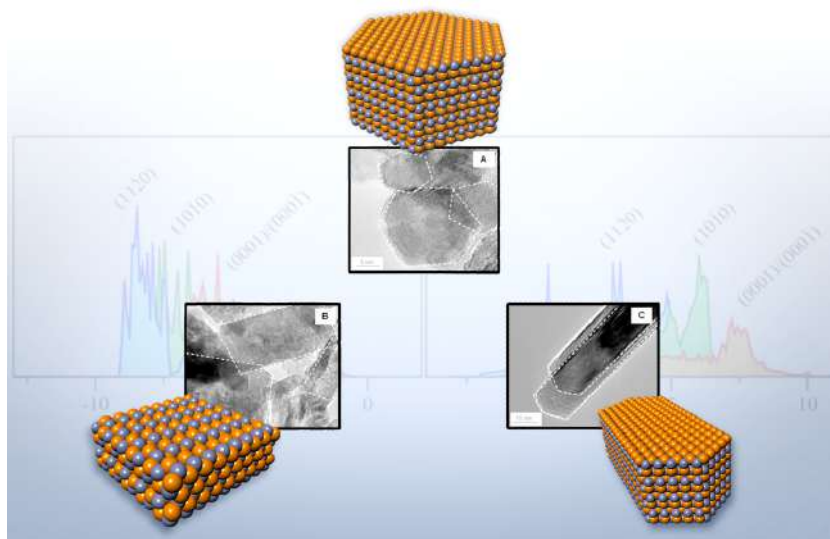


Institut de Química Teòrica i Computacional de la Universitat de Barcelona (IQTCUB)





La creació de l'Institut de Química Teòrica i Computacional de la Universitat de Barcelona (IQTCUB) va ser aprovada per decisió del Consell de Govern en sessió ordinària el 21 de novembre de 2007. L'IQTCUB agrupa professors i investigadors de diferents departaments que tenen com a denominador comú l'ús 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 en un "laboratori virtual" de càlcul que sovint només és el punt d'entrada a un centre de supercomputació que disposi de centenars o milers de processadors. Els objectius fonamentals de la Química Teòrica i Computacional són arribar a assolir una comprensió detallada a nivell molecular de processos químics, suggerir nous experiments a partir de prediccions que hauran de ser comprovades experimentalment, interpretar resultats experimentals, i introduir nous conceptes i eines. La recerca duta a terme a l'IQTCUB està orientada a dissenyar nous fàrmacs i nous materials amb propietats fetes a mida, a proposar nous processos químics per obtenir productes amb una selectivitat i eficiències més grans, a millorar processos existents per fer-los més eficients i sostenibles, i a proposar noves fonts d'energia sostenibles. Malgrat que aquests objectius són comuns a altres disciplines científiques, la visió que aporta la Química Teòrica i Computacional és única i no pot ser obtinguda mitjançant altres mètodes. En conseqüència, les eines desenvolupades i emprades a l'IQTCUB són essencials per resoldre molts dels desafiaments de la societat actual.

Aquest any hem tornat a viure una situació econòmica difícil. 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. Aquesta memòria de recerca 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 i materials, 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. Esperem que el projecte de l'IQTCUB continuï rebent el suport de la nostra universitat en els propers anys, atès que aquest suport serà necessari per tal de mantenir el nivell científic de l'IQTCUB, un nivell científic elevat que va ser reconegut en una avaluació externa el 2013.

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	9
II. ACTIVITATS DE L'IQTCUB.....	19
II.1 Activitats de tipus general	19
II.2 Seminaris i conferències de l'IQTCUB	23
II.3 Investigadors convidats per l'IQTCUB	25
III. ACTIVITAT CIENTÍFICA DELS MEMBRES DE L'IQTCUB.....	27
III.1 Resultats més rellevants	27
III.2 Llista de publicacions	45
Articles publicats	
Capítols de llibres i proceedings	
III.3 Altres activitats	59
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

Prof. Francesc Illas Riera	<i>Director</i>
Prof. Ramón Sayós Ortega	<i>Tresorer i Secretari</i>
Prof. Carme Rovira Virgili	<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 83 docents/investigadors. A continuació es mostra la llista completa de membres indicant la seva categoria acadèmica i el departament de la UB al qual pertanyen.

Cognoms	Nom	Departament/Unitat
Catedràtics		
Aguilar Navarro	Antonio	Química Física
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
Professors Titulars		
Albertí Wirsing	Margarita	Química Física
Costa Sala	Ramón	Química Inorgànica
De Andrés Llopis	Jaime	Química Física
De Pinho Ribeiro Moreira	Ibério	Química Física
Giménez Font	Xavier	Química Física
Huarte Larrañaga	Fermín	Química Física
Lucas Alcorta	Josep Maria	Química Física
Llunell Marí	Miquel	Química Física
Mota Valeri	Fernando	Química Física
Paniagua Valle	Juan Carlos	Química Física
Solé Sabaté	Albert	Química Física
Sousa Romero	Carme	Química Física
Vilaseca Font	Eudald	Química Física

Professors Agregats i Lectors

Aullón López	Gabriel	Química Inorgànica
Deumal Solé	Mercè	Química Física
Gamallo Belmonte	Pablo	Química Física
Madurga Díez	Sergio	Química Física
Ribas Ariño	Jordi	Química Física
Reigada Sanz	Ramón	Química Física

Professors Associats

Gómez Coca	Silvia	Química Inorgànica
Jover Modrego	Jesús	Química Inorgànica
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*Beatriu de Pinós-Marie Curie*

Cirera Fernández	Jordi	Química Inorgànica
Echeverría López	Jorge	Química Inorgànica

Beatriu de Pinós

Albareda Piquer	Guillem	IQTCUB
Jornet Somoza	Joaquim	Química Física

Ramón y Cajal

Viñes Solana	Francesc	Química Física
--------------	----------	----------------

Altres

Alfonso Prieto	Mercedes	Química Orgànica
Álvarez Falcón	Leny	Química Física
Chul Ko	Kyoung	Química Física
Kovács	Gábor	Química Física
Kozlov	Sergey M.	Química Física
Valero	Rosendo	Química Física

Investigadors Predoctorals*Beca FPI*

Alonso Gil	Santiago	Química Orgànica
Climent Biescas	Clàudia	Química Física
Falceto Palacín	Andrés	Química Orgànica
Jurado Sáez	Manuel	Química Física
Posada Pérez	Sergio	Química Física
Vilà Casanova	Arnau	Química Física

Beca FPU

Alcon Rovira	Isaac	Química Física
Amoza Dávila	Martín	Química Inorgànica
Garrido Sagargazu	Eduardo	Química Física
Mondelo Martell	Manel	Química Física
Rojas Cervellera	Victor	Química Orgànica

Beca UB

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

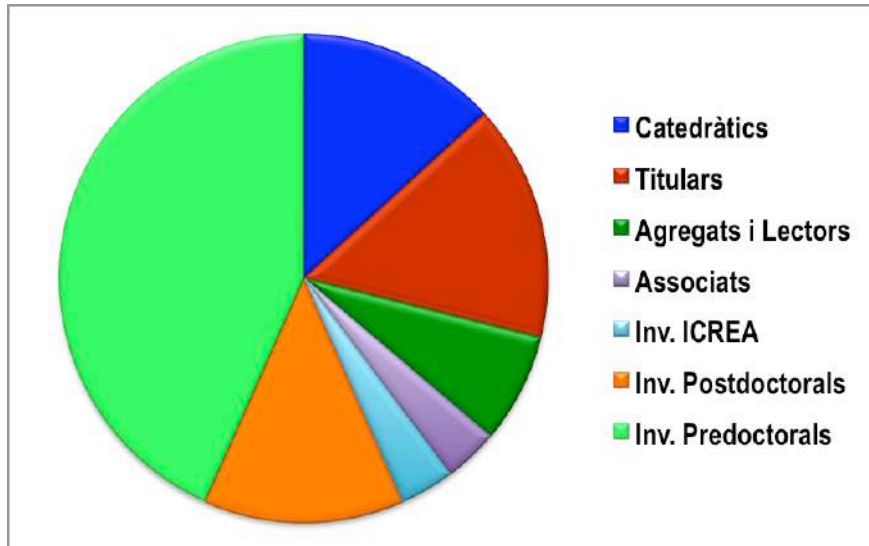
Beca FI

López Marne	Estefanía	Química Física
Prats García	Hèctor	Química Física

Altres

Alonso Benito	Gerard	Química Física
Balcells Nadal	Cristina	Química Física
Cebrián Prats	Anna	Química Física
Cuko	Andi	Química Física
Figueroba Sánchez	Alberto	Química Física
Francese	Tommaso	Química Física
Jiménez Grávalos	Fernando	Química Física
Macià Escatllar	Antoni	Química Física
Manadé Company	Montserrat	Química Física
Martín Rodríguez	Alejandro	Química Inorgànica
Maxwell Villacorta	Lindley	Química Inorgànica
Millán Alvares	Maria Angeles	Química Física
Muñoz Galán	Helena	Química Física
Notario Estévez	Almudena	Química Física
Omidvar	Akbar	Química Física
Pueyo Bellafont	Noelia	Química Física

Reta Mañeru	Daniel	Química Física
Roncero Barrero	Cristina	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 dues persones següents:

Jordi Inglés Camats

Responsable de sistemes

Teresa Arenal Porcel

Tècnic informàtic

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 clústers de càlcul es troba refrigerat per dues màquines d'aire condicionat de 44.000 i 66.000 frigories respectivament. En el cas de iqt06 es troba a un altre espai refrigerat per una màquina d'aire condicionat de 30.000 frigories i dues 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 de l'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 són 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 són 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 són 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 són 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 són 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 400.000 €)

<i>Tipus de màquina</i>	Clúster heterogeni
<i>Sistema Operatiu</i>	SLES11.
<i>Serveis</i>	Clúster de càlcul.
<i>Estructura</i>	28 nodes en clúster
<i>Comentaris</i>	Tots els processadors són de 64 bits
<i>Especificacions:</i>	

25 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

6 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 35.000 €)

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

Node

CPU: 1 Intel Core i7 950 3,06GHZ
 RAM: 16GB
 HD: 1 disc de 1TB (Sistema operatiu)
 Xarxa: 1 targeta 100/1000 xarxa interna
 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

Node AZServer 4G3S

CPU: 2 Xeon E5-2620v3 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 980

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

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

Especificacions:

2 Nodes INTEL DELL PowerEdge 2950 III

CPU: 2 Xeon QuadCore E5420

RAM: 8GB

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

Xarxa: 2 targetes 100/1000 xarxa interna

Xarxa d'administració ILO

2 Nodes HP ProLiant DL120 G5

CPU: 1 Xeon Dual Core 2.33GHZ

RAM: 8GB

HD: 2 discos de 160GB (Sistema operatiu)

Xarxa: 2 targetes 100/1000 xarxa interna

Servidor de visualització (valor aproximat 3.000 €)

<i>Tipus de màquina</i>	1 màquina HP ProLiant DL385
<i>Sistema Operatiu</i>	SLES10
<i>Serveis</i>	Màquina per utilització d'aplicacions gràfiques
<i>Estructura</i>	1 màquina
<i>Comentaris</i>	Suportada per un SAI.

Especificacions

Màster HP ProLiant DL385

CPU : 2 AMD Opteron 275 Dualcore a 2.2GHZ

RAM: 4GB

HD: 6 discos formant un raid de 734 GB

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

ALTRES _____

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

- Màquina Backup DELL R515 (màquina de backup amb 4TB de disc i un SAI de suport).

- Màquina cintes HP MSL4048 (màquina de cintes amb 48 cintes amb capacitat aproximada de 1TB/cinta).
- Màquina d'administració (pc amb 3 targetes de xarxa per suport a incidències crítiques).
- Màquina proxy (servidor que dona sortida a la xarxa publica des de la xarxa del iqtcb).
- Switch Layer 3 HP Procurve de 24 ports (dona cobertura a tota la infraestructura dels CPD del IQTCUB).
- 8 Switchs Layer 2 Dlink de 48 ports (xarxa interna clústers cerqt2, iqtcb01, iqtcb02, iqtcb03).
- 4 Switchs Layer 2 HP de 48 ports (xarxa interna clúster iqtcb04, iqtcb05 i iqtcb06).
- 3 Switchs Infiniband Voltaire de 36 ports (xarxa càlcul iqtcb04).
- Switch modulable HP (8 mòduls per xarxa interna clúster iqtcb01,iqtcb02,iqtcb03).
- 2 Switchs modulables HP 10GB (xarxa interna clúster iqtcb06 i servidors de fitxers)

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

RESUM DEL POTENCIAL DE CÀLCUL _____

Processador (Cores)3326 CPU's

Memòria23224 GB RAM

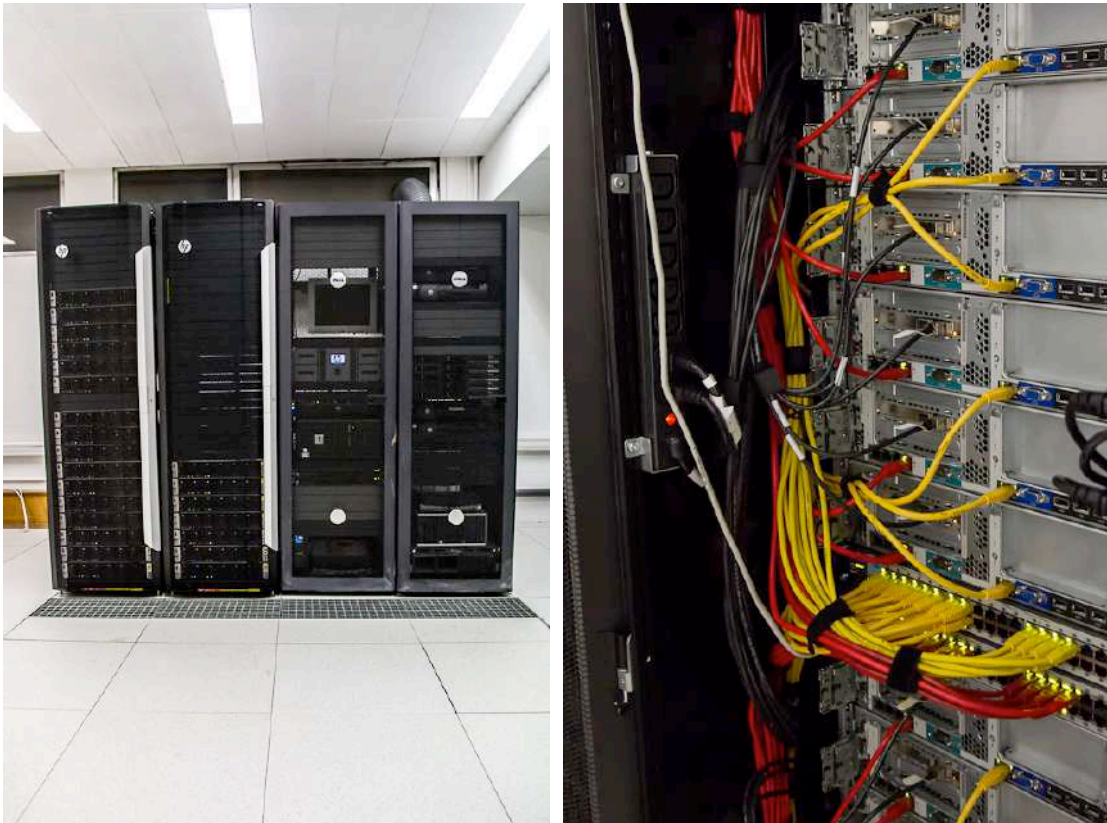
Discs de Càlcul 176 TB

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

2.145.000 €*

*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 2015.

a. *6^a Jornada de l'IQTCUB*. El 3 de Juliol de 2015 tingué lloc la sisena edició d'aquesta Jornada de divulgació científica. En aquesta jornada els membres de l'IQTCUB i altres conferenciantes de reconegut prestigi internacional exposaren els seus treballs més recents. En l'edició d'enguany destacà la participació de la Prof. Leticia González de la Universitat de Viena, i el Dr. Guillem Albareda, Dr. Pablo Gamallo, Dr. Xavier Barril, Dr. Jordi Cirera, i Daniel Reta de la Universitat de Barcelona. Les despeses totals de la Jornada es corresponen al cost de l'estada de la Prof. González, juntament amb el servei de càtering per als assistents.

