sup> Congress of the World Association of Theoretical and Computational Chemists - WATOC 2014**

Santiago de Chile (Xile)

*Mononuclear easy-plane Single Molecule Magnets: A theoretical study*

E. Ruiz, S. Gómez-Coca, E. Cremades

### **7<sup>th</sup> European School on Molecular Nanoscience - ESMoNa**

Gandía (Espanya)

*Switching magnetoresistance in a Single-Molecule device at room temperature*

E. Ruiz

### **Challenges in Inorganic and Materials Chemistry - ISACS13**

Chartered Accountants House, Dublin (Irlanda)

*Copper-catalyzed trifluoromethylation of aryl iodides with CF<sub>3</sub>SiEt<sub>3</sub>: Computational insights*

J. Jover

*Understanding single-molecule magnets behaviour of mononuclear first-row transition metal complexes*

S. Gómez Coca

**XXXII Reunión del Grupo Especializado de Química Organometálica - GEQO XXXII**

Universitat Rovira i Virgili, Tarragona (Espanya)

*Copper-catalyzed trifluoromethylation of aryl iodides with CF<sub>3</sub>SiEt<sub>3</sub>: Computational insights*

J. Jover

**The 2<sup>nd</sup> International Symposium for Young Chemists on Stimuli-Responsive Chemical Species for the Creation of Functional Molecules**

Osaka University, Osaka (Japó)

*The key role of second order phase transitions in dithiazolyl-based switchable magnetic materials*

J. Ribas

**AIAA Science and Technology Forum and Exposition 2014: 52<sup>nd</sup> Aerospace Sciences Meeting**

National Harbor, Maryland (Estats Units)

*Phys4EntryDB: a database for state-to-state kinetics of planetary atmospheres*

A. Laricchiuta, I. Armenise, M. Cacciatore, R. Celiberto, F. Esposito, P. Gamallo, A. Laganà, V. Laporta, A. Lombardi, S. Orlandini, F. Pirani, M. Rutigliano, R. Sayós, J. Tennyson, M. Capitelli

**9<sup>th</sup> Congress on Electronic Structure: Principles and Applications. ESPA2014**

Badajoz (Espanya)

*Kinetic Monte Carlo simulation of water-gas shift reaction on Cu(111)*

H. Prats, L. Álvarez, F. Illas, R. Sayós

*Spin Crossover in Fe(II) Materials*

C. Sousa

*Triplet-Singlet Gap Engineering in High Spin Ground State Alternant Hydrocarbon Diradicals*

D. Reta-Mañeru, I.d.P.R. Moreira, F. Illas

*The chemistry of the Titan's atmosphere*

E. López, D. Ascenzi, J.M. Bofill and A. Aguilar

**International Symposium Frontiers in surface and materials science: Theory and Practice**  
Universitat de Barcelona (Espanya)

*Organizing Committee*

F. Viñes

C. Sousa

K.M. Neyman

*Kinetic Monte Carlo study of water-gas shift reaction on copper (111) surface*

H. Prats, L. Álvarez, F. Illas, R. Sayós

*Electronic Structure-Based Chemical Descriptors: (In)dependence on Self-Interaction and Hartree-Fock Exchange*

A. Notario-Estévez, S.M. Kozlov, F. Viñes, F. Illas

*Absorption Spectrum of  $[Fe(bpy)_3]^{2+}$ : Beyond the Static Approach*

A. Domingo, C. Sousa, C. de Graaf

**5<sup>th</sup> international meeting on Atomic and Molecular Physics and Chemistry (IMAMPC 2014)**  
Salamanca (Espanya)

*Quantum dynamic effects of  $O + H_2^+ \rightarrow OH^+ + H$ ,  $OH + H^+$ . Influence of nonadiabatic effects.*

P. Gamallo, C. Petrongolo, M. Paniagua, M. González.

*Photodissociation quantum dynamics of diatomic molecules in a quantum solvent ( $^4He$  nanodroplets)*

A. Vilà, M. González, R. Mayol

*Oxidation of atmospheric mercury by the OH radical. Ab initio and quasiclassical trajectory study*

M. Paniagua, R. Martínez, M. González

**8<sup>th</sup> international meeting on photodynamics and related aspects (Photodynamics)**  
Oaxaca (Mèxic)

*Adiabatic and nonadiabatic dynamics of  $CH(X^2P) + H(^2S)$  and deuterated reactions.*