Despesa pressupostada: 1040 €

VI Jornada iqtcUB
Química Teòrica i Computacional
 Auditori Enric Casassas, 3 de juliol, 9.30h

Vine a conèixer-nos!

The image is a promotional poster for the VI Jornada iqtcUB. It features a blue background with a white grid pattern on the left. The text is in white and yellow. The central part of the poster is a collage of scientific images: a 3D molecular model of a protein-ligand complex, a 2D plot of a potential energy surface, a 3D plot of a molecular orbital, a 2D plot of a molecular structure, and a 3D plot of a molecular structure. The text 'VI Jornada iqtcUB' is in a large, bold, yellow font. Below it, 'Química Teòrica i Computacional' is in a smaller, bold, white font. The location and time 'Auditori Enric Casassas, 3 de juliol, 9.30h' are also in white. The phrase 'Vine a conèixer-nos!' is in a bold, white font. The logo of the Institut de Química Teòrica i Computacional (iqtcUB) is in the top left corner, featuring a grid of binary code and the letters 'U' and 'B' in circles.

b. *Promoció i incentivació a la recerca.* Enguany l'IQTCUB ha concedit un *Ajut d'iniciació a la recerca* consistent en un contracte personal per valor de 2000 €. Aquest tipus d'ajuts estan destinats a estudiants que estiguin acabant o que hagin finalitzat els seus estudis de grau o llicenciatura i té 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. L'ajut ha estat concedit al senyor Pablo Miguel Blanco Andrés Despesa associada: 2000 €

Ajuts d'iniciació a la RECERCA

NOUS CONTRACTES

CURS 2015-2016

L'Institut de Química Teòrica i Computacional de la Universitat de Barcelona, oferta CONTRACTES per ajudar a realitzar un MASTER OFICIAL de la UB als estudiants interessats en col·laborar amb línies de recerca de l'institut

Institut de Química Teòrica i Computacional de la Universitat de Barcelona

www.iqtcub.es/AjutsMaster

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 cinquena edició amb un gran èxit de participació, rebent més de 30 sol·licituds d'inscripció. Una diferència respecte dels anys anteriors és que en aquesta edició s'ha inclòs una sessió orientada a la visualització de biomolècules. Els diferents temes que s'han cobert són:

- Ciència de materials
- Processos de difusió
- Representació molecular
- Visualització de biomolècules
- Programació avançada
- Linux avançat

En l'edició d'enguany, celebrada del 25 de Juny a l'1 de Juliol, hi participaren 25 alumnes. Despesa pressupostada: 250 €

Institut de química teòrica i computacional de la UB

iqtc U B

CURS D'INTRODUCCIÓ A LA QUÍMICA COMPUTACIONAL

- 25/06 al 1/07 matins de 9:00 a 13:30
- 25 places
- aprofundiment en Linux, programació, eines de la QC

info & inscripció: http://www.iqtc.ub.es/Curs_IQC

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 9 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 11 estudiants. Despesa pressupostada: 240 €



Fotografia feta durant el *Curs d'Introducció a la Química Computacional* durant la visita al Barcelona Supercomputing Center

e. *Curs intensiu del màster interuniversitari i europeu de Química Teòrica i Modelització Computacional.* Aquest curs tingué lloc a la Facultat de Química de la Universitat de Barcelona des de l'11 de Gener fins el 6 de Febrer. Aquest curs, al qual van assistir 30 alumnes, fou coordinat per Ramón Sayós, membre de l'IQTCUB. També han col·laborat altres membres de l'Institut en les classes i també en algunes tasques d'organització.

II.2 SEMINARIS I CONFERÈNCIES DE L'IQTCUB

L'IQTCUB ha organitzat un total de nou seminaris i/o conferències durant 2015.

1. **Prof. Luca Gavioli** (Universita Cattolica del Sacro Cuoro) Itàlia
Synthesis of nanoparticles by non-thermal laser ablation and supersonic cluster beam deposition
4 de Març, 2015
2. **Prof. Frank Hagelberg** (East Tennessee State University) Estats Units
Novel Materials Based on Carbon Nanostructures
9 de Març, 2015
3. **Prof. Isabelle André** (Université de Toulouse) França
The contribution of structural computational biology to the engineering of enzymes and the development of novel synthetic reactions
27 de Març, 2015
4. **Prof. Vladimír Sychrovský** (Institute of Organic Chemistry and Biochemistry) República Txeca
The catalytic mechanism of hOGG1 base-excision repair enzyme; the theoretical modeling of reaction channels and substrate activation
27 de Maig, 2015
5. **Prof. Jen-Shiang K. Yu** (National Chio Tung University) Taiwan
Electronic Structure of Open-Shell Tetrahedral $\{Fe(NO)_2\}_9$ Complexes
30 de Juny, 2015
6. **Prof. Markus Wilde** (University of Tokyo) Japó
Hydrogen transportation across palladium surfaces: Mechanism, structure sensitivity, and control
2 de Juliol, 2015

7. **Prof. Olga Lopez-Acevedo** (Aalto University) Finlàndia
DNA Base Pairing by Noble Metals: Structure and Electronic Properties from Density Functional Theory
16 de Juliol, 2015

8. **Prof. Peter J. Reilly** (Iowa State University) Estats Units
The Wonderful Enzyme Zoo
16 d'Octubre, 2015

9. **Prof. Vladimiro Mujica** (Arizona State University) Estats Units
Influence of Molecular Chirality in STM junctions and long-distance ET in biological systems
30 de Novembre, 2015

II.3 INVESTIGADORS CONVIDATS PER L'IQTCUB

Durant el 2015, l'IQTCUB ha acollit un total de nou visites temporals d'investigadors externs.

1. **Prof. Boutheina Kerkeni** (visitant COST)
Sungkyunkwan University, Corea del Sud
Març-Juny, 2015
2. **MsC. Daeheum Cho** (visitant convidat)
Sungkyunkwan University, Corea del Sud
Març-Juny, 2015
3. **David Mora Fonz** (visitant COST)
University College London, Regne Unit
Juny-Juliol, 2015
4. **MsC. Sunkyong Kim** (visitant convidat)
Sungkyunkwan University, Corea del Sud
Juny-Setembre, 2015
5. **Prof. José Manuel Granadino Rodán** (visitant convidat)
Universitat de Jaén, Espanya
Juliol-Setembre, 2015
6. **Mr. Christian Kunkel** (visitant convidat)
University of Wurzburg, Alemanya
Juliol-Setembre, 2015
7. **Prof. Hristiyan Aleksandrov** (visitant convidat)
University of Sofia, Bulgaria
Setembre, 2015

8. **Dr. Ali Abedi** (visitant convidat)
University of the Basque Country, Espanya
Octubre, 2015

9. **Dr. Fatma Benyettou** (visitant convidat)
Centre Universitaire de Ain Témouchent, Algèria
Novembre, 2015

III. ACTIVITAT CIENTÍFICA DELS MEMBRES DE L'IQTCUB

III.1 RESULTATS MÉS RELLEVANTS

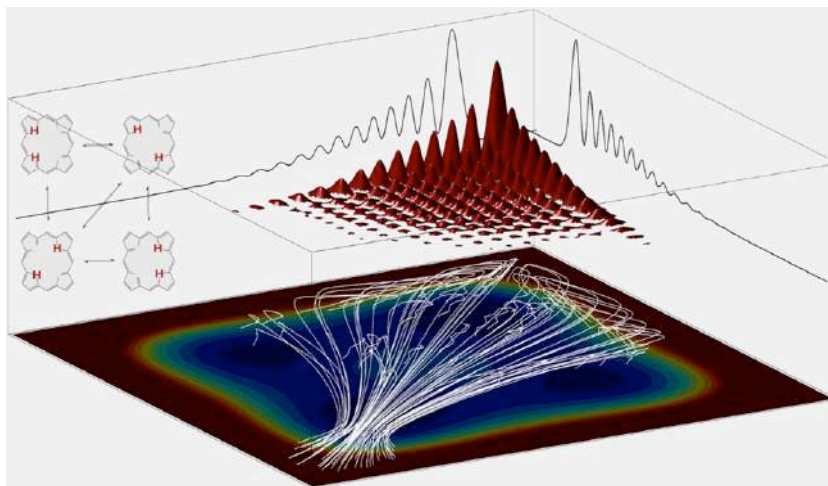
En aquesta secció es descriuen alguns dels resultats més rellevants obtinguts per cada línia de recerca de l'IQTCUB.

LÍNIA 1. DESENVOLUPAMENT DE MÈTODES, ALGORITMES I EINES COMPUTACIONALS

Conditional Born-Oppenheimer Dynamics: Quantum Dynamics Simulations for the Model Porphine

G. Albareda, J. M. Bofill, I. Tavernelli, F. Huarte-Larrañaga, F. Illas, A. Rubio.

J. Chem. Phys. Lett., 6 (2015) 1529.



Representació esquemàtica del concepte de funció d'ona condicional per al model 2D de Porfina.

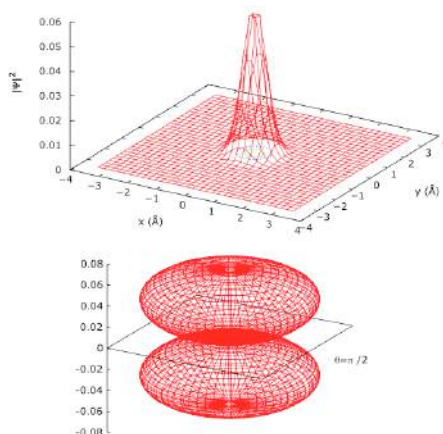
Amb l'objectiu de millorar l'eficiència dels mètodes existents per a simular la dinàmica molecular quàntica, en aquest treball es descriu un nou formalisme teòric a mig camí entre els mètodes basats en la funció d'ona i els basats en trajectòries. L'evolució de la funció d'ona d' N nuclis sobre una superfície de Born-Oppenheimer $3N$ -dimensional es reescriu en termes de funcions d'ona d'un sol nucli que evolucionen de manera no unitària sobre superfícies 3-dimensionals que depenen paramètricament d'un conjunt de trajectòries. L'esquema de propagació és exacte i, amb l'ús de tècniques estadístiques de generació de trajectòries, permet

evitar el càlcul i emmagatzematge de quantitats (funció d'ona i superfícies de potencial) la mida de les quals escala de manera exponencial amb el número de graus de llibertat. El potencial del mètode es demostra per mitjà de simulacions de la dinàmica d'un model 2-dimensional per a la Porfina, on l'alternança entre transferència seqüencial i concertada de dos protons té lloc degut a efectes quàntics.

5D quantum dynamics of the H₂@SWNT system: Quantitative study of the rotational- translational coupling

M. Mondelo-Martell, F. Huarte-Larrañaga.

J. Chem. Phys., 142 (2015) 084304.



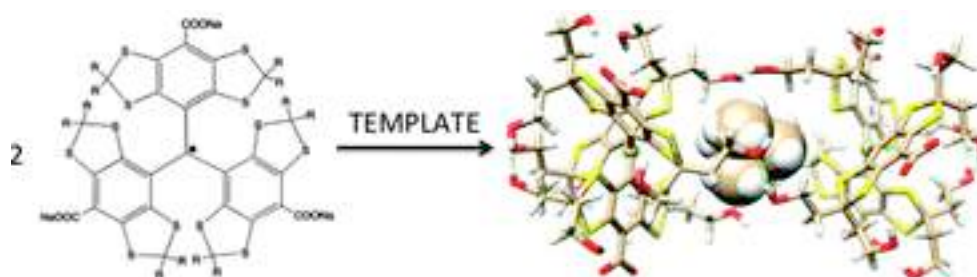
Estat fonamental del H₂ encapsulat en nanotub (8,0). Funció translacional (a dalt) i rotacional (avall).

La dinàmica de la molècula de dihidrogen confinat en nanotubs de carboni amb diferents quiralitats i diàmetres s'ha estudiat mitjançant l'ús d'un model 5-dimensional, considerant els graus de llibertat més rellevants del sistema. Els estats propis nuclears es calculen per a l'hidrògen confinat en un nanotubs de carboni (8,0) i (5,0) emprant el mètode "State-Average Multiconfigurational Time-dependent Hartree". A continuació, aquests estats es van estudiar mitjançant eines qualitatives (projecció de les funcions d'ona total en subespais determinats) i l'anàlisi més rigorosa (diferents tipus de solapaments amb funcions de referència). Es va concloure que l'anàlisi qualitativa evidencia algunes deficiències a causa d'un fort acoblament entre els graus de llibertat interns i els de translació. L'ús d'eines més precises ens permet tenir una visió més profunda del comportament de les espècies confinades .

Self-assembled trityl radical capsules – implications for dynamic nuclear polarization.

I. Marin-Montesinos, J. C. Paniagua, M. Vilaseca, A. Urtizberea, F. Luis, M. Feliz, F. Lin, S. Van Doorslaerg and M. Pons.

Phys. Chem. Chem. Phys., 17 (2015) 5785.

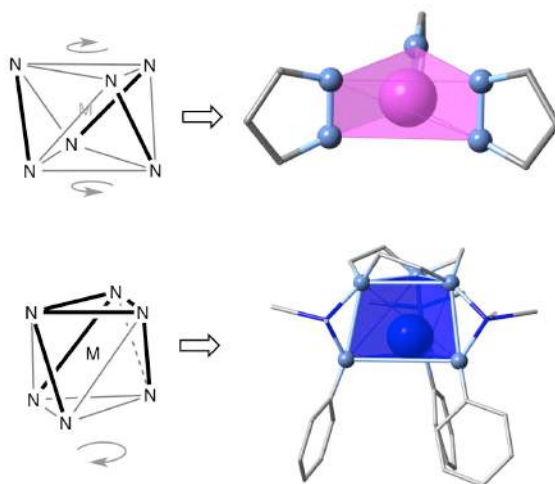


Càpsules supramoleculares radicalàries basades en un trítol soluble en aigua.

El OX63 és un radical orgànic estable i soluble en aigua molt utilitzat en la tècnica de polarització nuclear dinàmica (DNP). Càlculs DFT han posat de manifest que la molècula presenta una conformació molt estable amb forma de cúpula, i que dues d'aquestes cúpules es poden acoblar mitjançant tres ponts d'hidrogen per formar una mena de càpsula, que pot allotjar molècules tan grans com ara el tetrametilamoni. Aquest fet tenen una gran impacte en el comportament del OX63 en DNP, i han permès explicar diverses peculiaritats observades experimentalment.

LÍNIA 2. CIÈNCIA DELS MATERIALS COMPUTACIONAL**Distortion Pathways of Transition Metal Coordination Polyhedra Induced by Chelating Topology**

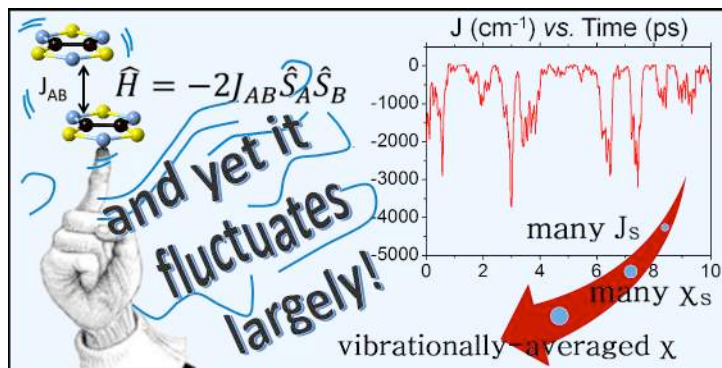
S. Alvarez.

Chem. Rev., published ASAP (2015). Doi: 10.1021/acs.chemrev.5b00537

L'anàlisi de mides contínues de forma de poliedres de coordinació de complexos de metalls de transició amb lligands bi- i multidentats ha permès establir el camí de distorsió associat a cada topologia dels anells quelat. Donat que el grau de distorsió dins d'una família de complexos depèn del tamany atòmic, sobre el qual l'estat de spin alt o baix té una forta influència, l'anàlisi presentada és especialment interessant per a identificar distorsions que acompanyen una transició de spin per efecte de la temperatura, la llum o la pressió. S'ha mostrat que les desviacions dels camins de distorsió esperats en complexos de spin alt són degudes a l'establiment d'interaccions intermoleculares tals com coordinació secundària de contraions o de molècules de dissolvent. També s'ha vist que es poden produir desplaçaments significatius de contraions a l'estat sòlid degut a que les distorsions afecten als enllaços d'hidrogen intermoleculares.

Dynamical effects on the magnetic properties of dithiazolyl bistable materials

S. Vela, M. Deumal, M. Shiga, J.J. Novoa, J. Ribas-Arino

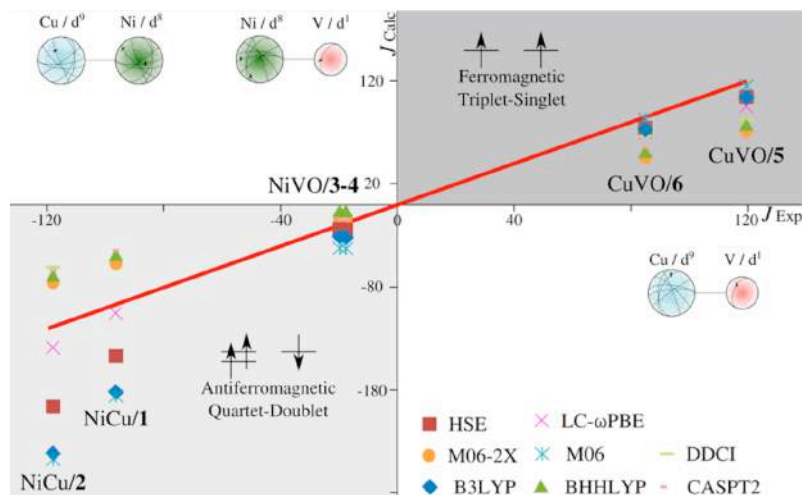
Chem. Sci. 6 (2015) 2371.

Les propietats magnètiques d'imants moleculars normalment es racionalitzen fent servir només una única configuració nuclear del sistema que s'estigui estudiant (en general una estructura cristal·lina de raigs X). En aquest treball, amb l'ajuda d'un estudi computacional, comparem els resultats obtinguts fent servir l'aproximació estàtica descrita anteriorment amb resultats obtinguts tenint explícitament en compte les fluctuacions tèrmiques. Amb aquest estudi descobrim les tremendes limitacions de la perspectiva estàtica quan es treballa amb materials magnètics els quals estan formats per radicals que presenten moviments de gran amplitud a nivell d'empaquetament cristal·lí. Com a prova de concepte, aquestes limitacions s'il·lustren per al material magnèticament biestable 1,3,5-trithia-2,4,6-triazapentalenyl (TTTA). Per a la seva fase d'alta temperatura a 300 K, es mostra que la dinàmica nuclear indueix grans fluctuacions en les interaccions de bescanvi magnètiques (J_{AB}) entre spins (fins a 1000% del valor mitjà). Aquestes desviacions donen lloc a una diferència de ~20% entre la susceptibilitat magnètica calculada a 300 K considerant explícitament la dinàmica nuclear o bé utilitzant l'estructura de raigs X, essent el valor dinàmic el que presenta una millor concordança amb les dades experimentals. El fort acoblament existent entre les interaccions magnètiques J_{AB} i les vibracions intermoleculars revela que considerar que J_{AB} és un valor constant a una temperatura donada (com sempre es fa en el magnetisme molecular) condueix a una descripció errònia del magnetisme de TTTA. En aquest cas, el concepte físicament rellevant és la distribució estadística dels valors de J_{AB} . És d'esperar que el descobriment que una única estructura de raigs X no és suficientment adequada per tal d'interpretar les propietats magnètiques del TTTA sigui decisiu en d'altres imants orgànics amb interaccions magnètiques propagant-se a través de xarxes π - π làbils.

Spin Adapted Versus Broken Symmetry Approaches in the Description of Magnetic Coupling in Heterodinuclear Complexes

R. Costa, R. Valero, D. Reta-Mañeru, I. de P.R. Moreira, F. Illas.

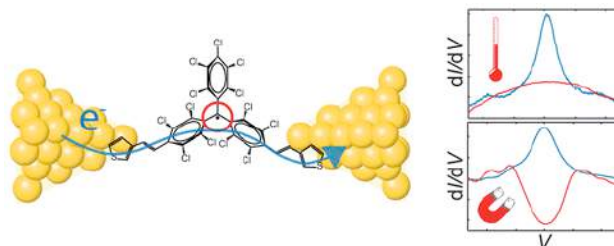
J. Chem. Theo. Comput. 11 (2015) 1006.



Hem estudiat el comportament d'un conjunt de mètodes basats tant en funcions d'ona multireferencials com en la teoria del funcional de la densitat a l'hora de predir les constants d'acoblament magnètic de complexos de coordinació heterodinuclears. El rendiment dels primers és similar al trobat als casos més simple de complexos homodinuclears de coure(II), on la precisió ve limitada per la quantitat de correlació dinàmica que es pot incorporar. Els mètodes DFT obliguen a recórrer a les funcions de simetria trencada, malgrat que les tècniques de projecció d'espín no permeten obtenir les solucions pròpies d'espín. Proposem que un procediment de correlació basat en els valors esperats del Hamiltonià d'Heisenberg aplicat sobre determinants BS curosament escollits proporciona un protocol per obtenir els valors de J d'una manera consistent. Hem observant també que en aplicar a aquests sistemes la metodologia spin-flip s'obtenen resultats sense sentit físic.

Kondo Effect in a Neutral and Stable All Organic Radical Single Molecule Break Junction

R. Frisenda, R. Gaudenzi, C. Franco, M. Mas-Torrent, C. Rovira, J. Veciana, I. Alcon, S. T. Bromley, E. Burzurí, H. S. J. van der Zant
Nano Letters 15 (2015) 310.



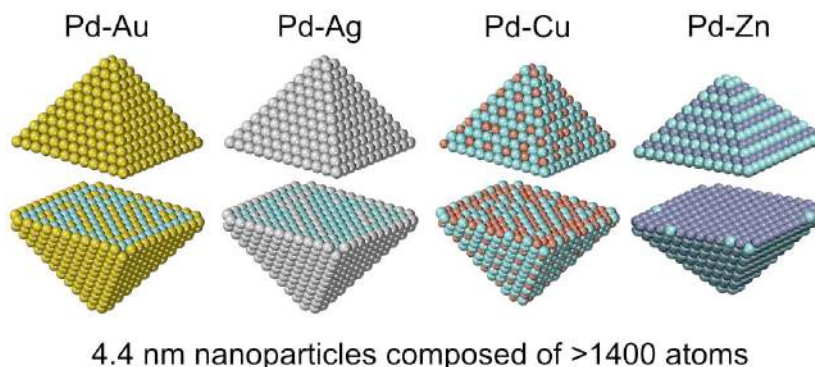
Efecte Kondo en una unió molecular radical orgànic

Els experiments i modelatge computacional confirmen l'existència de l'efecte Kondo en un radical orgànic en una unió simple molècula.

How to determine accurate chemical ordering in several nanometer large bimetallic crystallites from electronic structure calculations

S.M. Kozlov, G. Kovács, R. Ferrando, K.M. Neyman

Chem. Sci., 6 (2015) 3868.

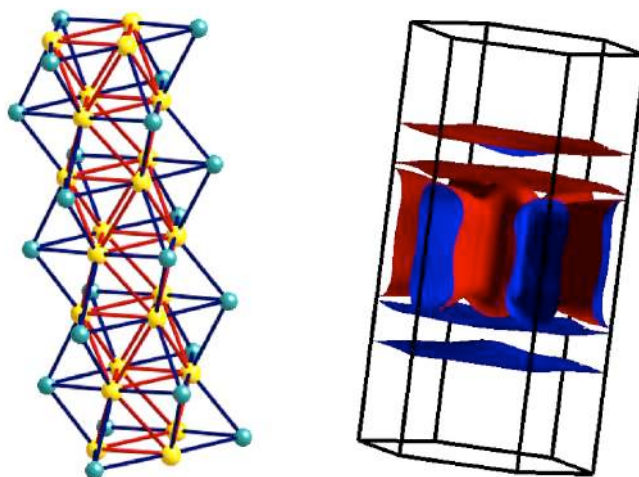


Els nanoaliatges presenten un nou grau de llibertat en comparació a les partícules nanometàl·liques – l'ordenament químic (COR) – el patró amb el qual els diferents àtoms es localitzen a la partícula. El COR defineix la reactivitat superficial dels nanoaliatges. La determinació experimental del COR en partícules bimetal·liques és molt laboriosa. A més, el càlcul del COR és un gran repte degut a l'immens nombre de possibles posicions atòmiques mútues a les nanopartícules. Proposem un mètode innovador per determinar acuradament el COR fent servir només uns quants resultats de càlculs del funcional de la densitat. Aquest mètode revela immediatament per què un cert COR és preferit. Desentramem el COR i la natura de l'enllaç en nanopartícules de $\text{Pd}_{70}\text{Au}_{70}$, $\text{Pd}_{70}\text{Ag}_{70}$, $\text{Pd}_{70}\text{Cu}_{70}$ i $\text{Pd}_{70}\text{Zn}_{70}$. El poder d'aquest mètode s'il·lustra també optimitzant el COR en partícules de $\text{Pd}_{732}\text{Au}_{731}$, $\text{Pd}_{732}\text{Ag}_{731}$, $\text{Pd}_{732}\text{Cu}_{731}$ i $\text{Pd}_{732}\text{Zn}_{731}$ més grans, la mida de les quals ~ 4.4 nm és comuna en aplicacions catalítiques.

Links between the crystal and electronic structure in the new family of unconventional superconductors $A_2Cr_3As_3$ ($A = K, Rb, Cs$)

P. Alemany, E. Canadell

Inorg. Chem. 54 (2015) 8029.



Estructura d'una cadena $[Cr_3As_3]$ - (esquerra) i superfície de Fermi (dreta) del nou superconductor de baixa dimensionalitat $K_2Cr_3As_3$.

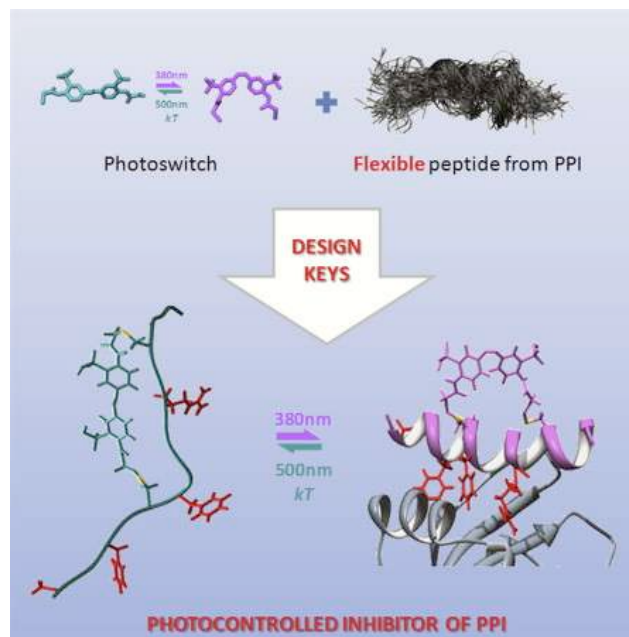
En aquest treball s'estudia l'estructura electrònica d'una nova família de superconductors mitjançant càlculs basats en la teoria del funcional de la densitat. En contrast amb altres superconductors quasi-1D, aquestes fases presenten una estructura electrònica relativament complexa i la superfície de Fermi presenta tant components 1D com 3D. L'estudi mostra que els cations no tenen cap influència remarcable en l'estructura electrònica. En el treball es discuteixen també els motius per els quals no s'observa una modulació estructural de tipus Peierls per a aquesta fase, remarcant les diferències amb els superconductors $M_2Mo_6Se_6$ ($M = Tl, In, \dots$) amb estructures cristal·lines molt semblants. La gran renormalització de la massa electrònica i la manca de correlació entre la densitat electrònica al nivell de Fermi, $N(e_F)$, i la temperatura crítica de superconductivitat, T_c , suggereixen la presència de correlacions electròniques fortes i un origen no convencional de la superconductivitat.

LÍNIA 3. BIOQUÍMICA COMPUTACIONAL I *SOFT MATTER*

Absence of a Stable Secondary Structure Is Not a Limitation for Photoswitchable Inhibitors of β Arrestin/ β Adaptin 2 ProteinProtein Interaction

A. Martín-Quirós, L. Nevola, K. Eckelt, S. Madurga, P. Gorostiza, E. Giralt.

Chemistry & Biology, 22 (2015) 31.



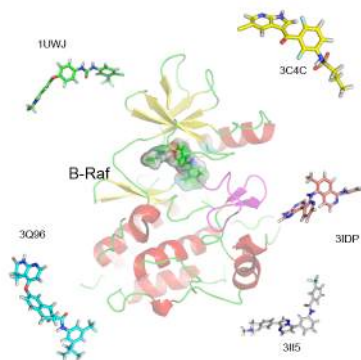
Diseny d'un inhibidor flexible fotoregulat.

Moltes interaccions proteïna-proteïna estan mediatas per pèptids curts i freqüentment helicoïdals. Recentment, s'han desenvolupat moduladors de l'endocitosi mediada per clatrina amb pèptids fotoregulats amb poca estructura secundària. En aquest estudi, s'analitza de forma sistemàtica una sèrie de pèptids entrecreuat amb derivats d'azobenzè per investigar el paper de l'estructura secundària en la interacció amb β -adaptina 2 i per tal d'identificar els possibles inhibidors fotoregulats. Observem que els pèptids flexibles tenen una gran capacitat inhibidòria i una millorada capacitat fotoreguladora. L'absència d'estructura no és cap limitant de la seva potència. Per tant, aquests inhibidors expandeixen el camp d'inhibidors de superfícies proteiques al grup de pèptids flexibles, i argumentem que l'estructura secundària rígida no ha de ser l'únic criteri pel disseny d'inhibidors peptídics de superfícies proteiques.

Insight into the Binding of DFG-out Allosteric Inhibitors to B-Raf Kinase Using Molecular Dynamics and Free Energy Calculations

L. Coronel, JM, Granadino-Roldán, M. Pinto, MS. Tomas, MD. Pujol, J. Rubio-Martinez.

Current Computer-Aided Drug Design. 11 (2015) 124.



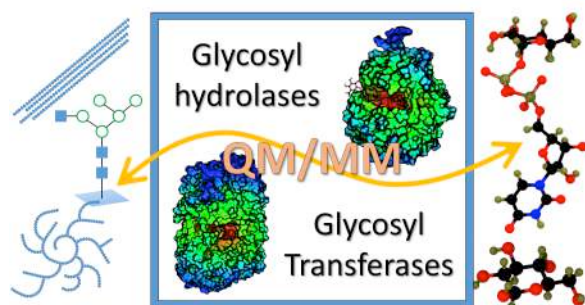
Interacció de B-Raf amb alguns inhibidors

En aquest treball, s'ha estudiat l'energètica i les claus estructurals de la unió de cinc inhibidors de la proteïna oncogènica ^{V600E}B-Raf en la seva conformació DFG-out utilitzant MD i càlculs d'energia lliure. Els resultats obtinguts mostren que l'energia lliure d'unió d'aquests complexos és la contribució individual de molts residus distribuïts per tot el lloc d'unió de la proteïna..

Reaction mechanisms in carbohydrate-active enzymes: glycoside hydrolases and glycosyltransferases. Insights from *ab initio* QM/MM dynamic simulations

A. Ardèvol, C. Rovira

J. Am. Chem. Soc., 137 (2015) 7528 (Perspective). Editor's choice & JACS Spotlight.

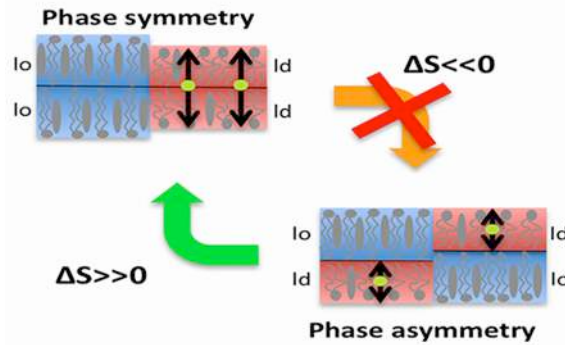


Els carbohidrats són macromolècules que juguen un paper crucial en la bioquímica i la biologia molecular, principalment pel que fa a la comunicació intercel·lular. Els enzims que faciliten la formació, degradació i modificació d'aquests sucres constitueixen atractives dianes en el desenvolupament de nous fàrmacs, alhora que tenen importants aplicacions en la biotecnologia industrial. Tanmateix, els carbohidrats són estructures molt flexibles i complexes, difícils de sintetitzar, per la qual cosa estudiar la seva química és moltes vegades un repte. En aquesta Perspectiva, revisem els avenços en aquest camp que s'han fet en la darrera dècada mitjançant tècniques de mecànica quàntica/mecànica molecular (QM/MM), especialment pel que fa a mecanismes enzimàtics i canvis conformacionals, en dos tipus importants d'enzims actius en carbohidrats: les glicosil hidrolases i les glicosiltransferases. Els dos tipus d'enzims catalitzen la hidròlisi i síntesi, respectivament, dels enllaços glicosídics en els carbohidrats. Els resultats d'elles simulacions QM/MM han ajudat a desxifrar els principals mecanismes d'acció d'aquests importants enzims.