C. Petrongolo, P. Gamallo, P. Defazio, S. Akpınar.

**II Reunión de jóvenes investigadores en coloides e interfases (JICI-II).**  
Granada (Espanya)

*Efecto del crowding macromolecular en reacciones enzimáticas*

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

**Master Química X**

Barcelona (Espanya)

*Efecte del crowding macromolecular en reaccions enzimàtiques*

C. Balcells, I. Pastor, E. Vilaseca, S. Madurga, M. Cascante, F. Mas

**V Jornada de l'Institut de Química Teòrica i Computacional de la Universitat de Barcelona (IQTCUB)**

Barcelona (Espanya)

*Effect enzyme size as a modulator of macromolecular crowding in enzyme kinetics*

M. Via, C. Balcells, I. Pastor, E. Vilaseca, S. Madurga, M. Cascante, F. Mas

*Cost-Effective Catalysis on Early Transition Metal Carbides Surfaces*

F. Viñes

*Quantitative study of the eigenstates of a Hydrogen molecule confined inside Single Walled Carbon Nanotubes*

M. Mondelo-Martell, F. Huarte-Larrañaga

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

Barcelona (Espanya)

*Enzyme size as a modulator of macromolecular crowding effect in enzyme kinetics*

I. Pastor, M. Via, C. Balcells, S. Madurga, E. Vilaseca, M. Cascante, F. Mas

*Simple chemical reactions in <sup>4</sup>He nanodroplets*

M. González, R. Mayol, A. Vilà

*Nitrile compounds in Titan's atmosphere*

J.M. Lucas, A. Aguilar, D. Ascenzi, J.M. Bofill and E. López

*Quantitative study of the eigenstates of a Hydrogen molecule confined inside Single Walled Carbon Nanotubes*

M. Mondelo-Martell, F. Huarte-Larrañaga

**VIII Congreso de la Federación Española de Biotecnólogos/Biotech Annual Congress 2014 (BAC-2014)**

Barcelona (Espanya)

*The effect of enzyme size as a modulator of macromolecular crowding effect in enzyme kinetics*

C. Balcells, I. Pastor, E. Vilaseca, S. Madurga, M. Cascante, F. Mas

**Frontiers in Surface and Materials Science: Theory and Practice**

Barcelona (Espanya)

*Enzyme size as a modulator of macromolecular crowding in enzyme kinetics*

I. Pastor, M. Via, C. Balcells, S. Madurga, E. Vilaseca, M. Cascante, F. Mas

**Emergent Colloidal Dynamics Far From Equilibrium**

Lausanne (Suïssa)

*Molecular dynamic study of thin film rupture due to external electric field*

M. Nedyalkova, S. Madurga, N. Panchev, S. Pisov

**Deutsche Physikalische Gesellschaft - DPG Spring Meeting**

Technische Universität Dresden, Dresden (Alemanya)

*Cost-Effective Catalysis on Early Transition Metal Carbides Surfaces*

F. Viñes

**International Congress of Theoretical Aspects in Catalysis - ICTAC15**

University College London, London (Regne Unit)

*Cost-Effective Catalysis on Transition Metal Carbides Surfaces*

F. Viñes

**3<sup>rd</sup> General Meeting of the European COST Action CM1104**

Universitat de Barcelona, Barcelona (Espanya)

*Chairman*

K.M. Neyman

*Surface Contact Engineering in Photoactive ZnO Nanostructures*

O. Lamiel-García, F. Viñes, A. Iglésias-Juez, M. Fernández-García, F. Illas

*Theoretical study of the CO interactions with mononuclear platinum species supported on nanoparticulate ceria*

H.A. Aleksandrov, K.M. Neyman, G.N. Vayssilov

*Atomically dispersed M species (M = Pd, Ni, Cu) in ceria nanoparticles: Stability and red-ox processes*

A. Figueroba, K.M. Neyman

*Origin, stability, and effect of atomically dispersed Pt on nanostructured catalytic Pt-CeO<sub>2</sub> materials with maximum noble-metal efficiency*