Chloroform alters interleaflet coupling in lipid bilayers: an entropic mechanism

R. Reigada, F. Sagués.

J. R. Soc. Interface, 12 (2015) 20150197.



Il·lustració del mecanisme entròpic de connexió que explica l'efecte d'acoblament entre les capes de la bicapa degut al cloroform (verd) en membranes subjectes a segregació de fases lipídiques. Es mostren esquemàticament els lípids de doble cua i els colesterol (gris), i es dibuixa en vermell els dominis ordenats i en blau els desordenats.

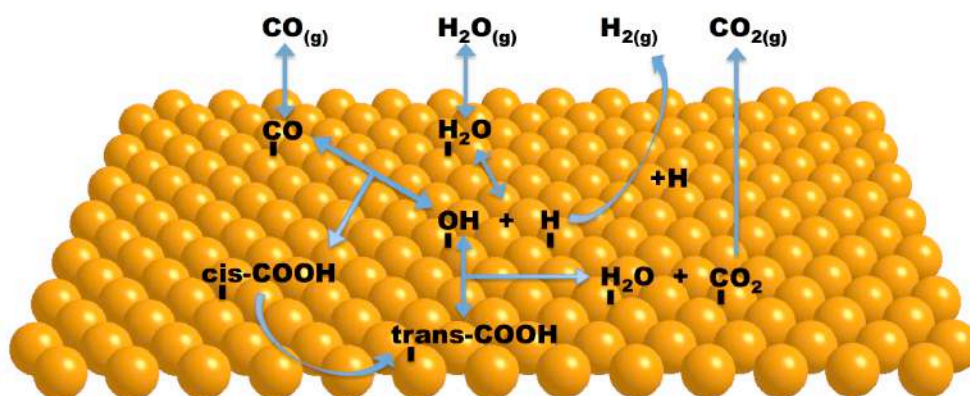
El mecanisme molecular que dona lloc a l'anestèsia general es encara desconegut. Algunes propostes suggereixen que l'agent anestèsic modifica l'estat fàsic de la membrana cel·lular. Mitjançant simulacions de dinàmica molecular hem descobert que el compost cloroform incrementa la interacció entre les capes d'una bicapa lipídica i promou simetria de fases entre elles. Aquest efecte es degut a un mecanisme entròpic que impedeix el confinament del cloroform en una de les dues capes de la membrana. L'efecte reportat i les seves conseqüències en la distribució de lípids a través de la membrana, bescanvi de colesterol, curvatura d'ela membrana i les seves propietats mecàniques són d'interès per tal de conèixer els efectes del cloroform en les funcions cel·lulars i el seu efecte anestèsic.

LÍNIA 4. REACTIVITAT I DINÀMICA DE REACCIONS

Kinetic Monte Carlo simulations of the water gas shift reaction on Cu(111) from density functional theory based calculations

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

Journal of Catalysis (2015) (In press)

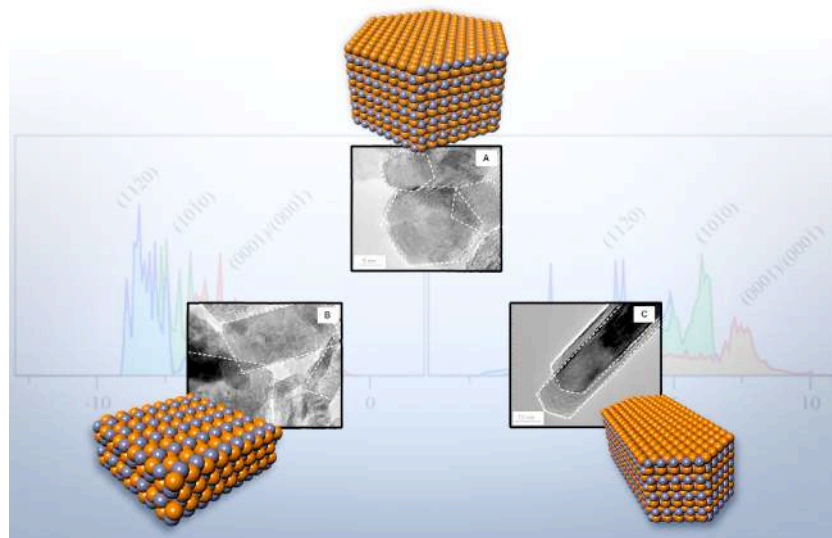


S'ha realitzat un estudi sistemàtic cinètic Monte Carlo des de primers principis de la reacció *water gas shift* sobre la superfície (111) de Cu, incloent adsorció/desorció, difusió i altres reaccions químiques elementals, amb un total de 34 passos elementals amb totes les velocitats de reacció obtingudes a partir de càlculs periòdics mitjançant la teoria del funcional de la densitat. Les simulacions cinètiques de Monte Carlo es van dur a terme a diferents pressions parcials i temperatures. Els resultats mostren que els processos de difusió no són negligibles i que la reacció procedeix predominantment mitjançant un mecanisme associatiu a través d'un intermedi carboxil. L'anàlisi de la dependència amb la temperatura mostra un comportament Arrhenià amb una energia d'activació aparent de 0.5 – 0.8 eV, d'acord amb els experiments i estudis microcinètics anteriors. L'efecte de la relació d' $\text{H}_2\text{O}/\text{CO}$ en aquesta reacció mostra que les barreges amb major proporció de CO potencien la reactivitat, també d'acord amb els estudis anteriors. El present treball permet esbrinar la importància relativa dels diferents passos en el mecanisme de la reacció *water gas shift* sobre Cu (111) en diverses condicions, així com veure l'evolució del recobriment de la superfície.

Morphology Effects in Photoactive ZnO Nanostructures: Photooxidative Activity of Polar Surfaces.

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

J. Mater. Chem. A 3 (2015) 8782.

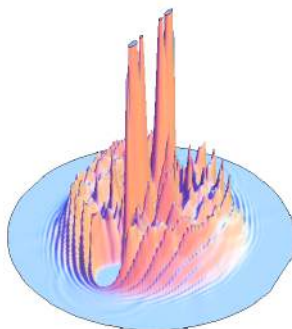


S'han preparat nanoestructures de ZnO per microemulsió i s'han investigat les seves propietats estructurals, morfològiques i electròniques mitjançant càlculs i experiments emprant microscòpia (difracció de raigs X, Raman, UV-visible) junt amb càlculs dins de la teoria del funcional de la densitat. Els resultats proporcionen detalls de la relació entre les propietats fisicoquímiques relacionades amb les superfícies exposades i la resposta fotoquímica de les nanoestructures de ZnO, com ara que la activitat fotoquímica de les nanoestructures de ZnO es relaciona amb la dominància de superfícies (polars) altament actives, en particular, amb la quantitat de superfície (0001) acabada en Zn, i no amb el espai entre bandes, les mobilitats de transportadors de càrrega, o altres variables típicament mencionades a la literatura. Els resultats computacionals destaquen la capacitat oxidativa de les superfícies polars, independentment del grau de hidratació.

Photodissociation dynamics of homonuclear diatomic molecules in helium nanodroplets. The case of $\text{Cl}_2@(^4\text{He})_N$.

A. Vilà, M. González, R. Mayol.

J. Chem. Theory Comput., 11 (2015) 899.



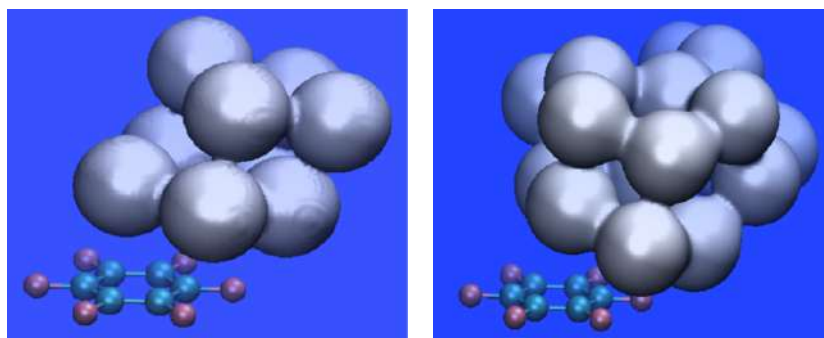
Instantània que mostra la densitat d'heli (pla xz) prop del final del procés de fotodissociació de $[\text{Cl}_2(\text{B})@(^4\text{He})_{500}]^*$.

S'ha desenvolupat un mètode híbrid basat en TDDFT (heli) i dinàmica quàntica (molècula) per investigar la fotodissociació de molècules diatòmiques homonuclears en nanogotes d'heli (^4He) superfluid (ND), $T=0.37$ K, que ha permès estudiar aquests processos per primera vegada. A la primera aplicació s'ha considerat la fotodissociació $\text{Cl}_2(\text{B} \leftarrow \text{X})$ per nanogotes $\text{Cl}_2(v=0, \text{X})@(^4\text{He})_N$ amb $N=50-500$. S'ha obtingut una escala de temps d'uns pocs ps i a les altes velocitats implicades té lloc un eficient intercanvi d'energia entre els àtoms de Cl i la ND, alliberant fins al 91% de l'energia molecular ($N=500$). A més, la distribució de velocitat final dels àtoms de Cl és fortament oscil·lant i s'ha determinat que és deguda a l'existència d'interferències quàntiques de confinament. Pel que sabem aquesta és la primera vegada que aquest tipus d'interferències es descriu en dinàmica de reaccions. Esperem que aquests resultats animin els experimentadors a explorar aquests sistemes tan interessants.

A molecular dynamics study of the evolution from the formation of the $C_6F_6-(H_2O)_n$ small aggregates to the C_6F_6 solvation

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

Theor. Chem. Acc., 134 (2015) 61.



Isosuperfície (valor de 0.5) de la densitat de probabilitat de l' H_2O en els agregats $C_6F_6-(H_2O)_9$ (a l'esquerra) and the $C_6F_6-(H_2O)_{18}$ (a la dreta). Els resultats provenen de simulacions de Dinàmica Molecular a la temperatura de 20 K.

En aquest estudi s'ha investigat, mitjançant simulacions de Dinàmica Molecular, l'evolució que va de la formació de petits clústers a la solvatació de l'hexafluorobenzè. Amb aquest objectiu, hem formulat la contribució a la interacció deguda als efectes no permanents de la distribució de càrregues per mitja de funcions de Lennard-Jones millorades (ILJ) que s'han combinat amb l'energia electrostàtica, calculada d'acord amb el moment quadrupol i dipolar elèctrics permanents de C_6F_6 i H_2O , respectivament. S'ha fet un test de la funció d'energia potencial duent a terme càlculs ab initio, a nivell CCSD(T)/aug-cc-pVTZ i corregint els valors de l'energia deguts a la superposició de base (BSSE), per a tres apropaments diferents de la molècula d' H_2O a la de C_6F_6 . Amb el potencial d'interacció construït s'han estudiat les energies i geometries d'alguns petits agregats, $C_6F_6-(H_2O)_n$ ($n = 1-6$), la formació de la primera esfera de solvatació, $C_6F_6-(H_2O)_n$ ($n = 9-36$), i la solvatació de C_6F_6 amb 400 molècules d' H_2O . Tant els petits agregats com la primera esfera de solvatació s'han simulat considerant el col·lectiu microcanònic, NVE, mentre que per a la solvatació de C_6F_6 s'ha considerat un col·lectiu isotèrmic i isobàric (NpT). Per tal d'aproximar el sistema format per una molècula de C_6F_6 i 400 molècules d' H_2O a un sistema més gran (infinit), s'han imposat condicions de contorn. S'ha trobat que la primera esfera de solvatació només es forma completament quan el número de molècules d' H_2O que rodeja a C_6F_6 excedeix al número necessari per formar-la. Aquest fet evidencia la gran competència existent entre les interaccions $C_6F_6-H_2O$ i H_2O-H_2O .

III.2 LLISTA DE PUBLICACIONS

ARTICLES PUBLICATS

1. *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 exist?*
J. A. Martínez-González, M. González, L. Masgrau, R. Martínez
ACS Catal. 5 (2015) 246.
2. *A single glycosidase harnesses different pyranoside ring transition state conformations for hydrolysis of mannosides and glucosides.*
A. Tankrathok, J. Iglesias-Fernández, R. J. Williams, S. Pengthaisong, S. Baiya, Z. Hakki, R. C. Robinson, M. Hrmova, C. Rovira, S. J. Williams, J. R. Ketudat Cairns.
ACS Catal. 5 (2015) 6041.
3. *Structural Analysis of the Coordination of Dinitrogen to Transition Metal Complexes*
B. Peigné, G. Aullón.
Acta Cryst., Sect. B 71 (2015) 369.
4. *Assessment of Functionals for First-Principle Studies of the Structural and Electronic Properties of δ -Bi₂O₃.*
D. H. Galván, R. Núñez-González, R. Rangel, P. Alemany, A. Posada-Amarillas
Adv. Cond. Matter Phys. (2015), 120294.
5. *Tuning Crystal Ordering, Electronic Structure, and Morphology in Organic Semiconductors: Tetrathiafulvalenes as a Model Case*
R. Pfattner, S. T. Bromley, C. Rovira, and M. Mas-Torrent.
Adv. Funct. Mat. Accepted. DOI:10.1002/adfm.201502446.
6. *Evidence for a boat conformation at the transition state of GH76 α -1,6-mannanases; key enzymes in bacterial and fungal mannoprotein metabolism.*
A. J. Thompson, G. Speciale, J. Iglesias-Fernández, Z. Hakki, T. Belz, A. Cartmell, R. J. Spears, E. Chandler, J. Stepper, H. J. Gilbert, C. Rovira, S. J. Williams, G. J. Davies.
Angew. Chem. Int. Ed. 54 (2015) 5378.
7. *Ruthenium-catalyzed O- to S-alkyl migration: A pseudoreversible Barton-McCombie pathway.*
W. Mahy, P. Plucinski, J. Jover, C. G. Frost.
Angew. Chem. Int. Ed. 54 (2015) 10944.
8. *Force-induced Reversal of β -Eliminations: Stressed Disulfide Bonds in Alkaline Solution.*
P. Dopieralski, J. Ribas-Arino, P. Anjukandi, M. Krupicka, D. Marx.
Angew. Chem. Int. Ed. Accepted. DOI: 10.1002/anie.201508005
9. *Dust in brown dwarfs and extra-solar planets. IV. Assessing TiO₂ and SiO nucleation for cloud formation modelling*
G. Lee, Ch. Helling, H. Giles, S. T. Bromley
Astronomy & Astrophysics 575, (2015) A11.