A. Bruix, A. Figueroba, Y. Lykhach, I. Matolínová, A. Neitzel, T. Skála, N. Tsud, M. Vorokhta, V. Stetsovych, K. Ševčíková, J. Mysliveček, K.C. Prince, F. Illas, V. Matolín, J. Libuda, K.M. Neyman

**I Encuentro de Jóvenes Investigadores de la SECAT**

Universitat de Málaga, Málaga (Espanya)

*Superficies de Carburo de Molibdeno: Activación y Ruptura de la Molécula de CO<sub>2</sub>*

S. Posada-Pérez, F. Viñes, P.J. Ramirez, A.B. Vidal, J.A. Rodriguez, F. Illas

**Physics@FOM Conference**

FOM, Veldhoven (Holanda)

*Theoretical study of the high spin, low spin relaxation in iron based spin crossover compounds: beyond single mode approximation*

A. Rudavskiy, G. Lof, C. Sousa, J. Tatchen, C. Marian, C. de Graaf, R. Broer

**VII European Workshop on Molecular Magnetism- Jujols VII**

Max Planck Institute for Chemical Energy Conversion, Mülheim an der Ruhr (Alemanya)

*Temperature dependent high spin - low spin relaxation on spin crossover materials*

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

*The Triplet-Singlet Gap in the m-Xylylene Radical: A Not So Simple One*

D. Reta-Mañeru

*Remarks on the exact energy functional for fermions: a wave-function theories using the Löwdin partitioning technique*

I.d.P.R. Moreira

**American Chemical Society National Meeting, Physical Chemistry Division**

American Chemical Society, Texas (Estats Units)

*Analysis of the spin-crossover mechanism in Fe(II) complexes*

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

*Theoretical Studies of Au/TiC and Cu/TiC based catalysts for CO<sub>2</sub> activation and hydrogenation*

F. Illas, J.A. Rodriguez

**Promoting Female Excellence in Theoretical and Computational Chemistry II**

University of Tromsø, Oslo (Noruega)

*Analysis of the spin-crossover mechanism in Fe(II)*

R. Broer, M. Etinski, C. De Graaf, R.W.A. Havenith, C.M. Marian, A. Rudavskiy, C. Sousa, J. Tatchen

**11<sup>th</sup> International Conference on Relativistic Effects in Heavy-Element Chemistry and Physics**

Comenius University, Smolenice Castle (República Txeca)

*Mechanisms of spin crossover in Fe(II) complexes*

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



**10<sup>th</sup> Congress of the World Association of Theoretical and Computational Chemists, WATOC 2014**

*Pontificia Universidad Católica de Chile, Santiago de Chile (Xile)*

*Spin Crossover in Fe(II) Metal-Organic Complexes*

A. Rudavskyi, R. Broer, M. Etinski, C. de Graaf, R.W.A. Havenith, C.M. Marian, C. Sousa, J. Tatchen

*Analyzing the electronic structure of molecules using Continuous Symmetry Measures*

P. Alemany

*Solvatochromic effects on a D- $\pi$ -A type organic dye with a quinoidal thiophene  $\pi$ -bridge*

C. Climent, D. Casanova, P. Alemany

**Advances in Computational Spectroscopy 2014, COST CODECS**

*Matej Bel University, Bratislava (Eslovàquia)*

*Absorption Spectrum of [Fe(bpy)<sub>3</sub>]<sup>2+</sup>: Beyond the Static Approach*

A. Domingo, C. Sousa, C. de Graaf

**XI Simposio de Investigadores Jóvenes RSEQ-Sigma Aldrich**

*Universidad del País Vasco, Bilbao (Espanya)*

*Synthesis and Study of an Organic Molecule with Paramagnetic Response*

D. Reta-Mañeru, C. Heras, I.d.P.R. Moreira, J.M. Bofill, A. López-Calahorra

**50<sup>th</sup> Syposium on Theoretical Chemistry 2014 (STC2014)**

*Universität Wien, Vienna (Àustria)*

*Remarks on the exact energy functional for fermions: a wave-function theories using the Löwdin partitioning technique*

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

*Locating Saddle Points of any Index on Potential Energy Surfaces by the Generalized Gentlest Asecent Dynamics*

J. M. Bofill, W. Quapp

**RCTF2014 14ème Rencontre des Chimistes Théoriciens Francophones**

*Université Pierre et Marie Curie, Paris (França)*

*Towards theoretical modeling of realistic systems in heterogeneous catalysis from first principles*

F. Illas

**XL Congreso Internacional de Químicos Teóricos de Expresión Latina - QUITEL**

*Universidad San Francisco de Quito, Galápagos (Ecuador)*

*New Catalysts for CO<sub>2</sub> activation and hydrogenation based on Au/TiC and Cu/TiC: Theoretical modeling and experiments*

F. Illas

*DFG-out kinase inhibitors: Understanding their binding mechanism*

L. Coronel, E. Yurci, J. Mayans, J.M. Granadino-Roldan, M.S. Tomás, M.D. Pujol, J. Rubio-Martínez

*Steered molecular dynamics and umbrella sampling approaches to the binding mechanism of DFG-out p38 $\alpha$  kinase inhibitors*

J. Clark, J.M. Granadino-Roldán, M.S. Tomás, M.D. Pujol, J. Rubio-Martínez

**XXV Congresso Nazionale Della Societa Chimica Italiana (SCI)**

Università della Calabria, Cozenza (Itàlia)

*First principles modeling of realistic systems in heterogenous catalysis*

F. Illas

**Symposium on clusters, Cluster Assemblies and Nano-scale Materials - III**

Harish-Chandra Research Institute, Allahabad (Índia)

*Ionicity, Covalency and the Cluster-to-Bulk Transition in Nano-Oxides*

S. T. Bromley

**European Materials Research Society (EMRS) – Fall Meeting 2014, Symposium D: Transparent Conducting Oxides and Related Materials**

Warsaw University of Technology, Warsaw (Polònia)

*Bandgap Engineering via Nanoporosity*

S. T. Bromley

**Cosmic Dust VII**

Osaka Sangyo University, Osaka (Japó)

*A Bottom-up Computational Modelling Approach to the Formation and Properties Silicate Dust*

S. T. Bromley

**COST Action CM1104 meeting - Reducible oxide chemistry, structure and functions**

Zaragoza Scientific Center for Advanced Modeling (ZCAM), Zaragoza (Espanya)

*Approaching the nanocluster-to-bulk structural transition in CeO<sub>2</sub>, TiO<sub>2</sub> and SiO<sub>2</sub>*

S. T. Bromley

**Symposium on Clusters, Nanoparticles and Nanostructures in Catalysis and Beyond**

Universitat de Barcelona, Barcelona (Espanya)

*Organizing Committee*

K.M. Neyman

*From supported oxide nanoclusters to nanoporous oxide polymorphs*

S. T. Bromley

*Studies of nanostructuring effects on model catalysts*

S.M. Kozlov, K.M. Neyman

**SFB “Functional Oxide Surfaces and Interfaces”**

Institute of Materials Chemistry, Vienna University of Technology, Vienna (Àustria)

*Towards more realistic density functional modelling of nanostructures relevant to heterogeneous catalysis*

K.M. Neyman

**International Conference “Molecular Complexity in Modern Chemistry”**

Moscow (Rússia)

*Towards realistic first-principles modelling of complexity in heterogeneous catalysis*

K.M. Neyman

**XI Girona Seminar on Carbon, Metal, and Carbon-Metal Clusters: From Theory to Applications**

Girona (Espanya)

*First-principles studies of metal particles in catalysis*

K.M. Neyman

**CIC energiGUNE**

Parque Tecnológico de Álava, Miñano (Espanya)

*First-principles modelling of complex nanostructures: From catalysis to energy technologies*

K.M. Neyman

**247th National Meeting of the American Chemical Society, Symposium “Clusters in Catalysis”**

Dallas (Estats Units)

*Density-functional studies in heterogeneous catalysis: Extended surfaces or nanoparticles?*

K.M. Neyman

**248th National Meeting of the American Chemical Society**

San Francisco (Estats Units)

*CO adsorption on mononuclear platinum species supported on nanoparticulate ceria*

H.A. Aleksandrov, K.M. Neyman, G.N. Vayssilov

**Clusters 2014: Workshop on reactivity and catalysis of metallic nanoclusters**

Esbo (Finlàndia)

*Density-functional modelling of metal nanoparticles relevant for catalysis*

K.M. Neyman

*Theoretical investigations of metal particles as potential PEMFC electrocatalysts*  
P. Jennings, R.L. Johnston, H.A. Aleksandrov, K.M. Neyman