10. *Transition Metal Adatoms on Graphene: A Systematic Density Functional Study.*
M. Manadé, F. Viñes, F. Illas.
Carbon 95 (2015) 525.
11. *First-principles study of structural, elastic and electronic properties of α -, β - and γ -graphyne*
A. Ruiz-Puigdollers, G. Alonso, P. Gamallo
Carbon 96 (2016) 879.
12. *Role of Structural Symmetry Breaking in the Structurally Induced Robust Superlubricity of Graphene and h-BN Homo- and Hetero-Junctions.*
N. Ansari, F. Nazari, F. Illas
Carbon 96 (2016) 911.
13. *Absence of a Stable Secondary Structure Is Not a Limitation for Photoswitchable Inhibitors of β Arrestin/ β Adaptin 2 Protein-Protein Interaction.*
A. Martín-Quirós, L. Nevola, K. Eckelt, S. Madurga, P. Gorostiza, E. Giralt.
Chemistry & Biology 22 (2015) 31
14. *Electronic-Structure-Based Material Descriptors: (In)Dependence on Self-Interaction and Hartree-Fock Exchange.*
A. Notario-Estévez, S.M. Kozlov, F. Viñes, F. Illas.
Chem. Commun. 51 (2015) 5602.
15. *First evidence of light- induced spin transition in molybdenum(IV).*
N. Bridonneau, J. Long, J.-L. Cantin, J. von Bardeleben, S. Pillet, E.-E. Bendeif, D. Aravena, E. Ruiz, V. Marvaud.
Chem. Commun. 51 (2015) 8229.
16. *Increasing the effective energy barrier promoted by the change of a counteranion in a Zn-Dy-Zn SMM: slow relaxation via the second excited state.*
I. Oyarzabal, J. Ruiz, E. Ruiz, D. Aravena, J. M. Seco, E. Colacio.
Chem. Commun. 51 (2015) 12353.
17. *Modulation of single-molecule magnet behaviour via photochemical 2+2 cycloaddition.*
L.-F. Wang, J.-Z. Qiu, J.-L. Liu, Y.-C. Chen, J.-H. Jia, J. Jover, E. Ruiz, M.-L. Tong
Chem. Commun. 51 (2015) 15358.
18. *Towards the tailored design of benzotriazinyl-based organic radicals displaying a spin transition.*
M. Fumanal, S. Vela, J.J. Novoa, J. Ribas-Arino
Chem. Commun. 51 (2015) 15776.
19. *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. 619 (2015) 97.

20. *Experimental and Computational Studies of the Molybdenum-Flanking Arene Interaction in Quadruply Bonded Dimolybdenum Complexes with Terphenyl Ligands.*
M. Carrasco, I. Mendoza, E. Alvarez, C. Maya, R. Peloso, A. Rodríguez, A. Falceto, S. Alvarez, E. Carmona.
Chem. Eur. J. 21 (2015) 410.
21. *Oriental Preference of Long, Multicenter Bonds in Radical Anion Dimers: A Case Study of π -[TCNB](2)(2-) and π -[TCNP](2)(2-)*
M. Capdevila-Cortada, J.S. Miller, J.J. Novoa.
Chem. Eur. J. 21 (2015) 6420.
22. *Amending the Anisotropy Barrier and Luminescence Behavior of Heterometallic Trinuclear Linear [MII- LnIII- MII] (LnIII = Gd, Tb, Dy; MII = Mg /Zn) Complexes by Change from Divalent Paramagnetic to Diamagnetic Metal Ions.*
S. Das, K. S. Bejoymohandas, A. Dey, S. Biswas, M. L. P. Reddy, R. Morales, E. Ruiz, S. Titos-Padilla, E. Colacio, V. Chandrasekhar.
Chem. Eur. J. 21 (2015) 6449.
23. *Negatively Charged Metallacarborane Redox Couples with Both Members Stable to Air.*
M. Lupu, A. Zaulet, F. Teixidor, E. Ruiz, C. Viñas.
Chem. Eur. J. 21 (2015) 6888.
24. *A New Conformation With an Extraordinarily Long, 3.04 angstrom Two-Electron, Six-Center Bond Observed for the $-\text{[TCNE]}(2)(2-)$ Dimer in $[\text{NMe}_4](2)[\text{TCNE}](2)$ (TCNE=Tetracyanoethylene).*
A.G. Graham, F. Mota, E. Shurdha, A.L. Rheingold, J.J. Novoa, J.S. Miller.
Chem. Eur. J. 21 (2015) 13240.
25. *Exploring the stereodynamics and microscopic mechanism of the $\text{O}(^3\text{P}) + \text{CH}_4, \text{CD}_4 \rightarrow \text{OH} + \text{CH}_3, \text{OD} + \text{CD}_3$ combustion reactions.*
R. Martínez, P. A. Enríquez, M. P. Puyuelo, M. González
Chem. Phys. 461 (2015) 98.
26. *Study by crossed beams and ab initio techniques of an environmentally interesting process: gas-phase high energy collisions between $\text{N}_2\text{O}(^1\Sigma^+)$ and $\text{Li}^+(^1\text{S}_0)$.*
J. de Andrés, J. M. Lucas, M. Albertí, J. M. Bofill, A. Aguilar.
Chem. Phys. 462 (2015) 104.
27. *Six dimensional propagation of the H_2 molecule confined in a Single-walled Carbon Nanotube.*
M. Mondelo-Martell, F. Huarte-Larrañaga.
Chem. Phys. (2015) (DOI: 10.1016/j.chemphys.2015.07.029)
28. *Exploring the Electronic Structure of an Organic Semiconductor Based on a Compactly Fused Electron Donor-Acceptor Molecule.*
P. Alemany, E. Canadell, Y. Geng, J. Hauser, P. Macchi, K.Krämer, S. Decurtins, S.-X. Liu.
ChemPhysChem 16 (2015) 1361.

29. *Distortion Pathways of Transition Metal Coordination Polyhedra Induced by Chelating Topology.*
S. Alvarez.
Chem. Rev. published ASAP (2015), doi: 10.1021/acs.chemrev.5b00537
30. *New coordination features: a bridging pyridine and the forced shortest non-covalent distance between two CO₃²⁻ species*
V. Velasco, D. Aguilà, L. A. Barrios, I. Borilovic, O. Roubeau, J. Ribas-Arino, M. Fumanal, S.J. Teat, G. Aromi.
Chem. Sci. 6 (2015) 123.
31. *The complete conformational free energy landscape of β -xylose reveals a two-fold catalytic itinerary for β -xylanases.*
J. Iglesias-Fernández, L. Raich, A. Ardèvol, C. Rovira.
Chem. Sci. 6 (2015) 1167.
32. *Dynamical effects on the magnetic properties of dithiazolyl bistable materials.*
S. Vela, M. Deumal, M. Shiga, J.J. Novoa, J. Ribas-Arino
Chem. Sci. 6 (2015) 2371.
33. *How to determine accurate chemical ordering in several nanometer large bimetallic crystallites from electronic structure calculations.*
S.M. Kozlov, G. Kovács, R. Ferrando, K.M. Neyman.
Chem. Sci. 6 (2015) 3868.
34. *What do we mean when we talk about bonds.*
S. Alvarez.
Chemistry World 12 (2015) 36.
35. *Spin-state Behaviour of Iron(II)Dipyrazolylpyridine Complexes. New Insights from Crystallographic and Solution Measurements.*
L. J. K. Cook, R. Mohammed, G. Sherborne, S. Alvarez, M. Halcrow.
Coord. Chem. Rev. 289-290 (2015) 2.
36. *Large magnetic anisotropy in mononuclear metal complexes.*
S. Gómez-Coca, D. Aravena, R. Morales, E. Ruiz.
Coord. Chem. Rev. 289-290 (2015) 379.
37. *The nature of the C-Br ... Br-C intermolecular interactions found in molecular crystals: a general theoretical-database study.*
M. Capdevila-Cortada, J.J. Novoa.
CrystEngComm 17 (2015) 3354.
38. *Insight into the Binding of DFG-out Allosteric Inhibitors to B-Raf Kinase Using Molecular Dynamics and Free Energy Calculations.*
L. Coronel, JM, Granadino-Roldán, M. Pinto, MS. Tomas, MD. Pujol, J. Rubio-Martinez
Current Computer-Aided Drug Design. 11 (2015) 124.

39. *The origin of the antiferromagnetic behaviour of the charge-transfer compound (HMTTF)[Ni(mnt)(2)].*
S. Vela, M. Fumanal, M. Deumal.
Dalton Trans. 44 (2015) 608.
40. *A trinuclear Cu^{II} complex with functionalized s-heptazine N-ligands: molecular chemistry from a g-C₃N₄ fragment.*
L. Maxwell, S. Gomez-Coca, T. Weyhermueller, D. Panyella, E. Ruiz.
Dalton Trans. 44 (2015) 15761.
41. *Neodymium 1D systems: targeting new sources for field-induced slow magnetization relaxation.*
A. K. Jassal, N. Aliaga-Alcalde, M. Corbella, D. Aravena, E. Ruiz, G. Hundal.
Dalton Trans. 44 (2015) 15774.
42. *Higher Fluorescence in Platinum(IV) Orthometallated Complexes of Perylene Imine Compared with their Platinum(II) or Palladium(II) Analogues.*
J. E. Expósito, M. Alvarez-Paino, G. Aullón, J. A. Miguel, P. Espinet.
Dalton Trans. 44 (2015) 16164.
43. *A Combined Kinetic-mechanistic and Computational Study on the Competitive Formation of Seven- versus Five-membered Platinacycles; the Relevance of Spectator Halide Ligands.*
G. Aullón, M. Crespo, M. Font-Bardía, J. Jover, M. Martínez, J. Pike.
Dalton Trans. 44 (2015) 17968.
44. *Different topologies in three manganese-μ-azido 1D compounds: magnetic behavior and DFT-quantum Monte Carlo calculations.*
F. A. Mautner, C. Berger, M. Scherzer, R. C. Fischer, L. Maxwell, E. Ruiz, R. Vicente
Dalton Trans. 44 (2015) 18632.
45. *On the Mechanism of Phenolic Formylation Mediated by TiCl₄ Complexes: Existence of Diradical Intermediates Induced by Valence Tautomerism.*
C. Heras, I. Ramos-Tornillero, M. Caballero, M. Paradis-Bas, E. Nicolás, F. Albericio, I.D.R. Moreira, J.M. Bofill.
Eur. J. Org. Chem. 10 (2015) 2111.
46. *Computational studies of glycoside, carboxylic ester, and thioester hydrolases mechanisms. A review.*
C. Rovira, P. Reilly.
Ind. Eng. Chem. Res. 54 (2015) 10138.
47. *Electrocatalytic Proton Reduction by Dimeric Nickel Complex of a Sterically Demanding Pincer-type NS₂ Aminobis(thiophenolate) Ligand.*
A. Mondragón, M. Flores-Alamo, P. R. Martínez-Alanis, G. Aullón, V. M. Ugalde-Saldívar, I. Castillo.
Inorg. Chem. 54 (2015) 619.

48. *Electronic Structure and Magnetic Properties of CuFeS₂*.
S. Conejeros, P. Alemany, M. Lluell, I.D.R. Moreira, V. Sánchez, J. Llanos.
Inorg. Chem. 54 (2015) 4840.
49. *Substituent Effects in N-(thioether)-Functionalized Bis(Diphenylphosphino)amine-type Ligands on the Coordination Sphere of Iron(II) Complexes: Structures, Magnetism and Bonding*.
C. Fliedel, V. Rosa, A. Falceto, P. Rosa, S. Alvarez, P. Braunstein.
Inorg. Chem. 54 (2015) 6547.
50. *Links between the crystal and electronic structure in the new family of unconventional superconductors A₂Cr₃As₃ (A = K, Rb, Cs)*.
P. Alemany, E. Canadell
Inorg. Chem. 54 (2015) 8029.
51. *Cr-Cr Quintuple Bonding: Ligand Topology and Interplay Between Metal-Metal and Metal-Ligand Bonding*.
A. Falceto, K. H. Theopold, S. Alvarez.
Inorg. Chem. 54 (2015) 10966. Open Access.
52. *Embedding of the Saddle Point of Index two on the PES of the Ring Opening of Cyclobutene*.
W. Quapp, J. M. Bofill.
Int. J. Quantum Chem. 115 (2015) 1635
53. *Reaction mechanisms in carbohydrate-active enzymes: glycosyl hydrolases and glycosyltransferases. Insights from ab initio QM/MM molecular dynamics simulations*.
A. Ardèvol, C. Rovira.
J. Am. Chem. Soc. 137 (2015) 7528. Editor's choice & JACS Spotlight.
54. *Discovery of the K-4 Structure Formed by a Triangular π Radial Anion*.
A. Mizuno, Y. Shuku, P. Suizu, M.M. Matsushita, M. Tsuchiizu, D.R. Mañeru, F. Illas, V. Robert, K. Awaga.
J. Am. Chem. Soc. 137 (2015) 7612.
55. *The molecular mechanism of the catalase-like activity of horseradish peroxidase*.
P. Campomanes, U. Rothlisberger, M- Alfonso-Prieto, C. Rovira.
J. Am. Chem. Soc. 137 (2015) 11170.
56. *Unravelling the Key Driving Forces of the Spin Transition in π -Dimers of Spiro-biphenalenyl-Based Radicals*
M. Fumanal, F. Mota, J.J. Novoa, J. Ribas-Arino
J. Am. Chem. Soc. 137 (2015) 12843.
57. *Kinetic Monte Carlo simulations of the water gas shift reaction on Cu(111) from density functional theory based calculations*
H.Prats, L. Álvarez, F. Illas, R.Sayós
J. Catal. (2015) In press.

58. *Effect of Hartree-Fock Exact Exchange on Intramolecular Magnetic Coupling Constants of Organic Diradicals.*
D. Cho, K.C. Ko, Y. Ikabata, K. Wakayama, T. Yoshikawa, H. Nakai, J.Y. Lee.
J. Chem. Phys. 143 (2015) 024318.
59. *5D quantum dynamics of the H₂@SWNT system: Quantitative study of the rotational-translational coupling.*
M. Mondelo-Martell, F. Huarte-Larrañaga.
J. Chem. Phys. 142 (2015) 084304.
60. *Structure and Electronic Properties of Cu Nanoclusters on Mo₂C(001) and MoC(001) Surfaces.*
S. Posada-Pérez, F. Viñes, J.A. Rodríguez, F. Illas.
J. Chem. Phys. 143 (2015) 114704.
61. *Prediction of Core Level Binding Energies in Density Functional Theory: Rigorous Definition of Initial and Final State Contributions and Implications on the Physical Meaning of Kohn-Sham Energies.*
N. Pueyo-Bellafont, P.S. Bagus, F. Illas.
J. Chem. Phys. 142 (2015) 214102.
62. *Comment to: "Exploring the potential energy landscape of the Thomson problem via Newton homotopies" by D. Mehta et al., J. Chem. Phys. 142, 194113 (2015).*
J. M. Bofill
J. Chem. Phys. (2015) (accepted).
63. *Photodissociation dynamics of homonuclear diatomic molecules in helium nanodroplets. The case of Cl₂@(⁴He)_N.*
A. Vilà, M. González, R. Mayol
J. Chem. Theory Comput. 11 (2015) 899.
64. *Spin Adapted versus Broken Symmetry Approaches in the Description of Magnetic Coupling in Heterodinuclear Complexes.*
R. Costa, R. Valero, D.R. Mañeru, I.D.R. Moreira, F. Illas.
J. Chem. Theo. Comput. 11 (2015) 1006.
65. *Electronic Excitation Energies in Dimers between Radical Ions Presenting Long, Multicenter Bonding.*
M. Fumanal, M. Capdevila-Cortada, J. Ribas-Arino, J.J. Novoa
J. Chem. Theory Comput. 11 (2015) 2651.
66. *Handling Magnetic Coupling in Trinuclear Cu(II) Complexes.*
D.R. Mañeru, R. Costa, M.G. Márquez, I.D.R. Moreira, F. Illas.
J. Chem. Theo. Comput. 11 (2015) 3650.
67. *Evaluating Transition State Structures of vanadium-phosphatase protein complexes using shape analysis*
I. Sánchez-Lombardo, S. Alvarez, C. C. McLauchlan, D. C. Crans.
J. Inorg. Biochem. 147 4 (2015) 153-164, doi:10.1016/j.jinorgbio.2015.04.005

68. *Some remarks on the Model of the Extended Gentlest Ascent Dynamics.*
J. M. Bofill, W. Quapp, E. Bernuz.
J. Math. Chem. 53 (2015) 41.
69. *Morphology Effects in Photoactive ZnO Nanostructures: Photooxidative Activity of Polar Surfaces.*
A. Iglesias-Juez, F. Viñes, O. Lamiel-Garcia, M. Fernández-García, F. Illas.
J. Mater. Chem. A 3 (2015) 8782.
70. *Theoretical modeling of two-step spin-crossover transitions in Fe^{II} dinuclear systems.*
J. Cirera, E. Ruiz.
J. Mater. Chem. C, 3 (2015) 7954.
71. *Accurate analytic intermolecular potential for the simulation of Na⁺ and K⁺ ion hydration in liquid water*
N. Faginas-Lago, A. Lombardi, M. Albertí, G. Grossi
Journal of Molecular Liquids 204 (2015) 92.
72. *From the (NH₃)₂₋₅ clusters to liquid ammonia: Molecular dynamics simulations using the NVE and NpT ensembles*
M. Albertí, A. Amat, Ll. Farrera, F. Pirani
Journal of Molecular Liquids 212, (2015) 307.
73. *Quantum dynamics study of the H₂ molecule confined in Single-Walled Carbon Nanotubes.*
M. Mondelo-Martell, F. Huarte-Larrañaga.
Journal of Physics: Conference Series 635 (2015) 032057.
74. *Born-Oppenheimer and Renner-Teller Quantum Dynamics of CH(X²Π) + D(²S) reactions on three CHD potential surfaces*
P. Gamallo, S. Akpınar, P. Defazio, C. Petrongolo
J. Phys. Chem. A 119 (2015) 11254
75. *Mapping the Ultrafast Changes of Continuous Shape Measures in Photoexcited Spin Crossover Complexes without Long-Range Order*
S. Canton, X. Zhang, L. Lawson Daku, Y. Liu, J. Zhang, S. Alvarez.
J. Phys. Chem. C 119 (2015) 3322.
76. *Energetic stability of adsorbed H in Pd and Pt nanoparticles in a more realistic environment.*
S.M. Kozlov, H.A. Aleksandrov, K.M. Neyman.
J. Phys. Chem. C 119 (2015) 5180.
77. *Theoretical Study of the Stoichiometric and Reduced Ce-Doped TiO₂ Anatase (001) Surfaces.*
A.R. Albuquerque, A. Bruix, J.R. Sambrano, F. Illas.
J. Phys. Chem. C 119 (2015) 4805.