**VI Conference in Education and Modeling in Basic Sciences**

Universidad de Medellín, Medellín (Colòmbia)

*Modelling the effect of metal-support interactions in nanostructured heterogeneous catalysts based on Pt and CeO<sub>2</sub>*

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

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

Charles University in Prague (República Txeca)

*Progress in modelling of ionic metal species in CeO<sub>2</sub>-based catalytic nanomaterials*

K.M. Neyman, A. Bruix, A. Figueroba, F. Illas, J. Libuda, V. Matolin *Relative stability of mononuclear platinum species supported on nanoparticulate ceria and adsorption of CO on them*

H.A. Aleksandrov, K.M. Neyman, G.N. Vayssilov

*Substrate effects on Pt nanoparticles. Electronic and structural differences induced by CeO<sub>2</sub>(111) and MgO(100) on ~1 nm Pt clusters*

S.M. Kozlov, K.M. Neyman, S. Fabris

**4th International Symposium of Intermetallic Compounds in Catalysis**

Santa Margherita de Ligure (Itàlia)

*Geometric and electronic structure of Pd-based intermetallic nanoparticles*

S.M. Kozlov, K.M. Neyman

**General Meeting of COST-MP0903 Action “Nanoalloys as Advanced Materials”**

Santa Margherita de Ligure (Itàlia)

*Modeling of bimetallic and intermetallic nanoparticles containing Pd*

S.M. Kozlov, K.M. Neyman

**Evaluation Meeting of COST-MP0903 Action “Nanoalloys as Advanced Materials” (April 9)**

Santa Margherita de Ligure (Itàlia)

*Report on the activities of the Working Group 3 “Catalysis”*

K.M. Neyman

**4th Workshop Quantum Days in Bilbao**

Centro Vasco de Matemáticas Aplicadas, Bilbao (Espanya)

*Quantum reaction dynamics in gas phase and in a quantum solvent (<sup>4</sup>He nanodroplets)*

M. González, A. Vilà, R. Mayol, P. Gamallo, M. Paniagua, C. Petrongolo

**Helium-mediated Synthesis, Soft-landing and Spectroscopy of Metal Nanoparticles on Surfaces (HeSSMe 2014)**

Consejo Superior de Investigaciones Científicas, Madrid (Espanya)

*Molecular photodissociation processes in helium nanodroplets. A theoretical quantum dynamics approach*

A. Vilà, M. González, R. Mayol

## **II Jornada de Bioinformàtica i Biologia Computacional**

Barcelona (Espanya)

*Development of new drugs against tuberculosis. Computer-aided identification of inhibitors of the enzyme CDP-methylerythritol synthase*

C. Obiol-Pardo, C. García Sabaté, E. Schreiber, J. Rubio-Martínez. S. Imperial

## **14<sup>th</sup> Fock meeting of Quantum and Computational Chemistry**

Samara (Rússia)

*Continuous Shape and Symmetry Measures: a useful tool in structural chemistry*

P. Alemany

*Optical properties of 4-bromobenzaldehyde derivatives in chloroform solution*

C. Climent, D. Casanova, P. Alemany

## **6<sup>th</sup> Time-Dependent Density-Functional Theory: Prospects and Applications.**

Benasque (Espanya)

*Non-Adiabatic Dynamics with Conditional Wave Functions*

G. Albareda

## **78. Jahrestagung der Deutsche Physikalische Gesellschaft und DPG-Frühjahrstagung.**

Berlin (Alemanya)

*Non-Adiabatic Molecular Dynamics with Conditional Wave Functions*

G. Albareda, H. Appel, I. Franco, A. Abedi, Á. Rubio

## **CECAM Workshop. Recent progress in adiabatic and non-adiabatic methods in quantum dynamics.**

Lausanne (Suïssa)

*A Correlated Electron-Nuclear Dynamics with Conditional Wave Functions*

G. Albareda, H. Appel, I. Franco, A. Abedi, Á. Rubio

## **Jornada d'Investigadors Predoctorals Interdisciplinària (2nd JIPI)**

Universitat de Barcelona, Barcelona (Espanya)

*Astrochemistry & Nitrile compounds*

E.López

## **4th Workshop on High Dimensional Quantum Dynamics: Challenges and Opportunities**

Universitat de Strasbourg, Mittelwihr (França)

*MCTDH Study of the eigenstates of a H<sub>2</sub> molecule confined inside a SWCNT*  
F. Huarte-Larrañaga, M. Mondelo-Martell

**SPECMO 2014 : "New experimental and theoretical developments in molecular spectroscopy : pushing the limits"**

Université Franco-Allemande, CNRS, Corsica (França)

*Quantum Dynamics study of the eigenvalue spectrum of a Hydrogen molecule confined inside a Single Walled Carbon Nanotube*  
M. Mondelo-Martell, F. Huarte-Larrañaga

**XI Carbohydrate symposium**

Universitat de Logroño, Logroño (Espanya)

*Molecular mechanisms of retaining glycosyltransferases. QM/MM metadynamics investigations*  
C. Rovira

**Minisymposium on structural biology**

Universitat d'Oslo, Oslo (Suècia)

*The catalytic mechanism of catalase-peroxidases (KatGs)*  
C. Rovira

**International workshop on Biomembranes: from fundamentals to applications**

CSC – IT Center for Science, Espoo, Helsinki (Finlàndia)

*The effects of chloroform in bilayer interleaflet coupling*  
R. Reigada

## ESTADES EN CENTRES EXTERNS

---

- M. Albertí      **Univeristà di Perugia, Dipartimento di Chimica (Itàlia)**  
Professora en any sabàtic. Gener-Juliol 2014
- D. Reta-Mañeru      **Indian Institute of Technology Bombay, Mumbai (Índia)**  
Estada de recerca predoctoral. Gener-Febrer 2014
- J. Ribas      **Japan Atomic Energy Agency, Center for Computational Science and E-systems (Japó)**  
Investigador visitant invitat. Gener 2014
- M. Fumanal      **Trinity College Dublin, Computational Spintronics Group (Irlanda)**  
Estada de recerca predoctoral. Abril-Maig 2014
- S.M. Kozlov      **Scuola Internazionale Superiore di Studi Avanzati, Trieste (Itàlia)**  
Estada de recerca predoctoral. Març-Maig 2014
- P. Gamallo      **MATGAS, Barcelona (Espanya)**  
Professor visitant invitat. Maig-Juliol 2014
- X. Giménez      **MATGAS, Barcelona (Espanya)**  
Professor visitant invitat. Maig-Juliol 2014
- P. Alemany      **Donostia International Physics Center, Donostia (Espanya)**  
Investigador visitant invitat. Juny 2014
- C. Sousa      **Universitat de Groningen, Groningen (Holanda)**  
Professor visitant invitat. Juliol 2014
- C. Climent      **Donostia International Physics Center, Donostia (Espanya)**  
Estada de recerca predoctoral. Juliol 2014

- K.M. Neyman      **Friedrich-Alexander-Universität Erlangen-Nürnberg, Erlangen (Alemanya)**  
Investigador visitant invitat. Juliol-Agost 2014
- A. Falceto      **Cornell University, Department of Chemistry and Chemical Biology (Estats Units)**  
Estada de recerca predoctoral. Juliol-October 2014
- D. Reta-Mañeru      **University of Strasbourg, Strasbourg (França)**  
Estada de recerca predoctoral. Setembre-Novembre 2014
- P. Alemany      **Departamento de Química, Universidad Católica del Norte, Antofagasta (Xile)**  
Investigador visitant invitat. Octubre 2014
- M. Llunell      **Donostia International Physics Center, Donostia (Espanya)**  
Investigador visitant invitat. Novembre 2014



## 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 (AGAUR)

*Grup d'Estructura Electrònica.*

Santiago Alvarez Reverter, Universitat de Barcelona

**2014SGR662**, 2014-2016

Agència de Gestió d'Ajuts Universitaris i de Recerca (AGAUR)

*Simulació molecular aplicada (MOLSIMAP)*

Lourdes Vega Fernández, MATGAS

**2014SGR1582**, 2014-2016

Agència de Gestió d'Ajuts Universitaris i de Recerca (AGAUR)

*Grup de Bioquímica Integrativa*

Marta Cascante Serratosa, Universitat de Barcelona

**2014SGR1017**, 2014-2016

Agència de Gestió d'Ajuts Universitaris i de Recerca (AGAUR)