78. *Ferromagnetic Graphene Nanoribbons: Edge Termination with Organic Radicals.*
D. Cho, K.C. Ko, H. Park, J.Y. Lee.
J. Phys. Chem. C 119 (2015) 10109.
79. *O₂ dissociation on M@Pt core-shell particles for 3d, 4d and 5d transition metals.*
P.C. Jennings, H.A. Aleksandrov, K.M. Neyman, R.L. Johnston.
J. Phys. Chem. C 119 (2015) 11031.
80. *Synthesis and Characterization of Blue Faceted Anatase Nanoparticles through Extensive Fluorine Lattice Doping.*
D.G. Calatayud, T. Jardiel, M. Peiteado, F. Illas, E. Giamello, F.J. Palomares, D. Fernández-Hevia, A.C. Caballero.
J. Phys. Chem. C 119 (2015) 21243.
81. *Conditional Born-Oppenheimer Dynamics: Quantum Dynamics Simulations for the Model Prophine.*
G. Albareda, J.M. Bofill, I. Tavernelli, F. Huarte-Larrañaga, F. Illas, A. Rubio.
J. Phys. Chem. Lett. 6 (2015) 1529.
82. *How does the water solvent and glutathione ligands affect the structure and the electronic properties of Au₂₅(SR)₁₈⁻?*
V. Rojas-Cervellera, C. Rovira, J. Akola.
J. Phys. Chem. Lett. 6 (2015) 3859.
83. *The role of hydrogen bonds in the stabilization of silver-mediated cytosine tetramers.*
L. A. Espinosa Leal, A. Karpenko, S. Swasey, E. G. Gwinn, V. Rojas-Cervellera, C. Rovira, O. Lopez-Acevedo.
J. Phys. Chem. Lett. 6 (2015) 4061.
84. *Chloroform alters interleaflet coupling in lipid bilayers: an entropic mechanism.*
R. Reigada, F. Sagués.
J. R. Soc. Interface 12 (2015) 20150197.
85. *Ion-Water Cluster Molecular Dynamics Using a Semiempirical Intermolecular Potential*
N. Faginas-Lago, M. Albertí, A. Laganà, A. Lombardi
Lecture Notes on Computer Science 9156 (2015) 355.
86. *Formylation of Electron-Rich Aromatic Rings Mediated by Dichloromethyl Methyl Ether and TiCl₄: Scope and Limitations.*
I. Ramos-Tornillero, M. Paradis-Bas, I.D.R. Moreira, J.M. Bofill, E. Nicolás, F. Albericio.
Molecules 20 (2015) 5409.
87. *Kondo Effect in a Neutral and Stable All Organic Radical Single Molecule Break Junction*
R. Frisenda, R. Gaudenzi, C. Franco, M. Mas-Torrent, C. Rovira, J. Veciana, I. Alcon, S. T. Bromley, E. Burzurí, H. S. J. van der Zant
Nano Letters 15 (2015) 310.
88. *Reduced ceria nanofilms from structure prediction*
S. M. Kozlov, I. Demiroglu, K. M. Neyman, S. T. Bromley
Nanoscale 7 (2015) 4361.

89. *Reply to "Entropic factors also contribute to the high melting points of polyhedral alkanes".*
S. Shaik, S. Alvarez.
Nature Chem. 7 (2015) 87.
90. *Dynamic interplay between catalytic and lectin domains of GalNAc-transferases modulates protein O-glycosylation.*
E. Lira-Navarrete, M. de las Rivas, I. Compañón, M. C. Pallarés, Y. Kong, J. Iglesias-Fernández, G. J. L. Bernardes, J. M. Peregrina, C. Rovira, P. Bernadó, P. Bruscolini, H. Clausen, A. Lostao, F. Corzana, R. Hurtado-Guerrero.
Nat. Commun. 6 (2015) 6937.
91. *Privateer: a software for conformational validation of cyclic carbohydrate structures.*
J. Agirre, J. Iglesias-Fernández, C. Rovira, G. J. Davies, K. Wilson, K. Cowtan.
Nat. Struct. Mol. Biol. 22 (2015) 833.
92. *Macromolecular Crowding upon in-vivo-Like Enzyme-Kinetics: Effect of Enzyme-Obstacle Size Ratio.*
C. Balcells, I. Pastor, L. Pitulice, C. Hernández, M. Via, J.L. Garcés, S. Madurga, E. Vilaseca, A. Isvoran, M. Cascante, F. Mas.
New Front. Chem. 24 (2015) 3.
93. *Assembling Nonplanar Polyaromatic Units by Click Chemistry. Study of Multicorannulene Systems as Host for Fullerenes.*
C. M. Alvarez, G. Aullón, H. Barbero, L. A. García-Escudero, C. Martínez-Pérez, J. M. Martín-Alvarez, D. Miguel.
Org. Lett. 17 (2015) 2578.
94. *Metal-charge density wave coexistence in TTF[Ni(dmit)₂]₂.*
W. Kaddour, P. Auban-Senzier, H. Raffy, M. Monteverde, J.-P. Pouget, C.R.Pasquier, P. Alemany, E. Canadell, L. Valade.
Physica B 460 (2015) 147.
95. *Reactivity of the Free and (5,5)-Carbon Nanotube-Supported AuPt Bimetallic Clusters towards O₂ Activation: A Theoretical Study.*
F. Shojael, M. Mousavi, F. Nazari, F. Illas.
Phys. Chem. Chem. Phys. 17 (2015) 3659.
96. *Validation of Koopmans' Theorem for Density Functional Theory Binding Energies.*
N. Pueyo-Bellafont, F. Illas, P.S. Bagus.
Phys. Chem. Chem. Phys. 17 (2015) 4015.
97. *A Molecular View of Cisplatin's Mode of Action: Interplay with DNA Bases and Acquired Resistance.*
M.P.M. Marques, D. Gianolio, G. Cibir, J. Tomkinson, S.F. Parker, R. Valero, R.P. Lopes, L.A.E.B. de Carvalho.
Phys. Chem. Chem. Phys. 17 (2015) 5155.

98. *Self-assembled trityl radical capsules – implications for dynamic nuclear polarization.*
I. Marin-Montesinos, J. C. Paniagua, M. Vilaseca, A. Urtizberea, F. Luis, M. Feliz, F. Lin, S. Van Doorslaerg and M. Pons.
Phys. Chem. Chem. Phys. 17 (2015) 5785.
99. *Trends in the adsorption and reactivity of hydrogen on magnesium silicate nanoclusters*
I. Oueslati B. Kerkeni, S. T. Bromley
Phys. Chem. Chem. Phys. 17 (2015) 8951.
100. *Theoretical Study of Electronic and Tribological Properties of H-BNC2/graphene, h-BNC2/h-BN and h-BNC2/h-BNC2 Bilayers.*
N. Ansari, F. Nazari, F. Illas.
Phys. Chem. Chem. Phys. 17 (2015) 12908.
101. *Structure and stability of reduced and oxidized mononuclear platinum species on nanostructured ceria from density functional modeling.*
H.A. Aleksandrov, K.M. Neyman, G.N. Vayssilov.
Phys. Chem. Chem. Phys. 17 (2015) 14551.
102. *Towards an accurate and computationally-efficient modelling of Fe(II)-based spin crossover materials.*
S. Vela, M. Fumanal, J. Ribas-Arino, V. Robert
Phys. Chem. Chem. Phys. 17 (2015) 16306.
103. *Donor-anion interactions at the charge localization and charge ordering transitions of (TMTTF)₂AsF₆ probed by NEXAFS.*
K. Medjanik, A. Chernenkaya, S. A. Nepijko, G. Öhrwall, P. Foury-Leylekian, P. Alemany, E. Canadell, G. Schönhense, J.-P. Pouget.
Phys. Chem. Chem. Phys. 17 (2015) 19202.
104. *Adsorption Properties of Trifluoroacetic on Anatase (101) and (001) Surfaces: A Density Functional Theory Study.*
O. Lamiel-Garcia, D. Fernández-Hevia, A.C. Caballero, F. Illas.
Phys. Chem. Chem. Phys. 17 (2015) 23627.
105. *Born-Oppenheimer and Renner-Teller coupled-channel quantum reaction Dynamics of O(³P) + H₂⁺(X₂SΣ_g⁺) collisions*
P. Gamallo, P. Defazio, M. González, C. Petrongolo, M. Paniagua
Phys. Chem. Chem. Phys. 17(2015) 23392
106. *Revealing chemical ordering in Pt-Co nanoparticles using electronic structure calculations and X-ray photoelectron spectroscopy.*
G. Kovács, S.M. Kozlov, I. Matolínová, M. Vorokhta, V. Matolín, K.M. Neyman.
Phys. Chem. Chem. Phys. 17 (2015) 28298.
107. *Quantum interferences in the photodissociation of Cl₂(B) in superfluid helium nanodroplets (⁴He)_N.*
A.Vilà, M. González, R. Mayol
Phys. Chem. Chem. Phys. 17 (2015) 32241.

108. *Quantum dynamics of the pick up process of atoms by superfluid helium nanodroplets. The Ne + (⁴He)₁₀₀₀ system.*
A. Vilà, M. González, R. Mayol
Phys. Chem. Chem. Phys. in press (DOI: 10.1039/C5CP04176G).
109. *Relaxation dynamics of helium nanodroplets after photodissociation of a dopant homonuclear diatomic molecule. The case of Cl₂@(⁴He)_N.*
A. Vilà, M. González, R. Mayol
Phys. Chem. Chem. Phys. in press (DOI: 10.1039/C5CP02679B).
110. *Equilibrium microphase separation in the two-leaflet model of lipid membranes.*
R. Reigada, A. S. Mikhailov.
Phys. Rev. E (accepted).
111. *Nanomechanics of Bidentate Thiolate Ligands on Gold Surfaces*
M. E. Zoloff-Michoff, J. Ribas-Arino, D. Marx
Phys. Rev. Lett. 114 (2015) 075501.
112. *Nickel(II) Complexes having Different Configurations controlled by N,N,O-donor Schiff-base Ligands in Presence of Isothiocyanate as Co-ligand: Synthesis, Structures, Comparative Biological Activity and DFT Study.*
J. Adhikary, P. Kundu, S. Dasgupta, S. Mukherjee, S. Chattopadhyay, G. Aullón, D. Das.
Polyhedron 101 (2015) 93.
113. *Binding ofazole drugs to heme: A combined MS/MS and computational approach.*
A. De Petris, M. E. Crestoni, A. Pirolli, C. Rovira, J. Iglesias-Fernández, B. Chiavarino, R. Ragno, S. Fornarini.
Polyhedron 90 (2015) 245.
114. *Methane Capture at Room Temperature: Adsorption on Cubic delta-MoC and Orthorhombic beta-Mo₂C Molybdenum Carbide (001) Surfaces.*
S. Posada-Pérez, J.R.D.S. Politi, F. Viñes, F. Illas.
RSC Adv. 5 (2015) 33737.
115. *Structural control over spin localization in triarylmethyls*
I. Alcon, S. T. Bromley
RSC Adv. 5 (2015) 98593.
116. *Intriguing Electrostatic Potential of CO: Negative Bond-Ends and Positive Bond-Cylindrical Surface.*
H. Kim, V.D. Doan, W.J. Cho, R. Valero, Z. Aliakbar Tehrani, J.M.L. Jenica, K.S. Kim.
Sci. Rep. 5 (2015) 16307.
117. *Design of a Structural Database for Homoleptic Transition Metal Complexes*
J. Fernández-Valparís, S. Alvarez.
Struct. Chem. 26 (2015) 1715.

118. *Surfaces are Different: A Perspective on Structural, Energetic, and Electronic Properties of (001) Surfaces of Alkaline Earth Metal Oxides as Calculated with Hybrid Density Functional Theory.*
 Andrew J. Logsdail, David Mora-Fonz, David O. Scanlon, C. Richard A. Catlow, Alexey A. Sokol.
Surf. Sci. 642 (2015) 66.
119. *Exploring the Activity of a Novel Au/TiC(001) Model Catalyst towards CO and CO₂ Hydrogenation.*
 G.G. Asara, J.M Ricart, J.A. Rodriguez, F. Illas.
Surf. Sci. 640 (2015) 141.
120. *On the Hydrogen Adsorption and Dissociation on Cu Surfaces and Nanorows.*
 L. Álvarez-Falcón, F. Viñes, A. Notario-Estévez, F. Illas.
Surf. Sci. (2015) Accepted.
121. *One-pot synthesis of 4-aminated pyrrolo[2,3-d]pyrimidines from alkynylpyrimidines under metal-catalyst-free conditions.*
 V. Prieur, N. Heindler J. Rubio-Martínez, G. Guillaumet, M. Dolors Pujol.
Tetrahedron 71 (2015) 1207.
122. *Triplet-Singlet Gap in Structurally Flexible Organic Diradicals.*
 D.R. Mañeru, I.P.R. Moreira, F. Illas.
Theor. Chem. Acc. 134 (2015) 18.
123. *A molecular dynamics study of the evolution from the formation of the C₆H₆-(H₂O)_n small aggregates to the C₆F₆ solvation*
 M. Albertí, A. Amat, A. Aguilar, F. Huarte-Larrañaga, J.M. Lucas and F. Pirani
Theor. Chem. Acc. 134 (2015) 61.
124. *The Variational Nature of the Gentlest Ascent Dynamics and the Relation of a Variational Minimum of a Curve and the Minimum Energy Path.*
 J. M. Bofill, W. Quapp.
Theor. Chem. Acc. (2015) (accepted).
125. *Fundamentals of Methanol Synthesis on Metal Carbide Based Catalysts: Activation of CO₂ and H₂.*
 S. Posada-Pérez, F. Viñes, J.A. Rodriguez, F. Illas.
Top. Catal. 58 (2015) 159.