*Grup de Dinàmica de Reaccions Químiques*

Antonio Aguilar Navarro, Universitat de Barcelona

**2014SGR0025**, 2014-2016

Agència de Gestió d'Ajuts Universitaris i de Recerca (AGAUR)

*Química Orgànica Experimental, Teòrica i Computacional*

Josep Maria Bofill Vilà, Universitat de Barcelona

**2014SGR139**, 2014-2016

Agència de Gestió d'Ajuts Universitaris i de Recerca (AGAUR)

*Laboratori de Ciència de Materials Computacional*

Francesc Illas Riera, Universitat de Barcelona

**2014SGR97**, 2014-2016

Agència de Gestió d'Ajuts Universitaris i de Recerca (AGAUR)

*Estructura i funció en macromolècules*

Carme Rovira Virgili, Universitat de Barcelona

**2014SGR-987**, 2014-2016

Agència de Gestió d'Ajuts Universitaris i de Recerca (AGAUR)

*Fisicoquímica de las interacciones y fenómenos de transporte a nivel coloidal entre iones, macromoléculas y nanopartículas de interés ambiental*

Francesc Mas Pujadas, Universitat de Barcelona

**CTM2012-39183-C02-02**, 2013-2015

Ministerio de Economía y Competitividad (MINECO)

*Estructura electrónica y propiedades de moléculas y sólidos inorgánicos.*

Eliseo Ruiz Sabin and 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)

*Dinámica de procesos químicos mediante haces moleculares y métodos teóricos.*

Antonio Aguilar Navarro (IP1), Universitat de Barcelona

**CTQ2010-16709**, 2011-2014

Ministerio de Ciencia e Innovación (MICIIN)

*Experimentación y modelización computacional de dinámica de reacciones químicas.*

Antonio Aguilar navarro (IP1), Fermín Huarte Larrañaga (IP2), Universitat de Barcelona

**CTQ2013-41307-P**, 2014-2016

Ministerio de Economía y Competitividad (MINECO)

*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)

*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 (MINECO)

*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)

*Theoretical modeling of the reactivity of nanostructures relevant to catalysis and to energy technologies*

Konstantin Neyman, Universitat de Barcelona

**CTQ2012-34969**, 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)

*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.

*Estructura, Redes y Motivos Celulares.*

Ramon Reigada Sanz, Universitat de Barcelona

**BFU2010-21847-C02-0 (subprograma BMC)**, 2011-2013 (Extended until 2014)

Ministerio de Ciencia e Innovación (MICINN)

*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)

*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), United Kingdom

*Theoretical Chemistry and Computational Modelling*

Manuel Yáñez, Universidad Autónoma de Madrid

**TCCM-EJD**, 2014-2018

Horizon 2020 – Research and Innovation Framework Programme

*Planetary entry integrated models (Phys4Entry).*

Ramón Sayós Ortega, Universitat de Barcelona

**Referencia**, FP7-SPACE-2009-1, 242311

7th Framework Programme of the European Union

*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 Serratos. Universitat de Barcelona.

**PITN-GA-2010-264780**, 2010-2014

FP7-PEOPLE. European Commission.

*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)

*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)

*Device simulation (RF), NannoMechanics and Spintronics Entidad financiadora: Graphene  
Flagship.*

David Jiménez Jiménez, Universitat Autònoma de Barcelona

**604391 Graphene Flagship**, 2013-2016

FET. European Union

*Dynamical processes in open quantum systems: pushing the frontiers of theoretical spectroscopy.*

Ángel Rubio Secades, Universidad del País Vasco and Fritz Haber Institute of the Max Planck Society

**ERCDYNAMO**, 2011-2016

European Research Council. Advanced Grant.

*Simulación de sistemas cuánticos nanoestructurados fuera del equilibrio.*

Ángel Rubio Secades, Universidad del País Vasco

**IT578-13**, 2013-2018

Grupos Consolidados. Gobierno del País Vasco.

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

Francesc Illas Riera, Universitat de Barcelona

2014

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

**Premi ICREA Academia**

E. Ruiz, Universitat de Barcelona

2014-2018

Institució Catalana de Recerca i Estudis Avançats (ICREA)

100111010  
101010110  
11 **iqtc** 0  
010111010  
010000010



Institut de Química Teòrica  
i Computacional