CAPÍTOLS DE LLIBRES I PROCEEDINGS

1. *QM/MM calculations on selectivity in homogeneous catalysis*
J. Jover, F. Maseras.
Structure and Bonding, in press (2015), doi: 10.1007/430_2015_188
2. Comparison of the Cr-Cr quadruple and quintuple bonding mechanisms
A. Falceto, S. Alvarez.
Structure and Bonding, in press (2015), doi: 10.1007/430_2015_191
3. *Ab Initio Wavefunction Approaches to Spin States*
C. Sousa, C. de Graaf.
Spin States in Biochemistry and Inorganic Chemistry: Influence on Structure and Reactivity (Wiley)

III.3 ALTRES ACTIVITATS

TESIS DOCTORALS 2015

1. *A Study of Nanostructuring Effects on Model Heterogeneous Catalysts*
Sergey M. Kozlov
Facultat de Química, Universitat de Barcelona
Gener 2015
2. *Ab initio molecular dynamics study of thiolate-protected gold clusters and their interaction with biomolecules.*
Víctor Rojas Cervellera
Universitat Politècnica de Catalunya.
Juliol 2015
3. *Quantum dynamics of physicochemical processes in superfluid ⁴He nanodroplets.*
Arnau Vilà Casanovas
Facultat de Química, Universitat de Barcelona
Setembre 2015
4. *Radical-pair formation in organic π -stacked architectures*
Maria Fumanal Quintana
Facultat de Química, Universitat de Barcelona
Octubre 2015

MÀSTERS 2015

1. *Structure, elastic and electronic properties of pristine and doped graphyne. A DFT study.*
Antonio Ruiz Puigdollers
Facultat de Química, Universitat de Barcelona
Juliol 2015
2. *Theoretical study of the adsorption of N₂, O₂ and CO₂ in different faujasite structures.*
Gerard Alonso Benito
Facultat de Química, Universitat de Barcelona
Juliol 2015

3. *Kinetic Monte Carlo simulations of the water-gas shift reaction on copper catalysts from density functional theory based calculations*
Hèctor Prats Garcia
Facultat de Química, Universitat de Barcelona
Juliol 2015
4. *Optimització d'un camp de forces reactiu per l'adsorció de CO₂ sobre X-zeolita (X=Ca, Na).*
Núria Sambola Marcial
Facultat de Química, Universitat de Barcelona
Juliol 2015
5. *Angular momentum effects on the pick up process of neon atoms by superfluid helium nanodroplets.*
Miquel Blancafort Jorquera
Facultat de Química, Universitat de Barcelona.
Juliol 2015
6. *Crowding Effects on Oligomeric Enzymes: Kinetics Analysis of the ALKP-Catalyzed Hydrolysis*
Claudia Hernández Carro
Facultat de Farmàcia, Universitat de Barcelona.
Juliol 2015
7. *Capture of Ne atoms by ⁴He nanodroplets at low energies. Quantum vs. classical comparison at J=0.*
Arturo Sopena Moros
Facultat de Química, Universitat de Barcelona.
Juliol 2015
8. *Simulació de l'adsorció de gasos en metal-organic frameworks, usant un camp de forces reactiu.*
Carles Martí Aliod
Facultat de Química, Universitat de Barcelona.
Juliol 2015

PARTICIPACIÓ A CONGRESSOS 2015

Journées de la Division Chimie de Coordination (JCC) de la Société Chimique de France

Talence (França)

Analyse de forme des composées de coordination (conferencia plenària).

S. Alvarez.

ACS National Meeting

Boston (Estats Units)

Reaction pathway prediction and differentiation in the TBP geometries found in vanadium-phosphatase protein complexes using shape analysis.

I. Sánchez-Lombardo, S. Alvarez, C. McLauchlan, D. C. Crans.

Computational modeling of nanostructured ceria for the rational design of catalytic materials

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

Pacificchem 2015,

Honolulu (Estats Units)

Distortions in decavanadates and how that may impact interactions with biological interfaces. (comunicació oral).

D. C. Crans, I. Sánchez-Lombardo, S. Alvarez, N. Levinger.

European Workshop on Theoretical approaches of Molecular Magnetism: Jujols VIII

Bages (França)

Spin Crossover-induced Changes in the Coordination Sphere.

S. Alvarez.

Room temperature magnetoresistance in single-molecule devices.

E. Ruiz.

Modeling the ligand tuning effect over the transition temperature in Spin-Crossover systems using Density Functional Methods.

J. Cirera.

Workshop aportando valor al CO₂, organized by The Spanish Technological Platform for CO₂ (PTECO₂) and the Spanish Technological Platform for Sustainable Chemistry (SusChem)

Madrid (Espanya)

Influence of impurities in CO₂ capture over a zeolitic material

A. Díaz-Márquez, P. Gamallo, D. Bahamón, L. F. Vega

6th Iberian Meeting on Colloids and Interfaces (RICI6)

Gimerães (Portugal)

CO₂ separation from multicomponent mixtures by adsorption in MOF Cu-BTC and zeolite 13X

D. Bahamon, A. Diaz-Marquez, P. Gamallo, L. F. Vega

In-vivo-like study of the excluded volume effects on the kinetics of enzymatic reactions
C. Balcells, C. Hernández, M. Via, I. Pastor, C. Rey-Castro, J.L. Garcés, S. Madurga, E. Vilaseca, M. Cascante, F. Mas

Crowding effects on oligomeric enzymes: kinetic analysis of the ALKP-catalyzed hydrolysis
C. Hernández, C. Balcells, M. Via, I. Pastor, J.L. Garcés, S. Madurga, M. Cascante, F. Mas

Dissolution of nanomaterials in the context of safety assessment studies. Relevance of dynamic and equilibrium speciation techniques
C. Rey-Castro, C.A. David, S. Cruz-González, J. Salvador, F. Mas, J. Galceran, J. Puy

Coupling of conformational and ionization equilibria in a linear polymer. The site binding/rotational state (SBRIS) modelling
S. Madurga, J.L. Garcés, M. Borkovec

Masterquímica XI

Barcelona (Espanya)

Estudi teòric de l'adsorció de O₂, N₂ i CO₂ sobre faujasites amb diferents distribucions de Na⁺ preadsorbit
G. Alonso, R. Sayós, X. Giménez, P. Gamallo

Efecte de l'aglomeració macromolecular en enzims oligomèrics; anàlisi cinètica de la hidròlisi de fosfat catalitzada per ALKP
C. Hernández, C. Balcells, M. Via, I. Pastor, J.L. Garcés, S. Madurga, M. Cascante, F. Mas

Simulació per Dinàmica Browniana de processos de reacció-difusió de proteïnes en medis intracel·lulars
M. Via, P.M. Blanco, S. Madurga, E. Vilaseca, F. Mas

XXXI Annual meeting of the reference network of R+D+I on Theoretical and Computational Chemistry

Girona (Espanya)

Effect of Na⁺ addition of O₂, N₂ and CO₂ on Faujasite frameworks: a DFT study
G. Alonso, R. Sayós, X. Giménez, L. F. Vega, P. Gamallo

Effects of reaction conditions on copper-catalyzed water-gas shift reaction: a kinetic Monte Carlo study
H. Prats, L. Álvarez, F. Illas, R. Sayós

Ionization mechanism of citric acid in water. An ab initio study and statistical-mechanics treatment of NMR titration data.
S. Madurga, J.L. Garcés, M. Nedyalkova, F. Mas

Fundamentals of Methanol Synthesis on Molybdenum Carbide Based Catalysts

S. Posada-Pérez, F. Viñes, P.J. Ramírez, J.A. Rodríguez, F. Illas

Magnetic Coupling in Heterodinuclear Complexes

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

Triarylmethyl Radicals: Tunneable Building Blocks for Molecular Spintronics

I. Alcón, S.T. Bromley

Effects of Reaction Conditions on Copper-Catalyzed Water-Gas-Shift Reaction: A Kinetic Monte Carlo Study

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

VI IQTCUB Symposium

Barcelona (Espanya)

Theoretical study of O₂, N₂ and CO₂ adsorption over faujasites with different preadsorbed Na⁺ distributions

G. Alonso, R. Sayós, X. Giménez, L. F. Vega, P. Gamallo

Crowding effects on oligomeric enzymes: kinetic analysis of the ALKP-catalyzed hydrolysis

C. Hernández, C. Balcells, M. Via, I. Pastor, J.L. Garcés, S. Madurga, M. Cascante, F. Mas

Brownian motion simulations of reaction-diffusion processes of proteins in intracellular media

P.M. Blanco, M. Via, S. Madurga, J.L. Garcés, E. Vilaseca, F. Mas

Coupling of conformational and ionization equilibria in a linear polymer. The site binding/rotational state (SBRIS) modelling

S. Madurga, J.L. Garcés, M. Borkovec

Stabilization of Open-Shell States in Purely Organic Molecules

D. Reta

Effects of Reaction Conditions on Copper-Catalyzed Water-Gas-Shift Reaction: A Kinetic Monte Carlo Study

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

Accurate determination of chemical ordering in several nm large bimetallic nanoparticles

G. Kovács, S. M. Kozlov, R. Ferrando, K. M. Neyman

10th European Conference on Computational Chemistry

Fulda (Alemanya)

Water gas shift reaction on Cu(111) surface: A first-principles based kinetic Monte Carlo study

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

QM/MM study of a viral serine protease reaction mechanism: Importance of the active centre description

J. A. Martínez, M. González, A. Skelton

European Conference on Surface Science (ECOSS 31)

Barcelona (Espanya)

DFT study of the Si/Al ratio in the adsorption of O₂, N₂ and CO₂ on faujasite.

G. Alonso, R. Sayós, X. Giménez, L. F. Vega, P. Gamallo

Influence of step sites in the water-gas shift reaction on copper surfaces

H. Prats, L. Alvarez, P. Gamallo, F. Illas, R. Sayós

IV New trends in Computational Chemistry for Industry Applications

Barcelona (Espanya)

Impact of van der Waals interactions on the water gas shift reaction over copper surfaces

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

The importance of framework cations in the selective adsorption of CO₂ compared to O₂ and N₂ in faujasite structures.

G. Alonso, R. Sayós, X. Giménez, P. Gamallo

In-vivo-like study of the excluded volume effects on the kinetics of enzymatic reactions

C. Balcells, C. Hernández, M. Via, I. Pastor, C. Rey-Castro, J.L. Garcés, S. Madurga, E. Vilaseca, M. Cascante, F. Mas

Brownian motion simulations of reaction-diffusion processes of proteins in intracellular media

P.M. Blanco, M. Via, S. Madurga, J.L. Garcés, E. Vilaseca, F. Mas

Triarylmethyl Radicals: Potential Building Blocks for Molecular Spintronics

I. Alcón, D. Reta, I.P.R. Moreira, S.T. Bromley

Impact of van der Waals Interactions on the Water Gas Shift Reaction over Copper Surfaces

H. Prats, L. Álvarez-Falcón, P. Gamallo, F. Illas, R. Sayós

Surface Contact Engineering in Photoactive ZnO Nanostructures

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

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

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

Performance of Density Functional Theory Based Methods in Predicting Core-Level Binding Energies and the Physical Meaning of Kohn-Sham Orbital Energies

N. Pueyo-Bellafont, P.S. Bagus, F. Illas

Effect of charge transfer between CeO₂(111) support and Pt nanoparticles on their properties

S.M. Kozlov, K.M. Neyman

Accurate determination of chemical ordering in several nm large bimetallic nanoparticles

G. Kovács, S. M. Kozlov, R. Ferrando, K. M. Neyman

First approach to the diffusion of hydrogen confined in single-walled carbon nanotubes using 6D quantum dynamics

M. Mondelo-Martell, F. Huarte-Larrañaga

4th workshop on Theoretical Chemistry and Computational Modeling

Madrid (Espanya)

Studying the CO₂ capture problem in dry air through DFT calculations applied of faujasite frameworks

G. Alonso, R. Sayós, X. Giménez, P. Gamallo

Kinetic Monte Carlo simulations of the water-gas shift reaction on copper catalysts from DFT calculations.

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

XV Congress of the Spanish Biophysical Society (SBE 2015)

Granada (Espanya)

In-vivo-like study of the excluded volume effects on the kinetics of enzymatic reactions

C. Balcells, C. Hernández, M. Via, I. Pastor, J.L. Garcés, S. Madurga, E. Vilaseca, M. Cascante, F. Mas

Brownian motion simulations of reaction-diffusion processes of proteins in intracellular media

M. Via, P.M. Blanco, S. Madurga, J.L. Garcés, E. Vilaseca, F. Mas

Crowding effects on oligomeric enzymes: kinetic analysis of the ALKP-catalyzed hydrolysis

C. Hernández, C. Balcells, M. Via, I. Pastor, J.L. Garcés, S. Madurga, M. Cascante, F. Mas

Congress of Theoretical Chemists of Latin Expression – Chitel 2015

Torino (Itàlia)

Performance of Exchange-Correlation Functionals on Transition Metals

F. Viñes

Computational Approaches to Materials Design – CAMD 2105

Aveiro (Portugal)

Performance of Exchange-Correlation Functionals on Transition Metals

F. Viñes

Sociedad Española de Catálisis – SECAT 2015

Barcelona (Espanya)

Catalizadores de Carburo de Molibdeno para la Síntesis de MEtanol

S. Posada-Pérez, F. Viñes, J.A. Rodríguez, F. Illas

9th RES Users' Conference & 4th Annual HPC Advisory Council Spain Conference

Barcelona (Espanya)

Supercomputation and Realistic Models of Photocatalysts Nanoparticles

F. Illas

CECAM workshop: Emergent structural and electronic phenomena at interfaces of nanoscale oxides

EPFL, Lausanne (Suïssa)

A plethora of polymorphs: oxide nanofilms and nanoporous oxide phases from structure prediction

S.T. Bromley

Nanostructured metal oxides and transition metal nanoparticles interacting with oxide surfaces from density-functional modelling

S.M. Kozlov, K.M. Neyman

ELECSPIN 2015 – International Workshop on Organic and Graphene ELECTronics and SPINtronicS

UAB centro de congresses, Barcelona (Espanya)

Controlling Spin Localisation in Tryarylmethyl Radicals

S. T. Bromley

FOXES (Formation of Oxides around Evolved Stars) kick-off meeting

Bildungszentrum Hotel, Basel (Suïssa)

Structures of Oxide Clusters Entering Dust Formation

S. T. Bromley

Gordon Research Conference: Clusters & Nanostructures

Melia Golf Vichy Catalan Business and Convention Center, Girona (Espanya)

Metal Oxides and their Alloys: Clusters versus Bulk

S. T. Bromley

British Association for Crystal Growth 46th Annual Conference

Queen Mary University of London, London (Regne Unit)

Nanocrystals versus nanoclusters: limits on crystallinity and small size

S. T. Bromley

Workshop: Silicates in Space 2015

University of Heidelberg, Heidelberg (Alemanya)

Nucleation of SiO and Silicates from the Bottom-up

S. T. Bromley

Workshop “Catalysis Meets Sensing”

Karlsruhe Institute of Technology, Karlsruhe (Alemanya)

Density-functional modelling of metal-metaloxide nanostructures for catalysis and energy technologies

K.M. Neyman

**International FOXSI Symposium, SFB “Functional Oxide Surfaces and Interfaces (FOXSI)”
(May 11-13, invited lecture)**

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

Metal-metaloxide nanostructures in catalysis and energy technologies from a viewpoint of density functional modelling

K.M. Neyman

International Symposium on Frontiers in Computational Catalysis

Tsinghua University, Beijing (Xina)

Theoretical modelling in heterogeneous catalysis: As simple as possible, but not simpler

K.M. Neyman

11th International Conference on Diffusion in Solids and Liquids

Munich (Alemanya)

Interactions of hydrogen with transition metal nanoparticles from first principles

K.M. Neyman

CECAM Workshop “Modeling metal-based nanoparticles: toward realistic environments”
CEMES, Toulouse (França)

As simple as possible, but not simpler: Density-functional modelling of metal nanoparticles in catalysis
K.M. Neyman

XII European Congress on Catalysis (EuropaCat) “Catalysis: Balancing the use of fossil and renewable resources” (August 30-September 4, keynote lecture)
Kazan (Rússia)

Approaching complexity in heterogeneous catalysis by density-functional modelling
K.M. Neyman

A GGA+U DFT investigation of silver atom, trimer and tetramer supported by a nanosized particle Ce₂₁O₄₂
V.A. Nasluzov, S. Laletina, E.I. Ivanova Shor, A.M. Shor, K.M. Neyman

Thomas Young Centre, The London Centre for the theory and Simulation of Materials
London (Regne Unit)

As simple as possible, but not simpler: DFT modelling of nanostructures in catalysis and energy technologies
K.M. Neyman

Chemical Reactions at Surfaces (Gordon Research Seminar), Surface Science Techniques for Addressing Contemporary Issues
Ventura (Estats Units)

Combining theory and experiment for the rational design of nanostructured Pt-CeO₂ catalytic 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

3S15 28th Symposium on Surface Science (3S15)
Les Arcs 1800 (França)

Atomically dispersed and oxide-supported platinum in fuel cell catalysis: from surface science to in-situ spectroelectrochemistry
J. Libuda, O. Brummel, A. Bruix, Y. Lykhach, I. Matolínová, A. Neitzel, F. Faisal, T. Skála, N. Tsud, M. Vorokhta, V. Stetsovych, K. Ševčíková, J. Mysliveček, I. Khalakhan, R. Fiala, M. Václavů, K.C. Prince, F. Illas, V. Matolín, K.M. Neyman

International Workshop “Low-precious-metal-content catalysts for PEM fuel cells”

Dijon (França)

Computational studies of nanoparticulate models of catalysts in the ChipCAT project

K.M. Neyman

Tuning Pt catalysts for fuel cells by metal-oxide interactions

S.M. Kozlov, K.M. Neyman

Modeling interactions of transition metal species with ceria nanoparticles for applications in fuel cell catalysts

A. Figueroba, G. Kovács, A. Bruix, K.M. Neyman

Surface composition of magnetron sputtered Pt-Co thin film catalyst for proton exchange membrane fuel cells

M. Vorokhta, M. Václavů, I. Khalakhan, R. Fiala, P. Kúš, T. Skála, N. Tsud, J. Lavková, V. Potin, I. Matolínová, G. Kovács, S.M. Kozlov, K.M. Neyman, V. Matolín

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

Poznan (Polònia)

Recent progress in density functional studies of ceria-based nanostructures: Inspiration by experimentalists from Erlangen and Prague

A. Figueroba, S.M. Kozlov, K.M. Neyman

XXVI International Symposium on Molecular Beams (ISMB 2015)

Parador of Segovia, Segovia (Espanya)

Dynamics and kinetics of the $X + H_2^+ \rightarrow XH_2^+$ ($X=He, Ne, Ar$) capture processes as a function of temperature

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

Dynamics and kinetics of $O + H_2^+ \rightarrow OH^+ + H$, $OH + H^+$ on the two lowest potential energy surfaces

R. Martínez, M. Paniagua, C. Petrongolo, P. Gamallo, J. Mayneris-Perxachs, M. González

Stereodynamics and reaction mode of the $O(^3P) + CH_4, CD_4 \rightarrow OH + CH_3, OD + CD_3$ combustion reactions on the ground PES

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

Guided ion beam and ab initio studies of the $Na^+ + i-C_3H_7Br$ and $Na^+ + i-C_3H_7OH$ gas phase reactive collisions

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

Ion-molecule collisions: Crossed-beams and guided-ion-beams and computational studies of reactive processes

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

Quantum Dynamics Study of the H₂ molecule confined in Single-walled Carbon Nanotubes

M. Mondelo-Martell, F. Huarte-Larrañaga

XIII International Workshop on Quantum Reactive Scattering (QRS 2015)

University of Salamanca, Salamanca (Espanya)

Quantum dynamics of chemical and physical processes involving superfluid helium nanodroplets

A. Vilà, M. González, R. Mayol

Born-Oppenheimer and Renner-Teller coupled-channel quantum reaction dynamics of O + H₂⁺ collisions

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

The 5th Workshop Quantum Days in Bilbao Quantum Days in Bilbao: Mathematical Methods in Atomic and Molecular Physics

BCAM - Basque Center for Applied Mathematics, Bilbao (Espanya)

Quantum dynamics of physicochemical processes involving atoms or molecules and superfluid ⁴He nanodroplets

A. Vilà, M. González, R. Mayol

24th International Symposium on Ion Atom Collisions (ISIAC 2015)

Sant Jordi College, University of Barcelona, Barcelona (Espanya)

Symposium organitzat per membres de l'IQTCUB: A. Aguilar (Chairman), M. Albertí, J. de Andrés, J.M. Lucas, F. Huarte (Secretari)

Born-Oppenheimer and Renner-Teller coupled-channel quantum reaction dynamics of O + H₂⁺ → OH⁺ + H, OH + H⁺

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

An environmentally relevant process: Collisions between ground state Na ions and N₂O molecules in the 0.1-5 KeV

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

Experimental and computational study of the Li⁺ + i-C₃H₇Br and Li⁺ + i-C₃H₇OH gas phase reactive collisions

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

Ion-molecule collisions in Titan's atmosphere: A prebiotic mechanism

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

Quantum dynamics of the hydrogen molecule diffusion along a single-walled carbon nanotube

M. Mondelo-Martell, F. Huarte-Larrañaga

Spanish-Italian Medicinal Chemistry Congress (SIMMC 2015),(PRBB)

PRBB, Barcelona (Espanya)

Design, Synthesis, cell growth inhibition and antitumor screening of New 6,9-disubstituted Purines by inhibition of CDK4/6

A. Vinuesa, O. Abián, J. Rubio, MD. Pujol.

Design, Synthesis and Biological Activity of new K-ras inhibitors

L. Grau, R. Soucek, J. Rubio, MD. Pujol

II Simposio de Jóvenes Investigadores de la Sociedad Española de Química Terapéutica.

Barcelona (Espanya)

Studies of CDK4/6 inhibitors such as antitumor agents: Design, Synthesis and cell growth inhibition

A. Vinuesa, O. Abián, J. Rubio, MD. Pujol

Preparation of new pyrazolidin-3-ones. Evaluation of their antitumor activity by K-ras inhibition

L. Grau, R. Soucek, J. Rubio, MD. Pujol

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

Federal Far East University, Vladivostok (Rússia)

Analyzing the Interplay Between Local and Global Symmetries in Molecular Chemistry

P. Alemany

3rd International Conference on Materials Science

Universidad Austral de Chile, Valdivia (Xile)

Continuous Shape and Symmetry Measures: a new Tool for Structural Characterization

P. Alemany

Molecular Quantum Dynamics: Benchmarks and State of the Art

CECAM, Lausanne (Suïssa)

Nonadiabatic Molecular Dynamics with Conditional Wave Functions

G. Albareda, J. M. Bofill, A. Abedi, I. Tavernelli, A. Rubio.

Psi-k 2015 Conference

Kursaal, San Sebastià (Espanya)

Adiabatic and Nonadiabatic Molecular Dynamics with Conditional Wave Functions

G. Albareda, J. M. Bofill, A. Abedi, I. Tavernelli, A. Rubio.

International Conference on Unsolved Problems on Noise

Casa de la Convalescència, Barcelona (Espanya)

Role of Current-Voltage Correlations on the Electric Power of Nanoscale Devices

G. Albareda, F. L. Traversa, and X. Oriols.

Current Fluctuations Originating from Non-Metallic (Physical) Leads

G. Albareda, L. Chen, X. Oriols, I. Franco.

XXIX International Conference on Photonic, Electronic and Atomic Collisions (ICPEAC 2015)

Toledo (Espanya)

Crossed-beams and ab initio study of the gas phase charge transfer with excitation in N₂O and Li⁺ collisions of environmental interest

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

Quantum dynamics of the hydrogen molecule confined in single-walled carbon nanotubes

M. Mondelo-Martell, F. Huarte-Larrañaga

ICIQ-FIFC Spain-Japan Symposium on Theoretical and Computational Chemistry of Complex Systems

Tarragona (Espanya)

Exploring Potential Energy Surfaces of Complex Molecular Systems using Zermelo's Navigation Variational Model

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

How Does Nature Make Glycosidic Bonds. Ab initio QM/MM Metadynamics Investigations

C. Rovira

CECAM School: Quantum dynamics in molecular systems: theory, modelling, simulation.

IDRIS (Institut du développement des ressources informatiques et scientifiques), Orsay (França)

Diffusion of hydrogen along SWCNT: a first approach using quantum dynamics methods

M. Mondelo-Martell, F. Huarte-Larrañaga

2nd BSC International Doctoral Symposium

Universitat Politècnica de Catalunya, Barcelona (Espanya)

Quantum dynamics study of the hydrogen molecule confined in single-walled carbon nanotubes

M. Mondelo-Martell, F. Huarte-Larrañaga

Virtual Environments and detailed simulations of molecular processes, Symposium in honor of Prof. A. Laganà

MonteLino, Bettona, Perugia (Itàlia)

Experimental and computational studies of ion-molecule reactions

A. Aguilar

Explicit control over spin states in technology and biochemistry (ECOSTBIO) workshop

University of Marseille, Marseille (França)

An ionizable tryptophan residue imparts catalase activity to a peroxidase core. Insights from QM/MM simulations

C. Rovira

Carbohydrate active enzymes in medicine and biotechnology

University of St. Andrews, St. Andrews (Regne Unit)

Sugar conformational changes and reactivity of carbohydrate-active enzymes. Ab initio QM/MM metadynamics investigations

C. Rovira

Future trends in protein science. 13th workshop in Protein.DTU

Technical University of Denmark, Lyngby (Dinamarca)

How Does Nature Make Glycosidic Bonds

C. Rovira

Glycosyl cation day

University of Poitiers, Poitiers (França)

Sugar conformational changes and reactivity of carbohydrate-active enzymes. Ab initio QM/MM metadynamics investigations

C. Rovira

ESTADES EN CENTRES EXTERNS

- P. Gamallo **MATGAS, Barcelona (Espanya)**
Professor visitant invitat. Gener-Febrer 2015
- G. Alonso **MATGAS, Barcelona (Espanya)**
Professor visitant invitat. Gener-Juny 2015
- M. Albertí **Univeristà di Perugia, Perugia (Itàlia)**
Estada de recerca. Febrer-Juliol 2015
- M. Mondelo Martell **University of Bielefeld, Bielefeld (Alemanya)**
Estada de recerca predoctoral. Març-Abril 2015
- J. Jornet Somoza **University of the Basque Country, San Sebastián (Espanya)**
Estada de recerca. Abril-Juliol 2015
- R. Reigada **Max Planck Institute, Berlin (Alemanya)**
Professor visitant invitat. Maig 2015
- G. Albareda **Max Planck for the Structure and Dynamics of Matter, Hamburg (Alemanya)**
Investigador visitant invitat. Juliol 2015
- J. Ribas **University of Wroclaw, Wroclaw (Polònia)**
Investigador visitant invitat. Juliol 2015
- K.M. Neyman **Friedrich-Alexander-Universität Erlangen-Nürnberg, Erlangen (Alemanya)**
Investigador visitant invitat. Juliol-Agost 2015
- C. Climent **Donostia International Physics Center, Donostia (Espanya)**
Estada de recerca predoctoral. Juliol i Setembre 2015

P. Alemany **Departamento de Química, Universidad Católica del Norte, Antofagasta (Xile)**

Investigador visitant invitat. Octubre 2015

S. Posada-Pérez **Brookhaven National Laboratory, Upton (Estats Units)**

Estada de recerca predoctoral. Octubre-Desembre 2015

PARTICIPACIÓ EN PROJECTES D'INVESTIGACIÓ

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

Grup d'Estructura Electrònica.

Santiago Alvarez Reverter, Universitat de Barcelona

2014SGR662, 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)

Simulació molecular aplicada (MOLSIMAP)

Lourdes Vega Fernández, MATGAS

2014SGR1582, 2014-2016

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

Grup de Recerca Reconegut i Finançat per la Generalitat de Catalunya

Francesc Illas Riera

Universitat de Barcelona

2014SGR97, 2014-2016

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

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)

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)

ICREA Acadèmia

Eliseo Ruiz, Universitat de Barcelona

2014-2018,

ICREA (Generalitat de Catalunya)

Simulación de sistemas cuánticos nanoestructurados fuera equilibrio.

Angel Rubio Secades, Universitat del País Basc

IT578-13, 2013-2018

Comunidad Autónoma del País Basco

Estructura electrónica y propiedades de moléculas y sólidos inorgánicos.

Eliseo Ruiz Sabín, Universitat de Barcelona

CTQ2011-23862-C02, 2012-2014, extended until 6/2015.

MICINN

Mecanismo de transición de fase e interacción magnética en cristales moleculares magnéticos que presentan transición de espín

Juan J. Novoa Vide and Mercè Deumal, Universitat de Barcelona

MAT2014-54025-P, 2015-2017

Ministerio de Economía y Competitividad (MINECO)

Captura y separación de gases y contaminantes en procesos Industriales sostenibles

Ramón Sayós Ortega / Pablo Gamallo Belmonte, Universitat de Barcelona

CTQ2014-53987-R, 2015-2017

Ministerio de Economía y Competitividad (MINECO)

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)

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)

Modelización de Materiales Formados por Mezclas de Oxidos con Relevancia Tecnológica y Medioambiental.

Stefan Bromley, Universitat de Barcelona

MAT2012-30924, 2012-2015

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 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, 2012-2015

Dirección General de Investigación (DGI)

Dispositivos Electrónicos de baja Dimensionalidad para Aplicaciones de Radiofrecuencia y Digitales: Simulación y Desarrollo de Software.

Xavier Oriols Pladevall, Universitat Autònoma de Barcelona

TEC2012-31330, 2013-2015

Ministerio de Economía y Competitividad (MINECO)

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)

Moduladores fotoconmutables sintéticos para manipular remotamente proteínas endógenas: fotocontrol in vivo de canales iónicos pentaméricos.

Carne Rovira Virgili, Universitat de Barcelona

PCIN-2015-163-C02-01, 2015-2017

Ministerio de Economía y Competitividad (MINECO)

Simulation of reactive processes in proteins and enzymes by means of ab initio molecular dynamics and QM/MM techniques.

Carne Rovira Virgili, Universitat de Barcelona

CTQ2014-55174-P, 2015-2017

Ministerio de Economía y Competitividad (MINECO)

Materia blanda forzada, activa y viva.

Jaume Casademunt Viader and Francesc Sagués Mestre, Universitat de Barcelona

FIS2013-41144P, 2014-2016

Ministerio de Economía y Competitividad (MINECO)

El dominio único de c-Src: dominios proteicos desordenados en la superficie de la membrana celular.

Miquel Pons Vallès, Universitat de Barcelona

BIO2013-45793-R, 2014-2016

Ministerio de Economía y Competitividad (MINECO)

Knowledge Led Structure Prediction for Nanostructures

Scott Woodley, University College London

EP/K038958/1, 2013-2018

Engineering and Physical Sciences Research Council (UK)

Computational modelling and molecular dynamics simulations of oil/water wettability on carbonate rocks and clays

Ramón Sayós Ortega / Pablo Gamallo Belmonte, Universitat de Barcelona

Referència, 308465

Contrato de arrendamientos y servicios de I+D con REPSOL, S.A.

COMPHOTOCAT: - Computational design of TiO₂ based nanoparticles for improved photocatalytic activity towards water splitting under visible sunlight

Francesc Illas Riera

Universitat de Barcelona

PRACE - 2014112608, 2015-2016

Partnership for Advanced Computing in Europe (PRACE)

Reducible oxide chemistry, structure and functions

Francesc Illas Riera, (representative in Spain), Konstantin Neyman (deputy representative in Spain),

Universitat de Barcelona

CM1104, 2012-2016

European Framework for Cooperation in Science and Technology (COST)

Explicit Control Over Spin-States in Technology and Biochemistry

Marcel Swart (University of Girona), Carme Sousa Romero (participant of the Universitat of Barcelona)

Universitat de Barcelona

CM1305, 2014-2018

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)

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'

Theoretical Chemistry and Computational Modelling

Juan Novoa Vide, Universitat de Barcelona

H2020-MSCA-ITN-2014-642294

Horizon 2020, Innovative Training Networks

A comprehensive and standardised e-infrastructure for analysing medical metabolic phenotype data (PhenoMeNa)

Marta Cascante Serratosa

8P1MCA - HORIZON 2020, 2015-2018.

Unió Europea.

PhenoMeNa: A comprehensive and standardised e-infrastructure for analysing medical metabolic phenotype data (PhenoMeNa).

Marta Cascante Serratosa, Universitat de Barcelona

654241, 2015-2018

Unió Europea

Deciphering the Metabolism of Haematological Cancers (HaemMetabolome)

Marta Cascante Serratosa, Universitat de Barcelona

675790, 01/10/2015- 30/09/2019

Unió Europea

NOMAD – Novel Materials Discovery

Matthias Scheffler, Fritz-Haber-Institut der Max-Planck-Gesellschaft, Berlin

NoMaD - 676580, 2015-2018

Horizon 2020-EINFRA-5-2015, Centers of Excellence for Computing applications

Device simulation (RF), NannoMechanics and Spintronics.

David Jiménez Jiménez, Universitat Autònoma de Barcelona

604391 Graphene, 2013-2016

European Commission (FET Flagship)

Dynamical processes in open quantum systems: pushing the frontiers of theoretical spectroscopy (DYNAMO).

Angel Rubio Secades, Universitat del País Basc

ERC-2010-AdG_20100224, 2011-2016

European Research Council (ERC)

100111010
101010110
11 **iqtc** 0
010111101
010000010



Institut de Química Teòrica
i Computacional